

Supporting Information

First-principles microkinetic simulations revealing the scaling relations and structure sensitivity of CO₂ hydrogenation to C₁ & C₂ oxygenates on Pd surfaces

Jun Ke, Yang-Dong Wang, Chuan-Ming Wang*

State Key Laboratory of Green Chemical Engineering and Industrial Catalysis, Sinopec Shanghai
Research Institute of Petrochemical Technology, Shanghai 201208, China

*E-Mail: wangcm.sshy@sinopec.com

Table S1. Adsorption energies (E_{ads}) with ZPE corrections of the involved intermediates in the hydrogenation of CO₂ to C₁ & C₂ oxygenates and methane on Pd(211) and Pd(111) surfaces. All values are in eV.

	Species	Pd(211)	Pd(111)		Species	Pd(211)	Pd(111)
M1	CO ₂ *	-0.41	-0.08	M36	CH ₂ CHOH*	-1.60	-1.39
M2	HCOO*	-3.07	-2.68	M37	CH ₃ CHOH*	-2.34	-2.18
M3	H ₂ COO*	-3.65	-3.37	M38	CCH ₂ O*	-7.39	-6.45
M4	COOH*	-2.73	-2.57	M39	CHCH ₂ O*	-5.66	-5.45
M5	HCOOH*	-0.97	-0.76	M40	CH ₂ CH ₂ O*	-3.90	-3.51
M6	H ₂ COOH*	-2.52	-2.13	M41	CH ₃ CH ₂ O*	-2.58	-2.19
M7	HOCOH*	-3.04	-2.68	M42	CCH ₂ OH*	-6.72	-6.65
M8	HOCHOH*	-2.48	-2.39	M43	CHCH ₂ OH*	-4.39	-4.20
M9	CO*	-2.18	-2.23	M44	CH ₂ CH ₂ OH*	-2.37	-2.25
M10	HCO*	-2.63	-2.50	M45	CH ₃ CH ₂ OH*	-0.98	-0.75
M11	H ₂ CO*	-1.09	-0.77	M46	CCOO*	-8.33	-7.61
M12	H ₃ CO*	-2.44	-2.01	M47	CHCOO*	-5.77	-5.41
M13	COH*	-4.70	-4.68	M48	CH ₂ COO*	-3.97	-3.45
M14	HCOH*	-4.72	-4.36	M49	CH ₃ COO*	-2.91	-2.55
M15	CH ₂ OH*	-2.24	-2.06	M50	CCOOH*	-6.85	-6.63
M16	CH ₃ OH*	-0.78	-0.58	M51	CHCOOH*	-4.37	-4.19
M17	C*	-7.81	-7.22	M52	CH ₂ COOH*	-2.43	-2.12
M18	CH*	-6.50	-6.54	M53	CH ₃ COOH*	-1.06	-0.84
M19	CH ₂ *	-4.11	-3.94	M54	CCOH ₂ OH*	-5.84	-5.91
M20	CH ₃ *	-2.03	-1.88	M55	CHCOH ₂ OH*	-3.74	-3.66
M21	CH ₄ *	-0.28	-0.23	M56	CH ₂ COH ₂ OH*	-1.72	-1.44
M22	CCO*	-5.54	-5.10	M57	CH ₃ COH ₂ OH*	-2.62	-2.36
M23	CHCO*	-3.55	-3.42	M58	CCHOO*	-9.64	-8.58
M24	CH ₂ CO*	-1.67	-1.52	M59	CHCHOO*	-7.08	-6.51
M25	CH ₃ CO*	-2.62	-2.52	M60	CH ₂ CHOO*	-5.33	-4.83
M26	CCOH*	-6.08	-5.05	M61	CH ₃ CHOO*	-3.84	-3.48
M27	CHCOH*	-3.27	-2.91	M62	CCHOOH*	-8.45	-7.53
M28	CH ₂ COH*	-3.47	-3.42	M63	CHCHOOH*	-5.82	-5.47
M29	CH ₃ COH*	-4.77	-4.37	M64	CH ₂ CHOOH*	-3.98	-3.72
M30	CCHO*	-6.61	-6.26	M65	CH ₃ CHOOH*	-2.61	-2.24
M31	CHCHO*	-4.35	-4.16	M66	H*	-2.70	-2.78
M32	CH ₂ CHO*	-2.49	-2.20	M67	O*	-4.74	-4.78
M33	CH ₃ CHO*	-1.06	-0.73	M68	OH*	-3.17	-2.69
M34	CCHOH*	-5.82	-5.64	M69	H ₂ O*	-0.51	-0.41
M35	CHCHOH*	-3.47	-3.36				

Table S2. Reaction energies (ΔE) and energy barriers (E_a) with ZPE corrections, reaction free energies at 500 K (ΔG), free energy barriers at 500 K (G_a), forward rate constants at 500 K (k_{fwd}), and backward rate constants at 500 K (k_{bkd}) of the involved elementary steps in the hydrogenation of CO₂ to C₁ & C₂ oxygenates and methane on Pd(211) and Pd(111) surfaces.

Steps		Pd(211)						Pd(111)					
		ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹	ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹
R1	CO ₂ * + H* = COOH* + *	0.32	0.80	0.32	0.78	1.6×10 ⁵	2.9×10 ⁸	0.23	0.69	0.29	0.67	1.9×10 ⁶	1.5×10 ⁹
R2	HCOO* + H* = HCOOH* + *	0.43	0.78	0.35	0.73	4.4×10 ⁵	1.5×10 ⁹	0.34	0.66	0.24	0.60	9.1×10 ⁶	2.3×10 ⁹
R3	H ₂ COO* + H* = H ₂ COOH* + *	-0.43	0.37	-0.51	0.36	2.5×10 ⁹	1.8×10 ⁴	-0.23	0.52	-0.27	0.56	2.2×10 ⁷	4.5×10 ⁴
R4	COOH* + H* = HOCOH* + *	0.18	0.55	0.18	0.58	1.4×10 ⁷	8.3×10 ⁸	0.46	0.72	0.45	0.66	2.5×10 ⁶	8.2×10 ¹⁰
R5	HCOOH* + H* = HOCHOH* + *	0.82	1.26	0.82	1.28	1.2×10 ⁰	2.4×10 ⁸	0.78	1.07	0.79	1.08	1.2×10 ²	1.1×10 ¹⁰
R6	CO ₂ * + H* = HCOO* + *	0.29	0.96	0.31	0.99	1.2×10 ³	1.7×10 ⁶	0.43	1.00	0.46	0.90	8.8×10 ³	3.6×10 ⁸
R7	HCOO* + H* = H ₂ COO* + *	1.87	1.90	1.94	1.94	2.9×10 ⁻⁷	1.0×10 ¹³	1.84	1.98	1.85	2.05	2.1×10 ⁻⁸	9.5×10 ¹⁰
R8	COOH* + H* = HCOOH* + *	0.40	0.82	0.34	0.76	2.2×10 ⁵	6.0×10 ⁸	0.53	1.03	0.41	0.95	2.9×10 ³	3.6×10 ⁷
R9	HCOOH* + H* = H ₂ COOH* + *	1.00	1.12	1.08	1.18	1.2×10 ¹	9.3×10 ¹¹	1.27	1.37	1.35	1.40	7.4×10 ⁻²	2.7×10 ¹²
R10	HOCOH* + H* = HOCHOH* + *	1.04	1.13	0.99	1.15	2.6×10 ¹	2.4×10 ¹¹	0.85	0.94	0.75	0.90	9.7×10 ³	3.3×10 ¹¹
R11	C* + H* = CH* + *	0.52	0.96	0.50	0.95	2.8×10 ³	3.3×10 ⁸	-0.04	1.13	-0.05	1.08	1.4×10 ²	3.9×10 ¹
R12	CH* + H* = CH ₂ * + *	0.44	0.82	0.40	0.82	6.1×10 ⁴	6.7×10 ⁸	0.74	0.90	0.67	0.89	1.2×10 ⁴	7.7×10 ¹⁰
R13	CH ₂ * + H* = CH ₃ * + *	0.14	0.63	-0.01	0.62	6.5×10 ⁶	4.7×10 ⁶	0.21	0.77	0.09	0.77	1.7×10 ⁵	1.5×10 ⁶
R14	CH ₃ * + H* = CH ₄ * + *	0.11	0.54	0.02	0.52	6.3×10 ⁷	9.4×10 ⁷	0.09	0.62	-0.05	0.56	2.2×10 ⁷	6.2×10 ⁶
R15	CO* + H* = HCO* + *	1.27	1.27	1.21	1.25	2.8×10 ⁰	4.4×10 ¹²	1.53	1.63	1.53	1.64	2.9×10 ⁻⁴	8.1×10 ¹¹
R16	HCO* + H* = H ₂ CO* + *	0.66	0.90	0.65	0.94	3.3×10 ³	1.1×10 ¹⁰	0.94	1.10	0.91	1.08	1.5×10 ²	2.4×10 ¹¹
R17	H ₂ CO* + H* = H ₃ CO* + *	0.36	0.84	0.35	0.89	1.2×10 ⁴	4.3×10 ⁷	0.55	0.87	0.49	0.83	4.1×10 ⁴	3.8×10 ⁹
R18	COH* + H* = HCOH* + *	0.46	1.19	0.44	1.19	1.1×10 ¹	2.9×10 ⁵	0.89	1.15	0.91	1.20	8.8×10 ⁰	1.2×10 ¹⁰
R19	HCOH* + H* = CH ₂ OH* + *	0.66	0.87	0.58	0.86	2.5×10 ⁴	1.6×10 ¹⁰	0.56	1.04	0.47	1.02	5.3×10 ²	2.8×10 ⁷
R20	CH ₂ OH* + H* = CH ₃ OH* + *	0.29	0.72	0.17	0.78	1.5×10 ⁵	8.2×10 ⁶	0.38	0.77	0.30	0.80	1.0×10 ⁵	1.1×10 ⁸
R21	CCO* + H* = CHCO* + *	0.41	0.80	0.42	0.79	1.1×10 ⁵	2.2×10 ⁹	0.18	0.86	0.19	0.83	4.2×10 ⁴	3.5×10 ⁶
R22	CHCO* + H* = CH ₂ CO* + *	0.26	0.80	0.11	0.76	2.2×10 ⁵	2.6×10 ⁶	0.35	0.97	0.30	0.92	5.2×10 ³	5.6×10 ⁶
R23	CH ₂ CO* + H* = CH ₃ CO* + *	0.03	0.68	-0.09	0.72	6.3×10 ⁵	7.3×10 ⁴	0.07	0.88	0.08	0.94	3.8×10 ³	2.4×10 ⁴
R24	CCOH* + H* = CHCOH* + *	0.31	0.76	0.30	0.75	2.8×10 ⁵	2.9×10 ⁸	-0.29	0.89	-0.22	0.87	1.9×10 ⁴	1.2×10 ²
R25	CHCOH* + H* = CH ₂ COH* + *	0.40	0.73	0.38	0.73	4.2×10 ⁵	2.5×10 ⁹	0.18	0.83	0.18	0.83	4.3×10 ⁴	2.5×10 ⁶
R26	CH ₂ COH* + H* = CH ₃ COH* + *	-0.17	0.64	-0.27	0.65	3.2×10 ⁶	6.4×10 ³	0.26	0.84	0.19	0.84	3.9×10 ⁴	3.4×10 ⁶
R27	CCHO* + H* = CHCHO* + *	0.51	0.94	0.49	0.94	3.6×10 ³	2.8×10 ⁸	0.44	0.92	0.52	0.94	3.4×10 ³	6.4×10 ⁸
R28	CHCHO* + H* = CH ₂ CHO* + *	-0.03	0.62	-0.09	0.63	4.5×10 ⁶	5.7×10 ⁵	0.14	0.80	0.03	0.80	9.4×10 ⁴	1.9×10 ⁵
R29	CH ₂ CHO* + H* = CH ₃ CHO* + *	0.26	0.59	0.15	0.65	3.2×10 ⁶	9.7×10 ⁷	0.39	0.74	0.44	0.82	5.8×10 ⁴	1.7×10 ⁹

Table S2 (Continued)

Steps		Pd(211)						Pd(111)					
		ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹	ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹
R30	CCH ₂ O* + H* = CHCH ₂ O* + *	0.98	1.04	0.97	1.04	3.5×10 ²	2.0×10 ¹²	0.33	0.91	0.32	0.90	9.2×10 ³	1.4×10 ⁷
R31	CHCH ₂ O* + H* = CH ₂ CH ₂ O* + *	-0.05	0.65	-0.11	0.65	2.9×10 ⁶	2.4×10 ⁵	0.21	0.85	0.20	0.85	2.7×10 ⁴	2.6×10 ⁶
R32	CH ₂ CH ₂ O* + H* = CH ₃ CH ₂ O* + *	-0.18	0.55	-0.25	0.56	2.2×10 ⁷	6.3×10 ⁴	-0.10	0.63	-0.19	0.66	2.5×10 ⁶	3.1×10 ⁴
R33	CCHOH* + H* = CHCHOH* + *	0.36	0.87	0.32	0.86	2.4×10 ⁴	3.9×10 ⁷	0.36	0.86	0.35	0.83	4.1×10 ⁴	1.5×10 ⁸
R34	CHCHOH* + H* = CH ₂ CHOH* + *	-0.14	0.66	-0.26	0.65	3.1×10 ⁶	8.3×10 ³	0.05	0.85	-0.04	0.84	3.7×10 ⁴	1.6×10 ⁴
R35	CH ₂ CHOH* + H* = CH ₃ CHOH* + *	0.36	0.68	0.33	0.73	5.0×10 ⁵	9.8×10 ⁸	0.39	0.84	0.34	0.88	1.5×10 ⁴	3.8×10 ⁷
R36	CCH ₂ OH* + H* = CHCH ₂ OH* + *	0.44	0.93	0.38	0.94	3.1×10 ³	2.3×10 ⁷	0.65	1.05	0.77	1.05	3.1×10 ²	1.9×10 ¹⁰
R37	CHCH ₂ OH* + H* = CH ₂ CH ₂ OH* + *	0.24	0.69	0.22	0.72	5.9×10 ⁵	9.5×10 ⁷	0.25	0.91	0.22	0.89	1.2×10 ⁴	1.9×10 ⁶
R38	CH ₂ CH ₂ OH* + H* = CH ₃ CH ₂ OH* + *	-0.08	0.45	-0.24	0.40	9.1×10 ⁸	3.1×10 ⁶	0.11	0.70	-0.03	0.67	2.0×10 ⁶	9.5×10 ⁵
R39	CCOO* + H* = CHCOO* + *	0.63	1.05	0.62	0.92	5.0×10 ³	9.7×10 ⁹	0.33	0.84	0.31	0.84	3.5×10 ⁴	4.7×10 ⁷
R40	CHCOO* + H* = CH ₂ COO* + *	-0.08	0.68	-0.12	0.67	1.9×10 ⁶	1.1×10 ⁵	0.16	0.86	0.17	0.85	2.7×10 ⁴	1.3×10 ⁶
R41	CH ₂ COO* + H* = CH ₃ COO* + *	-0.27	0.64	-0.48	0.64	3.9×10 ⁶	5.8×10 ¹	-0.34	0.63	-0.49	0.62	5.7×10 ⁶	6.6×10 ¹
R42	CCOOH* + H* = CHCOOH* + *	0.48	0.94	0.46	0.94	3.8×10 ³	1.6×10 ⁸	0.52	1.04	0.57	1.04	3.3×10 ²	1.8×10 ⁸
R43	CHCOOH* + H* = CH ₂ COOH* + *	-0.02	0.68	-0.10	0.67	1.9×10 ⁶	1.8×10 ⁵	0.19	0.87	0.19	0.92	5.5×10 ³	4.5×10 ⁵
R44	CH ₂ COOH* + H* = CH ₃ COOH* + *	0.06	0.55	-0.05	0.55	3.2×10 ⁷	9.2×10 ⁶	0.05	0.82	-0.13	0.73	4.3×10 ⁵	1.8×10 ⁴
R45	CCHOO* + H* = CHCHOO* + *	0.59	1.00	0.58	0.95	2.7×10 ³	2.0×10 ⁹	0.18	0.96	0.19	0.95	2.7×10 ³	2.1×10 ⁵
R46	CHCHOO* + H* = CH ₂ CHOO* + *	-0.07	0.60	-0.07	0.60	8.9×10 ⁶	1.8×10 ⁶	-0.06	0.77	-0.12	0.77	1.9×10 ⁵	1.1×10 ⁴
R47	CH ₂ CHOO* + H* = CH ₃ CHOO* + *	-0.09	0.65	-0.17	0.64	3.8×10 ⁶	7.9×10 ⁴	-0.16	0.66	-0.19	0.67	2.0×10 ⁶	2.5×10 ⁴
R48	CCHOOH* + H* = CHCHOOH* + *	0.90	1.02	0.85	1.01	7.7×10 ²	3.1×10 ¹¹	0.40	0.91	0.39	0.89	1.1×10 ⁴	9.1×10 ⁷
R49	CHCHOOH* + H* = CH ₂ CHOOH* + *	-0.12	0.58	-0.12	0.50	8.9×10 ⁷	5.4×10 ⁶	-0.13	0.80	-0.07	0.81	7.8×10 ⁴	1.4×10 ⁴
R50	CH ₂ CHOOH* + H* = CH ₃ CHOOH* + *	-0.17	0.61	-0.26	0.60	9.0×10 ⁶	2.3×10 ⁴	0.02	0.71	-0.04	0.71	7.7×10 ⁵	3.1×10 ⁵
R51	CCO* + H* = CCHO* + *	0.60	1.02	0.58	1.02	6.0×10 ²	4.7×10 ⁸	0.58	1.18	0.51	1.19	1.2×10 ¹	1.7×10 ⁶
R52	CHCO* + H* = CHCHO* + *	0.71	1.01	0.65	0.96	2.0×10 ³	6.5×10 ⁹	0.84	1.10	0.85	1.10	8.8×10 ¹	2.9×10 ¹⁰
R53	CH ₂ CO* + H* = CH ₂ CHO* + *	0.42	0.81	0.45	0.83	4.3×10 ⁴	1.5×10 ⁹	0.63	0.98	0.57	0.98	1.4×10 ³	8.8×10 ⁸
R54	CH ₃ CO* + H* = CH ₃ CHO* + *	0.64	0.80	0.69	0.92	5.1×10 ³	4.7×10 ¹⁰	0.95	1.13	0.94	1.13	3.8×10 ¹	1.1×10 ¹¹
R55	CCHO* + H* = CCH ₂ O* + *	0.46	1.01	0.51	1.04	3.3×10 ²	4.2×10 ⁷	1.14	1.43	1.23	1.58	1.4×10 ⁻³	3.7×10 ⁹
R56	CHCHO* + H* = CHCH ₂ O* + *	0.93	1.00	0.99	1.04	3.8×10 ²	3.5×10 ¹²	1.03	1.29	1.03	1.33	4.0×10 ⁻¹	8.8×10 ⁹
R57	CH ₂ CHO* + H* = CH ₂ CH ₂ O* + *	0.91	1.11	0.97	1.18	1.4×10 ¹	8.2×10 ¹⁰	1.09	1.09	1.19	1.20	7.3×10 ⁰	7.9×10 ¹²
R58	CH ₃ CHO* + H* = CH ₃ CH ₂ O* + *	0.47	0.95	0.57	0.99	1.2×10 ³	6.9×10 ⁸	0.60	1.02	0.56	1.00	8.0×10 ²	3.8×10 ⁸
R59	CCOH* + H* = CCHOH* + *	0.67	1.06	0.66	1.06	2.3×10 ²	1.0×10 ⁹	-0.09	1.01	-0.03	1.06	1.9×10 ²	9.9×10 ¹
R60	CHCOH* + H* = CHCHOH* + *	0.73	1.13	0.68	1.13	4.5×10 ¹	3.1×10 ⁸	0.56	0.92	0.54	0.92	6.0×10 ³	1.8×10 ⁹
R61	CH ₂ COH* + H* = CH ₂ CHOH* + *	0.19	0.97	0.05	0.96	2.2×10 ³	6.4×10 ³	0.43	1.08	0.33	1.08	1.3×10 ²	2.9×10 ⁵
R62	CH ₃ COH* + H* = CH ₃ CHOH* + *	0.72	0.95	0.64	0.97	1.7×10 ³	4.9×10 ⁹	0.56	1.08	0.48	1.06	2.0×10 ²	1.4×10 ⁷

Table S2 (Continued)

Steps		Pd(211)						Pd(111)					
		ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹	ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹
R63	CCHOH* + H* = CCH ₂ OH* + *	0.26	1.00	0.22	0.97	1.8×10 ³	2.7×10 ⁵	0.23	1.00	0.07	0.97	1.6×10 ³	8.5×10 ³
R64	CHCHOH* + H* = CHCH ₂ OH* + *	0.35	0.99	0.28	0.96	2.0×10 ³	1.4×10 ⁶	0.52	1.04	0.49	1.02	5.7×10 ²	5.2×10 ⁷
R65	CH ₂ CHOH* + H* = CH ₂ CH ₂ OH* + *	0.73	1.07	0.76	1.13	4.6×10 ¹	2.0×10 ⁹	0.71	1.15	0.75	1.12	5.9×10 ¹	2.0×10 ⁹
R66	CH ₃ CHOH* + H* = CH ₃ CH ₂ OH* + *	0.29	0.72	0.19	0.80	9.7×10 ⁴	7.2×10 ⁶	0.43	0.82	0.38	0.81	6.5×10 ⁴	4.0×10 ⁸
R67	CCOO* + H* = CCHOO* + *	1.62	2.37	1.66	2.40	7.2×10 ⁻¹²	4.2×10 ⁵	2.03	/	2.09	/	/	/
R68	CHCOO* + H* = CHCHOO* + *	1.58	4.09	1.62	4.09	5.7×10 ⁻²⁹	1.2×10 ⁻¹²	1.89	/	1.96	/	/	/
R69	CH ₂ COO* + H* = CH ₂ CHOO* + *	1.59	3.10	1.68	3.15	1.9×10 ⁻¹⁹	1.4×10 ⁻²	1.66	/	1.67	/	/	/
R70	CH ₃ COO* + H* = CH ₃ CHOO* + *	1.77	1.83	1.99	2.04	3.0×10 ⁻⁸	3.2×10 ¹²	1.84	/	1.97	/	/	/
R71	CCOOH* + H* = CCHOOH* + *	0.96	1.37	1.00	1.41	6.8×10 ⁻²	7.3×10 ⁸	1.74	2.07	1.83	2.25	2.1×10 ⁻¹⁰	6.2×10 ⁸
R72	CHCOOH* + H* = CHCHOOH* + *	1.38	1.42	1.39	1.47	1.5×10 ⁻²	1.6×10 ¹²	1.63	1.87	1.65	1.98	1.1×10 ⁻⁷	5.1×10 ⁹
R73	CH ₂ COOH* + H* = CH ₂ CHOOH* + *	1.28	1.66	1.37	1.75	2.6×10 ⁻⁵	1.8×10 ⁹	1.31	/	1.39	/	/	/
R74	CH ₃ COOH* + H* = CH ₃ CHOOH* + *	1.06	1.13	1.17	1.25	2.3×10 ⁰	1.4×10 ¹²	1.28	1.47	1.48	1.56	1.9×10 ⁻³	1.7×10 ¹²
R75	CO* + H* = COH* + *	1.03	1.05	1.03	1.09	1.1×10 ²	2.7×10 ¹²	1.17	1.88	1.14	1.90	7.6×10 ⁻⁷	2.3×10 ⁵
R76	HCO* + H* = HCOH* + *	0.22	0.48	0.26	0.54	4.2×10 ⁷	1.8×10 ¹⁰	0.53	0.96	0.51	0.93	4.3×10 ³	6.4×10 ⁸
R77	H ₂ CO* + H* = CH ₂ OH* + *	0.22	0.65	0.19	0.68	1.3×10 ⁶	1.2×10 ⁸	0.16	0.69	0.07	0.69	1.3×10 ⁶	6.2×10 ⁶
R78	H ₃ CO* + H* = CH ₃ OH* + *	0.14	0.68	0.01	0.65	2.8×10 ⁶	3.8×10 ⁶	-0.01	0.71	-0.12	0.69	1.1×10 ⁶	6.9×10 ⁴
R79	CCO* + H* = CCOH* + *	0.38	1.47	0.39	1.48	1.1×10 ⁻²	9.3×10 ¹	1.04	1.63	1.00	1.57	1.5×10 ⁻³	1.8×10 ⁷
R80	CHCO* + H* = CHCOH* + *	0.28	0.77	0.26	0.77	1.8×10 ⁵	8.0×10 ⁷	0.57	1.14	0.59	1.18	1.2×10 ¹	1.0×10 ⁷
R81	CH ₂ CO* + H* = CH ₂ COH* + *	0.41	0.70	0.53	0.82	5.7×10 ⁴	1.3×10 ¹⁰	0.40	1.08	0.46	1.13	3.9×10 ¹	1.8×10 ⁶
R82	CH ₃ CO* + H* = CH ₃ COH* + *	0.21	0.52	0.36	0.67	1.6×10 ⁶	6.6×10 ⁹	0.58	1.08	0.58	1.00	9.3×10 ²	5.9×10 ⁸
R83	CCHO* + H* = CCHOH* + *	0.45	0.64	0.46	0.64	3.9×10 ⁶	1.8×10 ¹¹	0.38	0.58	0.46	0.66	2.4×10 ⁶	9.6×10 ¹⁰
R84	CHCHO* + H* = CHCHOH* + *	0.30	0.54	0.29	0.53	4.6×10 ⁷	4.2×10 ¹⁰	0.29	0.64	0.29	0.61	7.0×10 ⁶	5.5×10 ⁹
R85	CH ₂ CHO* + H* = CH ₂ CHOH* + *	0.19	0.75	0.13	0.69	1.2×10 ⁶	2.4×10 ⁷	0.20	0.70	0.22	0.80	8.5×10 ⁴	1.4×10 ⁷
R86	CH ₃ CHO* + H* = CH ₃ CHOH* + *	0.29	0.66	0.31	0.74	3.6×10 ⁵	4.6×10 ⁸	0.19	0.68	0.12	0.63	4.2×10 ⁶	6.4×10 ⁷
R87	CCH ₂ O* + H* = CCH ₂ OH* + *	0.25	1.04	0.17	1.04	3.2×10 ²	1.7×10 ⁴	-0.54	0.46	-0.71	0.50	8.7×10 ⁷	6.7×10 ⁰
R88	CHCH ₂ O* + H* = CHCH ₂ OH* + *	-0.29	0.47	-0.41	0.44	3.5×10 ⁸	2.5×10 ⁴	-0.22	0.51	-0.25	0.55	3.2×10 ⁷	1.0×10 ⁵
R89	CH ₂ CH ₂ O* + H* = CH ₂ CH ₂ OH* + *	0.00	0.95	-0.09	0.95	2.5×10 ³	3.5×10 ²	-0.18	0.61	-0.23	0.61	6.7×10 ⁶	3.5×10 ⁴
R90	CH ₃ CH ₂ O* + H* = CH ₃ CH ₂ OH* + *	0.11	0.66	-0.08	0.60	9.3×10 ⁶	1.5×10 ⁶	0.03	0.96	-0.07	0.81	7.9×10 ⁴	1.6×10 ⁴
R91	CCOO* + H* = CCOOH* + *	0.12	0.68	0.08	0.71	7.6×10 ⁵	4.9×10 ⁶	-0.31	0.57	-0.46	0.52	6.1×10 ⁷	1.3×10 ³
R92	CHCOO* + H* = CHCOOH* + *	-0.03	0.64	-0.08	0.65	2.8×10 ⁶	3.9×10 ⁵	-0.13	0.73	-0.20	0.73	4.3×10 ⁵	3.8×10 ³
R93	CH ₂ COO* + H* = CH ₂ COOH* + *	0.03	0.54	-0.06	0.55	3.2×10 ⁷	7.2×10 ⁶	-0.10	0.62	-0.18	0.65	3.2×10 ⁶	5.0×10 ⁴
R94	CH ₃ COO* + H* = CH ₃ COOH* + *	0.35	0.80	0.36	0.75	3.1×10 ⁵	1.3×10 ⁹	0.29	0.71	0.18	0.66	2.4×10 ⁶	1.4×10 ⁸

Table S2 (Continued)

Steps		Pd(211)						Pd(111)					
		ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹	ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹
R95	CCHOH* + H* = CCHOH* + *	-0.54	0.68	-0.59	0.69	1.2×10 ⁶	1.4×10 ⁰	-0.61	0.55	-0.71	0.53	5.1×10 ⁷	3.2×10 ⁰
R96	CHCHOH* + H* = CHCHOH* + *	-0.24	0.46	-0.31	0.44	4.2×10 ⁸	2.8×10 ⁵	-0.38	0.76	-0.51	0.72	5.2×10 ⁵	3.4×10 ⁰
R97	CH ₂ CHOH* + H* = CH ₂ CHOH* + *	-0.28	0.70	-0.37	0.69	1.2×10 ⁶	2.4×10 ²	-0.45	0.58	-0.46	0.60	8.9×10 ⁶	1.8×10 ²
R98	CH ₃ CHOH* + H* = CH ₃ CHOH* + *	-0.36	0.45	-0.46	0.44	3.8×10 ⁸	9.4×10 ³	-0.27	0.50	-0.32	0.50	8.6×10 ⁷	5.7×10 ⁴
R99	CCOH* + H* = CCOH* + *	0.62	0.79	0.58	0.78	1.5×10 ⁵	9.4×10 ¹⁰	0.42	0.87	0.51	1.01	7.1×10 ²	1.1×10 ⁸
R100	CHCOH* + H* = CHCOH* + *	0.54	0.64	0.54	0.61	7.7×10 ⁶	2.1×10 ¹²	0.52	0.75	0.59	0.81	7.4×10 ⁴	6.0×10 ¹⁰
R101	CH ₂ COH* + H* = CH ₂ COH* + *	0.52	0.96	0.54	0.97	1.6×10 ³	4.2×10 ⁸	0.57	0.65	0.57	0.65	2.7×10 ⁶	1.4×10 ¹²
R102	CH ₃ COH* + H* = CH ₃ COH* + *	0.73	0.82	0.78	0.78	1.3×10 ⁵	9.6×10 ¹²	0.84	1.01	0.97	1.08	1.3×10 ²	7.4×10 ¹¹
R103	CO ₂ * + * = CO* + O*	-0.08	1.14	0.01	1.24	3.0×10 ⁰	4.2×10 ⁰	-0.49	1.09	-0.40	1.17	1.5×10 ¹	1.5×10 ⁻³
R104	CO* + * = C* + O*	1.42	3.09	1.48	3.02	3.5×10 ⁻¹⁸	3.1×10 ⁻³	2.02	3.64	2.10	3.72	3.6×10 ⁻²⁵	4.9×10 ⁻⁴
R105	H ₂ CO* + * = H ₂ CO* + O*	-0.30	0.37	-0.38	0.34	3.9×10 ⁹	5.2×10 ⁵	-0.29	0.29	-0.26	0.31	8.5×10 ⁹	2.1×10 ⁷
R106	COH* + * = C* + OH*	0.02	1.42	0.02	1.46	2.0×10 ⁻²	3.3×10 ⁻²	1.08	2.19	1.13	2.25	2.2×10 ⁻¹⁰	5.0×10 ¹
R107	HCOH* + * = CH* + OH*	0.08	1.40	0.09	1.45	2.4×10 ⁻²	1.7×10 ⁻¹	0.15	1.15	0.17	1.17	1.6×10 ¹	7.3×10 ²
R108	CH ₂ OH* + * = CH ₂ * + OH*	-0.14	1.00	-0.09	1.07	1.8×10 ²	2.2×10 ¹	0.33	1.23	0.37	1.31	6.6×10 ⁻¹	3.7×10 ³
R109	CH ₃ OH* + * = CH ₃ * + OH*	-0.28	1.44	-0.28	1.54	3.2×10 ⁻³	5.0×10 ⁻⁶	0.16	1.60	0.16	1.70	7.4×10 ⁻⁵	3.1×10 ⁻³
R110	COH* + H* = C* + H ₂ O*	0.19	1.38	0.02	1.40	7.4×10 ⁻²	1.3×10 ⁻¹	0.93	2.19	0.75	2.24	2.9×10 ⁻¹⁰	9.9×10 ⁻³
R111	HCOH* + H* = CH* + H ₂ O*	0.24	1.31	0.09	1.33	4.2×10 ⁻¹	3.1×10 ⁰	0.00	1.44	-0.21	1.46	2.1×10 ⁻²	1.5×10 ⁻⁴
R112	CH ₂ OH* + H* = CH ₂ * + H ₂ O*	0.02	0.91	-0.09	0.97	1.8×10 ³	2.2×10 ²	0.18	0.93	-0.01	1.00	9.1×10 ²	7.7×10 ²
R113	CH ₃ OH* + H* = CH ₃ * + H ₂ O*	-0.12	1.64	-0.28	1.72	4.7×10 ⁻⁵	7.5×10 ⁻⁸	0.01	1.81	-0.22	1.66	1.8×10 ⁻⁴	1.2×10 ⁻⁶
R114	COOH* + * = CO* + OH*	-0.77	0.60	-0.74	0.57	1.8×10 ⁷	6.7×10 ⁻¹	-0.50	0.75	-0.52	0.71	7.0×10 ⁵	4.3×10 ⁰
R115	HCOOH* + * = HCO* + OH*	0.10	0.88	0.13	0.89	1.1×10 ⁴	2.3×10 ⁵	0.50	0.94	0.61	1.03	4.0×10 ²	5.5×10 ⁸
R116	H ₂ COOH* + * = H ₂ CO* + OH*	-0.24	0.50	-0.30	0.41	8.6×10 ⁸	7.5×10 ⁵	0.17	0.50	0.18	0.50	1.1×10 ⁸	6.3×10 ⁹
R117	COOH* + H* = CO* + H ₂ O*	-0.61	0.79	-0.74	0.80	8.1×10 ⁴	3.0×10 ⁻³	-0.64	1.17	-0.89	1.10	7.6×10 ¹	7.2×10 ⁻⁸
R118	HCOOH* + H* = HCO* + H ₂ O*	0.26	1.10	0.13	1.20	9.2×10 ⁰	1.9×10 ²	0.36	1.39	0.23	1.51	6.0×10 ⁻³	1.3×10 ⁰
R119	H ₂ COOH* + H* = H ₂ CO* + H ₂ O*	-0.08	0.53	-0.30	0.53	4.3×10 ⁷	3.8×10 ⁴	0.02	0.80	-0.20	0.77	1.8×10 ⁵	1.7×10 ³
R120	HOCOH* + * = COH* + OH*	0.07	1.51	0.12	1.55	2.4×10 ⁻³	3.7×10 ⁻²	0.21	1.23	0.17	1.24	3.3×10 ⁰	1.9×10 ²
R121	HOCOH* + * = CO* + H ₂ O*	-0.79	1.40	-0.91	1.43	3.7×10 ⁻²	2.3×10 ⁻¹¹	-1.10	1.38	-1.34	1.36	1.9×10 ⁻¹	5.5×10 ⁻¹⁵
R122	HOCHOH* + * = HCOH* + OH*	-0.50	0.67	-0.43	0.78	1.6×10 ⁵	7.2×10 ⁰	0.25	0.87	0.33	0.98	1.3×10 ³	3.0×10 ⁶
R123	HOCHOH* + * = HCO* + H ₂ O*	-0.56	1.35	-0.69	1.41	6.6×10 ⁻²	7.0×10 ⁻⁹	-0.43	1.14	-0.56	1.24	3.2×10 ⁰	7.8×10 ⁻⁶
R124	HOCOH* + H* = COH* + H ₂ O*	0.24	1.39	0.12	1.44	3.2×10 ⁻²	4.9×10 ⁻¹	0.07	1.44	-0.20	1.47	1.7×10 ⁻²	1.5×10 ⁻⁴
R125	HOCHOH* + H* = HCOH* + H ₂ O*	-0.34	1.02	-0.43	1.07	1.6×10 ²	7.3×10 ⁻³	0.11	0.98	-0.04	1.06	2.4×10 ²	8.5×10 ¹
R126	CCOH* + * = CCO* + OH*	-0.05	1.02	-0.06	1.04	3.4×10 ²	8.7×10 ¹	0.65	1.04	0.73	1.15	2.7×10 ¹	6.9×10 ⁸

Table S2 (Continued)

Steps		Pd(211)						Pd(111)					
		ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹	ΔE / eV	E_a / eV	ΔG / eV	G_a / eV	k_{fwd} / s ⁻¹	k_{bkd} / s ⁻¹
R127	CHCOOH* + * = CHCO* + OH*	-0.12	0.87	-0.09	0.88	1.3×10 ⁴	1.5×10 ³	0.32	0.86	0.36	0.96	2.4×10 ³	9.6×10 ⁶
R128	CH ₂ COOH* + * = CH ₂ CO* + OH*	0.16	0.90	0.12	0.94	3.1×10 ³	4.8×10 ⁴	0.48	0.83	0.47	0.88	1.3×10 ⁴	6.6×10 ⁸
R129	CH ₃ COOH* + * = CH ₃ CO* + OH*	0.14	0.82	0.08	0.91	6.6×10 ³	4.0×10 ⁴	0.51	0.96	0.68	1.15	2.6×10 ¹	2.0×10 ⁸
R130	CCOOH* + H* = CCO* + H ₂ O*	0.11	1.52	-0.06	1.51	6.2×10 ⁻³	1.6×10 ⁻³	0.51	1.14	0.36	1.27	1.8×10 ⁰	7.0×10 ³
R131	CHCOOH* + H* = CHCO* + H ₂ O*	0.04	0.91	-0.09	0.87	1.8×10 ⁴	2.2×10 ³	0.17	1.23	-0.02	1.27	1.7×10 ⁰	1.0×10 ⁰
R132	CH ₂ COOH* + H* = CH ₂ CO* + H ₂ O*	0.33	1.00	0.12	1.00	7.8×10 ²	1.2×10 ⁴	0.34	1.24	0.09	1.24	3.1×10 ⁰	2.5×10 ¹
R133	CH ₃ COOH* + H* = CH ₃ CO* + H ₂ O*	0.30	1.19	0.08	1.33	4.0×10 ⁻¹	2.5×10 ⁰	0.36	1.38	0.30	1.57	1.4×10 ⁻³	1.6×10 ⁰
R134	CCHOH* + * = CCHO* + OH*	-0.41	0.49	-0.47	0.49	1.2×10 ⁸	2.3×10 ³	-0.50	0.35	-0.59	0.40	9.5×10 ⁸	1.2×10 ³
R135	CHCHOH* + * = CHCHO* + OH*	-0.79	0.21	-0.84	0.23	4.8×10 ¹⁰	1.8×10 ²	-0.46	0.24	-0.45	0.33	4.9×10 ⁹	1.4×10 ⁵
R136	CH ₂ CHOH* + * = CH ₂ CHO* + OH*	-0.70	0.18	-0.80	0.15	3.0×10 ¹¹	2.3×10 ³	-0.19	/	-0.35	/	/	/
R137	CH ₃ CHOH* + * = CH ₃ CHO* + OH*	-0.27	0.30	-0.40	0.22	6.9×10 ¹⁰	6.3×10 ⁶	0.18	0.38	0.14	0.25	3.5×10 ¹⁰	8.2×10 ¹¹
R138	CCOHOH* + H* = CCOH* + H ₂ O*	-0.12	1.37	-0.24	1.45	2.6×10 ⁻²	9.1×10 ⁻⁵	1.14	2.22	0.84	2.25	2.0×10 ⁻¹⁰	6.0×10 ⁻²
R139	CHCOHOH* + H* = CHCOH* + H ₂ O*	-0.22	1.07	-0.37	1.11	7.2×10 ¹	1.4×10 ⁻²	0.23	1.32	-0.02	1.35	2.8×10 ⁻¹	1.7×10 ⁻¹
R140	CH ₂ COHOH* + H* = CH ₂ COH* + H ₂ O*	0.22	1.09	0.11	1.08	1.3×10 ²	1.9×10 ³	0.17	1.12	-0.01	1.17	1.7×10 ¹	1.2×10 ¹
R141	CH ₃ COHOH* + H* = CH ₃ COH* + H ₂ O*	-0.21	0.88	-0.34	0.96	2.3×10 ³	7.9×10 ⁻¹	0.10	1.02	-0.09	0.98	1.3×10 ³	1.6×10 ²
R142	C* + CO* = CCO* + *	1.09	1.59	1.09	1.61	5.9×10 ⁻⁴	6.3×10 ⁷	0.99	1.74	0.94	1.72	4.5×10 ⁻⁵	1.2×10 ⁵
R143	CH* + CO* = CHCO* + *	0.98	1.42	1.02	1.44	3.3×10 ⁻²	5.6×10 ⁸	1.22	1.61	1.18	1.60	7.4×10 ⁻⁴	5.9×10 ⁸
R144	CH ₂ * + CO* = CH ₂ CO* + *	0.80	1.41	0.72	1.33	4.6×10 ⁻¹	8.6×10 ⁶	0.83	1.56	0.81	1.58	1.3×10 ⁻³	1.7×10 ⁵
R145	CH ₃ * + CO* = CH ₃ CO* + *	0.69	1.29	0.64	1.32	4.7×10 ⁻¹	1.4×10 ⁶	0.69	1.69	0.79	1.79	1.0×10 ⁻⁵	1.0×10 ³
R146	C* + CO ₂ * = CCOO* + *	0.57	1.19	0.66	1.19	1.1×10 ¹	4.6×10 ⁷	0.39	0.67	0.44	0.65	3.2×10 ⁶	7.8×10 ¹⁰
R147	CH* + CO ₂ * = CHCOO* + *	0.68	1.21	0.78	1.26	1.9×10 ⁰	1.3×10 ⁸	0.76	1.18	0.80	1.21	6.2×10 ⁰	7.2×10 ⁸
R148	CH ₂ * + CO ₂ * = CH ₂ COO* + *	0.16	1.16	0.25	1.22	5.1×10 ⁰	1.8×10 ³	0.18	0.89	0.29	0.96	2.1×10 ³	1.8×10 ⁶
R149	CH ₃ * + CO ₂ * = CH ₃ COO* + *	-0.25	1.25	-0.21	1.39	1.0×10 ⁻¹	7.5×10 ⁻⁴	-0.36	1.29	-0.29	1.42	4.8×10 ⁻²	5.5×10 ⁻⁵
R150	C* + HCO* = CCHO* + *	0.42	1.38	0.47	1.39	1.1×10 ⁻¹	5.7×10 ³	0.05	1.14	-0.08	1.11	6.8×10 ¹	9.6×10 ⁰
R151	CH* + HCO* = CHCHO* + *	0.42	1.11	0.45	1.20	8.4×10 ⁰	3.0×10 ⁵	0.53	1.24	0.49	1.24	3.4×10 ⁰	3.2×10 ⁵
R152	CH ₂ * + HCO* = CH ₂ CHO* + *	-0.05	1.03	-0.04	1.13	4.2×10 ¹	1.8×10 ¹	-0.07	0.98	-0.15	0.99	1.2×10 ³	3.4×10 ¹
R153	CH ₃ * + HCO* = CH ₃ CHO* + *	0.06	1.01	0.12	1.17	1.6×10 ¹	2.8×10 ²	0.12	1.20	0.20	1.30	8.8×10 ⁻¹	8.7×10 ¹
R154	O* + H* = OH* + *	-0.37	0.56	-0.43	0.54	3.8×10 ⁷	1.8×10 ³	0.23	1.04	0.17	1.02	5.4×10 ²	2.7×10 ⁴
R155	OH* + H* = H ₂ O* + *	0.16	0.72	0.00	0.71	7.5×10 ⁵	7.6×10 ⁵	-0.14	0.70	-0.38	0.69	1.2×10 ⁶	1.8×10 ²
R156	OH* + OH* = H ₂ O* + O*	0.54	0.75	0.43	0.84	3.3×10 ⁴	6.9×10 ⁸	-0.37	0.01	-0.55	0.05	3.2×10 ¹²	9.8×10 ⁶

Table S3. Forward rates (r_{fwd}), backward rates (r_{bkd}), and the net rates (r) of the involved elementary steps in the hydrogenation of CO₂ to C₁ & C₂ oxygenates and methane on Pd(211) and Pd(111) surfaces obtained from microkinetic simulations. Simulation conditions: 500 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

Steps		Pd(211)			Pd(111)		
		r / s^{-1}	r_{fwd} / s^{-1}	r_{bkd} / s^{-1}	r / s^{-1}	r_{fwd} / s^{-1}	r_{bkd} / s^{-1}
R1	CO ₂ * + H* = COOH* + *	1.2×10 ⁻⁴	1.5×10 ⁻⁴	3.3×10 ⁻⁵	9.7×10 ⁻⁹	2.3×10 ⁻⁷	2.2×10 ⁻⁷
R2	HCOO* + H* = HCOOH* + *	1.1×10 ⁻⁶	1.1×10 ⁻⁶	1.8×10 ⁻⁸	1.1×10 ⁻⁹	1.1×10 ⁻⁹	1.4×10 ⁻¹⁴
R3	H ₂ COO* + H* = H ₂ COOH* + *	3.3×10 ⁻¹⁹	3.3×10 ⁻¹⁹	8.1×10 ⁻²¹	2.1×10 ⁻²⁴	2.1×10 ⁻²⁴	1.5×10 ⁻²⁸
R4	COOH* + H* = HOCOH* + *	1.3×10 ⁻⁹	5.3×10 ⁻³	5.3×10 ⁻³	6.0×10 ⁻¹⁰	7.7×10 ⁻⁶	7.7×10 ⁻⁶
R5	HCOOH* + H* = HOCHOH* + *	-5.7×10 ⁻¹⁰	4.9×10 ⁻¹⁴	5.7×10 ⁻¹⁰	-6.0×10 ⁻¹⁰	1.5×10 ⁻¹⁷	6.0×10 ⁻¹⁰
R6	CO ₂ * + H* = HCOO* + *	1.1×10 ⁻⁶	1.1×10 ⁻⁶	1.4×10 ⁻⁹	1.1×10 ⁻⁹	1.1×10 ⁻⁹	2.1×10 ⁻¹²
R7	HCOO* + H* = H ₂ COO* + *	3.3×10 ⁻¹⁹	7.4×10 ⁻¹⁹	4.1×10 ⁻¹⁹	2.1×10 ⁻²⁴	2.6×10 ⁻²⁴	4.5×10 ⁻²⁵
R8	COOH* + H* = HCOOH* + *	8.4×10 ⁻⁵	8.4×10 ⁻⁵	7.1×10 ⁻⁹	8.7×10 ⁻⁹	8.7×10 ⁻⁹	2.2×10 ⁻¹⁶
R9	HCOOH* + H* = H ₂ COOH* + *	6.3×10 ⁻¹⁴	4.7×10 ⁻¹³	4.1×10 ⁻¹³	1.1×10 ⁻²³	9.3×10 ⁻²¹	9.3×10 ⁻²¹
R10	HOCOH* + H* = HOCHOH* + *	5.8×10 ⁻¹⁰	5.5×10 ⁻⁷	5.5×10 ⁻⁷	6.0×10 ⁻¹⁰	1.9×10 ⁻⁸	1.8×10 ⁻⁸
R11	C* + H* = CH* + *	1.5×10 ⁻⁹	6.7×10 ⁻⁹	5.2×10 ⁻⁹	3.6×10 ⁻²²	6.7×10 ⁻²²	3.1×10 ⁻²²
R12	CH* + H* = CH ₂ * + *	2.5×10 ⁻⁹	3.2×10 ⁻⁹	7.4×10 ⁻¹⁰	4.3×10 ⁻¹⁹	2.0×10 ⁻¹⁵	2.0×10 ⁻¹⁵
R13	CH ₂ * + H* = CH ₃ * + *	2.4×10 ⁻⁸	2.4×10 ⁻⁸	5.4×10 ⁻¹³	9.2×10 ⁻¹⁷	9.2×10 ⁻¹⁷	3.0×10 ⁻²²
R14	CH ₃ * + H* = CH ₄ * + *	2.4×10 ⁻⁸	2.4×10 ⁻⁸	6.9×10 ⁻¹⁸	9.2×10 ⁻¹⁷	9.2×10 ⁻¹⁷	2.6×10 ⁻²⁸
R15	CO* + H* = HCO* + *	2.9×10 ⁻⁶	4.2×10 ⁻¹	4.2×10 ⁻¹	-4.0×10 ⁻¹⁵	5.3×10 ⁻⁹	5.3×10 ⁻⁹
R16	HCO* + H* = H ₂ CO* + *	8.1×10 ⁻⁷	1.0×10 ⁻⁶	2.2×10 ⁻⁷	2.0×10 ⁻¹⁴	2.0×10 ⁻¹⁴	2.8×10 ⁻¹⁷
R17	H ₂ CO* + H* = H ₃ CO* + *	8.0×10 ⁻¹⁰	8.1×10 ⁻¹⁰	3.7×10 ⁻¹²	8.4×10 ⁻²⁰	9.8×10 ⁻²⁰	1.3×10 ⁻²⁰
R18	COH* + H* = HCOH* + *	2.0×10 ⁻¹⁰	2.1×10 ⁻⁷	2.1×10 ⁻⁷	-2.4×10 ⁻¹³	1.1×10 ⁻¹¹	1.1×10 ⁻¹¹
R19	HCOH* + H* = CH ₂ OH* + *	2.1×10 ⁻⁶	6.0×10 ⁻⁵	5.8×10 ⁻⁵	1.0×10 ⁻¹⁴	1.0×10 ⁻¹⁴	1.4×10 ⁻¹⁶
R20	CH ₂ OH* + H* = CH ₃ OH* + *	1.8×10 ⁻⁶	1.8×10 ⁻⁶	6.8×10 ⁻¹⁴	1.0×10 ⁻¹⁴	1.0×10 ⁻¹⁴	3.0×10 ⁻²³
R21	CCO* + H* = CHCO* + *	1.8×10 ⁻¹⁶	8.4×10 ⁻¹⁶	6.6×10 ⁻¹⁶	2.6×10 ⁻³²	1.1×10 ⁻²⁹	1.1×10 ⁻²⁹
R22	CHCO* + H* = CH ₂ CO* + *	2.2×10 ⁻¹⁶	2.2×10 ⁻¹⁶	7.8×10 ⁻¹⁹	3.2×10 ⁻²⁸	3.4×10 ⁻²⁸	1.9×10 ⁻²⁹
R23	CH ₂ CO* + H* = CH ₃ CO* + *	6.2×10 ⁻¹⁶	6.3×10 ⁻¹⁶	3.1×10 ⁻¹⁸	2.6×10 ⁻²⁸	2.6×10 ⁻²⁸	6.8×10 ⁻³⁰
R24	CCOH* + H* = CHCOH* + *	5.4×10 ⁻¹⁹	4.1×10 ⁻¹⁷	4.0×10 ⁻¹⁷	3.9×10 ⁻³⁷	8.1×10 ⁻³⁷	4.2×10 ⁻³⁷
R25	CHCOH* + H* = CH ₂ COH* + *	1.7×10 ⁻¹⁶	1.9×10 ⁻¹⁶	2.4×10 ⁻¹⁷	3.0×10 ⁻³⁰	3.1×10 ⁻³⁰	1.1×10 ⁻³¹
R26	CH ₂ COH* + H* = CH ₃ COH* + *	1.0×10 ⁻¹⁶	1.0×10 ⁻¹⁶	2.2×10 ⁻¹⁹	5.6×10 ⁻³⁰	3.7×10 ⁻²⁹	3.1×10 ⁻²⁹
R27	CCHO* + H* = CHCHO* + *	8.2×10 ⁻²⁰	9.3×10 ⁻²⁰	1.1×10 ⁻²⁰	-1.4×10 ⁻³²	3.7×10 ⁻³²	5.0×10 ⁻³²
R28	CHCHO* + H* = CH ₂ CHO* + *	6.1×10 ⁻¹⁹	6.1×10 ⁻¹⁹	1.6×10 ⁻²¹	1.5×10 ⁻³¹	1.5×10 ⁻³¹	4.9×10 ⁻³³
R29	CH ₂ CHO* + H* = CH ₃ CHO* + *	2.9×10 ⁻¹⁷	2.9×10 ⁻¹⁷	7.2×10 ⁻²⁰	3.2×10 ⁻²⁹	3.2×10 ⁻²⁹	1.1×10 ⁻³⁴
R30	CCH ₂ O* + H* = CHCH ₂ O* + *	1.3×10 ⁻²²	2.3×10 ⁻²²	9.7×10 ⁻²³	-9.2×10 ⁻⁴²	1.8×10 ⁻⁴⁰	1.9×10 ⁻⁴⁰

Table S3 (Continued)

Steps		Pd(211)			Pd(111)		
		r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$	r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$
R31	$\text{CHCH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + *$	4.7×10^{-25}	4.7×10^{-25}	1.9×10^{-28}	6.1×10^{-39}	7.4×10^{-39}	1.3×10^{-39}
R32	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + *$	5.8×10^{-23}	5.8×10^{-23}	6.0×10^{-27}	2.5×10^{-35}	2.5×10^{-35}	4.0×10^{-40}
R33	$\text{CCHOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOH}^* + *$	4.1×10^{-20}	4.6×10^{-20}	4.6×10^{-21}	8.8×10^{-33}	2.3×10^{-31}	2.2×10^{-31}
R34	$\text{CHCHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOH}^* + *$	1.2×10^{-18}	1.2×10^{-18}	2.4×10^{-22}	1.1×10^{-30}	1.1×10^{-30}	2.5×10^{-33}
R35	$\text{CH}_2\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$	1.2×10^{-17}	4.9×10^{-17}	3.7×10^{-17}	4.5×10^{-29}	4.8×10^{-29}	2.3×10^{-30}
R36	$\text{CCH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CHCH}_2\text{OH}^* + *$	2.3×10^{-21}	4.7×10^{-20}	4.5×10^{-20}	6.9×10^{-33}	1.6×10^{-30}	1.6×10^{-30}
R37	$\text{CHCH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + *$	3.2×10^{-22}	3.2×10^{-22}	1.3×10^{-29}	2.0×10^{-32}	2.0×10^{-32}	9.4×10^{-36}
R38	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$	4.8×10^{-21}	4.8×10^{-21}	4.1×10^{-24}	2.0×10^{-31}	2.0×10^{-31}	2.6×10^{-38}
R39	$\text{CCOO}^* + \text{H}^* = \text{CHCOO}^* + *$	1.5×10^{-22}	3.4×10^{-22}	1.9×10^{-22}	4.8×10^{-34}	1.1×10^{-33}	5.8×10^{-34}
R40	$\text{CHCOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COO}^* + *$	1.2×10^{-22}	1.2×10^{-22}	1.3×10^{-28}	6.9×10^{-33}	6.9×10^{-33}	1.0×10^{-36}
R41	$\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COO}^* + *$	1.6×10^{-23}	1.6×10^{-23}	1.8×10^{-30}	9.6×10^{-32}	9.6×10^{-32}	1.3×10^{-40}
R42	$\text{CCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCOOH}^* + *$	3.6×10^{-20}	3.7×10^{-20}	8.8×10^{-22}	1.8×10^{-30}	4.8×10^{-30}	3.0×10^{-30}
R43	$\text{CHCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COOH}^* + *$	3.6×10^{-20}	3.6×10^{-20}	6.2×10^{-26}	1.9×10^{-30}	1.9×10^{-30}	1.0×10^{-34}
R44	$\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COOH}^* + *$	3.6×10^{-20}	3.6×10^{-20}	1.0×10^{-25}	2.0×10^{-30}	2.0×10^{-30}	4.1×10^{-41}
R45	$\text{CCHOO}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOO}^* + *$	2.2×10^{-36}	2.6×10^{-36}	4.0×10^{-37}	1.5×10^{-55}	3.2×10^{-55}	1.7×10^{-55}
R46	$\text{CHCHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOO}^* + *$	6.1×10^{-36}	6.1×10^{-36}	6.8×10^{-40}	3.1×10^{-51}	3.1×10^{-51}	3.2×10^{-57}
R47	$\text{CH}_2\text{CHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOO}^* + *$	4.8×10^{-36}	4.8×10^{-36}	1.6×10^{-43}	1.2×10^{-50}	1.2×10^{-50}	2.7×10^{-57}
R48	$\text{CCHOOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOOH}^* + *$	1.7×10^{-27}	2.0×10^{-27}	3.2×10^{-28}	1.2×10^{-43}	4.3×10^{-43}	3.1×10^{-43}
R49	$\text{CHCHOOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOOH}^* + *$	3.1×10^{-28}	3.1×10^{-28}	5.0×10^{-33}	5.4×10^{-42}	5.4×10^{-42}	4.7×10^{-48}
R50	$\text{CH}_2\text{CHOOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + *$	2.8×10^{-29}	2.8×10^{-29}	2.8×10^{-36}	5.4×10^{-42}	5.4×10^{-42}	9.8×10^{-49}
R51	$\text{CCO}^* + \text{H}^* = \text{CCHO}^* + *$	6.7×10^{-19}	4.4×10^{-18}	3.7×10^{-18}	2.3×10^{-33}	3.2×10^{-33}	9.1×10^{-34}
R52	$\text{CHCO}^* + \text{H}^* = \text{CHCHO}^* + *$	1.7×10^{-18}	2.0×10^{-18}	2.6×10^{-19}	3.5×10^{-30}	5.8×10^{-30}	2.3×10^{-30}
R53	$\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHO}^* + *$	3.9×10^{-17}	4.3×10^{-17}	4.1×10^{-18}	7.6×10^{-29}	9.9×10^{-29}	2.3×10^{-29}
R54	$\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + *$	6.9×10^{-16}	7.2×10^{-16}	3.5×10^{-17}	2.2×10^{-28}	2.2×10^{-28}	6.7×10^{-33}
R55	$\text{CCHO}^* + \text{H}^* = \text{CCH}_2\text{O}^* + *$	2.6×10^{-22}	8.5×10^{-21}	8.3×10^{-21}	1.1×10^{-38}	1.5×10^{-38}	3.5×10^{-39}
R56	$\text{CHCHO}^* + \text{H}^* = \text{CHCH}_2\text{O}^* + *$	-1.2×10^{-22}	5.2×10^{-23}	1.7×10^{-22}	5.4×10^{-37}	6.5×10^{-37}	1.2×10^{-37}
R57	$\text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + *$	5.7×10^{-23}	1.2×10^{-22}	6.5×10^{-23}	9.4×10^{-35}	4.0×10^{-33}	3.9×10^{-33}
R58	$\text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + *$	2.8×10^{-21}	2.9×10^{-21}	6.5×10^{-23}	-3.9×10^{-36}	1.0×10^{-36}	4.9×10^{-36}
R59	$\text{CCOH}^* + \text{H}^* = \text{CCHOH}^* + *$	-5.4×10^{-19}	3.4×10^{-20}	5.8×10^{-19}	-1.9×10^{-38}	8.2×10^{-39}	2.7×10^{-38}
R60	$\text{CHCOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOH}^* + *$	-1.5×10^{-20}	2.1×10^{-20}	3.6×10^{-20}	-2.3×10^{-30}	4.4×10^{-31}	2.7×10^{-30}
R61	$\text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOH}^* + *$	6.9×10^{-20}	6.9×10^{-20}	1.9×10^{-22}	7.5×10^{-32}	1.2×10^{-31}	4.5×10^{-32}
R62	$\text{CH}_3\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$	1.7×10^{-17}	2.0×10^{-16}	1.8×10^{-16}	3.8×10^{-29}	3.9×10^{-29}	8.1×10^{-31}
R63	$\text{CCHOH}^* + \text{H}^* = \text{CCH}_2\text{OH}^* + *$	2.1×10^{-21}	3.3×10^{-21}	1.2×10^{-21}	6.9×10^{-33}	9.1×10^{-33}	2.1×10^{-33}
R64	$\text{CHCHOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCH}_2\text{OH}^* + *$	-1.9×10^{-21}	7.9×10^{-22}	2.7×10^{-21}	1.3×10^{-32}	1.7×10^{-32}	4.2×10^{-33}

Table S3 (Continued)

Steps		Pd(211)			Pd(111)		
		r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$	r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$
R65	$\text{CH}_2\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + *$	4.5×10^{-21}	4.5×10^{-21}	3.2×10^{-24}	1.8×10^{-31}	1.9×10^{-31}	9.6×10^{-33}
R66	$\text{CH}_3\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$	1.2×10^{-17}	1.2×10^{-17}	9.6×10^{-24}	7.9×10^{-29}	7.9×10^{-29}	1.1×10^{-35}
R67	$\text{CCOO}^* + \text{H}^* = \text{CCHOO}^* + *$	3.7×10^{-37}	4.9×10^{-37}	1.2×10^{-37}	/	/	/
R68	$\text{CHCOO}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOO}^* + *$	3.4×10^{-57}	3.7×10^{-57}	2.6×10^{-58}	/	/	/
R69	$\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOO}^* + *$	-4.7×10^{-48}	7.6×10^{-49}	5.4×10^{-48}	/	/	/
R70	$\text{CH}_3\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOO}^* + *$	-3.4×10^{-36}	3.1×10^{-36}	6.5×10^{-36}	/	/	/
R71	$\text{CCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CCHOOH}^* + *$	9.9×10^{-26}	6.8×10^{-25}	5.8×10^{-25}	1.9×10^{-42}	3.0×10^{-42}	1.2×10^{-42}
R72	$\text{CHCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOOH}^* + *$	-1.3×10^{-27}	2.8×10^{-28}	1.6×10^{-27}	2.2×10^{-41}	3.9×10^{-41}	1.7×10^{-41}
R73	$\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOOH}^* + *$	-1.6×10^{-30}	3.0×10^{-32}	1.7×10^{-30}	/	/	/
R74	$\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + *$	-8.5×10^{-29}	8.9×10^{-29}	1.7×10^{-28}	-5.4×10^{-42}	8.8×10^{-44}	5.5×10^{-42}
R75	$\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{COH}^* + *$	1.0×10^{-9}	1.6×10^1	1.6×10^1	-2.7×10^{-13}	1.4×10^{-11}	1.4×10^{-11}
R76	$\text{HCO}^* + \text{H}^* = \text{HCOH}^* + *$	2.1×10^{-6}	1.3×10^{-2}	1.3×10^{-2}	-2.4×10^{-14}	5.8×10^{-13}	6.1×10^{-13}
R77	$\text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{OH}^* + *$	-3.3×10^{-7}	9.2×10^{-8}	4.2×10^{-7}	-2.7×10^{-17}	3.0×10^{-18}	3.0×10^{-17}
R78	$\text{H}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{OH}^* + *$	8.0×10^{-10}	8.0×10^{-10}	3.1×10^{-14}	8.4×10^{-20}	8.4×10^{-20}	1.9×10^{-26}
R79	$\text{CCO}^* + \text{H}^* = \text{CCOH}^* + *$	7.8×10^{-23}	8.2×10^{-23}	4.1×10^{-24}	3.7×10^{-37}	4.1×10^{-37}	3.6×10^{-38}
R80	$\text{CHCO}^* + \text{H}^* = \text{CHCOH}^* + *$	1.7×10^{-16}	1.8×10^{-16}	1.1×10^{-17}	7.7×10^{-31}	8.0×10^{-31}	3.6×10^{-32}
R81	$\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + *$	-6.9×10^{-17}	5.7×10^{-17}	1.3×10^{-16}	2.6×10^{-30}	2.7×10^{-30}	8.2×10^{-32}
R82	$\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + *$	-8.4×10^{-17}	2.3×10^{-13}	2.3×10^{-13}	3.2×10^{-29}	5.4×10^{-27}	5.4×10^{-27}
R83	$\text{CCHO}^* + \text{H}^* = \text{CCHOH}^* + *$	5.9×10^{-19}	1.0×10^{-16}	1.0×10^{-16}	1.6×10^{-32}	2.6×10^{-29}	2.6×10^{-29}
R84	$\text{CHCHO}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOH}^* + *$	1.2×10^{-18}	6.2×10^{-18}	5.0×10^{-18}	3.4×10^{-30}	1.1×10^{-29}	8.0×10^{-30}
R85	$\text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOH}^* + *$	1.0×10^{-17}	1.1×10^{-17}	6.9×10^{-19}	4.4×10^{-29}	4.7×10^{-29}	2.3×10^{-30}
R86	$\text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$	-1.6×10^{-17}	9.0×10^{-19}	1.7×10^{-17}	-3.8×10^{-30}	5.5×10^{-33}	3.8×10^{-30}
R87	$\text{CCH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CCH}_2\text{OH}^* + *$	1.3×10^{-22}	2.1×10^{-22}	7.8×10^{-23}	1.1×10^{-38}	1.7×10^{-36}	1.7×10^{-36}
R88	$\text{CHCH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CHCH}_2\text{OH}^* + *$	9.4×10^{-24}	5.8×10^{-23}	4.8×10^{-23}	5.3×10^{-37}	9.0×10^{-36}	8.5×10^{-36}
R89	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + *$	6.8×10^{-27}	6.8×10^{-27}	5.6×10^{-31}	6.9×10^{-35}	6.9×10^{-35}	1.7×10^{-37}
R90	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$	2.9×10^{-21}	2.9×10^{-21}	2.0×10^{-24}	2.2×10^{-35}	2.2×10^{-35}	4.4×10^{-40}
R91	$\text{CCOO}^* + \text{H}^* = \text{CCOOH}^* + *$	3.6×10^{-20}	5.1×10^{-20}	1.5×10^{-20}	1.8×10^{-30}	1.8×10^{-30}	9.3×10^{-34}
R92	$\text{CHCOO}^* + \text{H}^* = \text{CHCOOH}^* + *$	1.8×10^{-22}	1.8×10^{-22}	2.2×10^{-24}	1.1×10^{-31}	1.1×10^{-31}	6.4×10^{-35}
R93	$\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COOH}^* + *$	1.3×10^{-22}	1.3×10^{-22}	2.5×10^{-24}	5.5×10^{-32}	5.5×10^{-32}	1.1×10^{-35}
R94	$\text{CH}_3\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COOH}^* + *$	1.6×10^{-23}	3.1×10^{-23}	1.5×10^{-23}	9.6×10^{-32}	9.6×10^{-32}	3.1×10^{-37}
R95	$\text{CCHOO}^* + \text{H}^* = \text{CCHOOH}^* + *$	-1.8×10^{-36}	1.1×10^{-33}	1.1×10^{-33}	-1.5×10^{-55}	5.9×10^{-51}	5.9×10^{-51}
R96	$\text{CHCHOO}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOOH}^* + *$	-3.9×10^{-36}	2.9×10^{-34}	2.9×10^{-34}	-3.1×10^{-51}	8.5×10^{-51}	1.2×10^{-50}
R97	$\text{CH}_2\text{CHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOOH}^* + *$	1.3×10^{-36}	1.5×10^{-36}	2.2×10^{-37}	-8.8×10^{-51}	5.4×10^{-50}	6.2×10^{-50}

Table S3 (Continued)

Steps		Pd(211)			Pd(111)		
		r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$	r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$
R98	$\text{CH}_3\text{CHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$	1.4×10^{-36}	2.6×10^{-36}	1.2×10^{-36}	1.2×10^{-50}	1.9×10^{-49}	1.8×10^{-49}
R99	$\text{CCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CCOH}^* + *$	1.4×10^{-27}	1.5×10^{-18}	1.5×10^{-18}	4.0×10^{-43}	1.0×10^{-29}	1.0×10^{-29}
R100	$\text{CHCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCOH}^* + *$	1.6×10^{-26}	1.4×10^{-19}	1.4×10^{-19}	2.5×10^{-36}	2.6×10^{-29}	2.6×10^{-29}
R101	$\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + *$	2.0×10^{-27}	1.9×10^{-24}	1.9×10^{-24}	3.2×10^{-36}	1.3×10^{-29}	1.3×10^{-29}
R102	$\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + *$	4.0×10^{-30}	5.1×10^{-24}	5.1×10^{-24}	2.1×10^{-43}	5.7×10^{-39}	5.7×10^{-39}
R103	$\text{CO}_2^* + * = \text{CO}^* + \text{O}^*$	8.7×10^{-13}	8.7×10^{-13}	5.9×10^{-20}	9.0×10^{-17}	9.0×10^{-17}	1.0×10^{-26}
R104	$\text{CO}^* + * = \text{C}^* + \text{O}^*$	1.6×10^{-22}	1.6×10^{-22}	7.1×10^{-34}	3.2×10^{-34}	3.2×10^{-34}	9.0×10^{-46}
R105	$\text{H}_2\text{COO}^* + * = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{O}^*$	1.6×10^{-22}	1.6×10^{-22}	3.4×10^{-27}	4.0×10^{-26}	4.0×10^{-26}	1.9×10^{-35}
R106	$\text{COH}^* + * = \text{C}^* + \text{OH}^*$	1.2×10^{-13}	1.2×10^{-13}	3.4×10^{-25}	1.4×10^{-26}	1.4×10^{-26}	2.1×10^{-38}
R107	$\text{HCOH}^* + * = \text{CH}^* + \text{OH}^*$	1.8×10^{-14}	1.8×10^{-14}	3.9×10^{-26}	1.5×10^{-20}	1.5×10^{-20}	1.0×10^{-32}
R108	$\text{CH}_2\text{OH}^* + * = \text{CH}_2^* + \text{OH}^*$	6.4×10^{-13}	6.4×10^{-13}	3.3×10^{-25}	3.2×10^{-24}	3.2×10^{-24}	1.7×10^{-34}
R109	$\text{CH}_3\text{OH}^* + * = \text{CH}_3^* + \text{OH}^*$	2.7×10^{-23}	2.7×10^{-23}	8.1×10^{-33}	2.0×10^{-35}	2.0×10^{-35}	1.1×10^{-42}
R110	$\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{C}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.5×10^{-9}	1.5×10^{-9}	1.3×10^{-29}	3.6×10^{-22}	3.6×10^{-22}	5.3×10^{-48}
R111	$\text{HCOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.0×10^{-9}	1.0×10^{-9}	7.1×10^{-30}	4.2×10^{-19}	4.2×10^{-19}	2.8×10^{-45}
R112	$\text{CH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2^* + \text{H}_2\text{O}^*$	2.1×10^{-8}	2.1×10^{-8}	3.5×10^{-29}	9.1×10^{-17}	9.1×10^{-17}	4.5×10^{-41}
R113	$\text{CH}_3\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.3×10^{-21}	1.3×10^{-21}	1.2×10^{-39}	1.0×10^{-30}	1.0×10^{-30}	5.4×10^{-52}
R114	$\text{COOH}^* + * = \text{CO}^* + \text{OH}^*$	2.1×10^{-6}	2.1×10^{-6}	4.2×10^{-13}	1.0×10^{-10}	1.0×10^{-10}	6.7×10^{-21}
R115	$\text{HCOOH}^* + * = \text{HCO}^* + \text{OH}^*$	1.3×10^{-13}	1.3×10^{-13}	3.0×10^{-16}	2.4×10^{-21}	2.4×10^{-21}	6.3×10^{-24}
R116	$\text{H}_2\text{COOH}^* + * = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{OH}^*$	3.8×10^{-16}	3.8×10^{-16}	2.2×10^{-19}	3.6×10^{-25}	3.6×10^{-25}	1.3×10^{-30}
R117	$\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	3.1×10^{-5}	3.1×10^{-5}	1.9×10^{-20}	2.3×10^{-10}	2.3×10^{-10}	1.4×10^{-34}
R118	$\text{HCOOH}^* + \text{H}^* = \text{HCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	3.6×10^{-13}	3.6×10^{-13}	2.6×10^{-24}	7.7×10^{-22}	7.7×10^{-22}	1.9×10^{-38}
R119	$\text{H}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	6.3×10^{-14}	6.3×10^{-14}	1.1×10^{-25}	1.3×10^{-23}	1.3×10^{-23}	4.4×10^{-43}
R120	$\text{HOCOH}^* + * = \text{COH}^* + \text{OH}^*$	1.6×10^{-14}	1.6×10^{-14}	3.1×10^{-21}	3.1×10^{-16}	3.1×10^{-16}	2.1×10^{-26}
R121	$\text{HOCOH}^* + * = \text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	2.4×10^{-13}	2.4×10^{-13}	1.5×10^{-28}	1.8×10^{-17}	1.8×10^{-17}	1.1×10^{-41}
R122	$\text{HOCHOH}^* + * = \text{HCOH}^* + \text{OH}^*$	3.8×10^{-13}	3.8×10^{-13}	7.4×10^{-20}	7.3×10^{-17}	7.3×10^{-17}	5.1×10^{-27}
R123	$\text{HOCHOH}^* + * = \text{HCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.6×10^{-19}	1.6×10^{-19}	9.6×10^{-35}	1.8×10^{-19}	1.8×10^{-19}	1.2×10^{-43}
R124	$\text{HOCOH}^* + \text{H}^* = \text{COH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	6.9×10^{-10}	6.9×10^{-10}	4.3×10^{-25}	3.3×10^{-14}	3.3×10^{-14}	2.1×10^{-38}
R125	$\text{HOCHOH}^* + \text{H}^* = \text{HCOH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.2×10^{-12}	1.2×10^{-12}	7.7×10^{-28}	2.7×10^{-13}	2.7×10^{-13}	1.8×10^{-37}
R126	$\text{CCOOH}^* + * = \text{CCO}^* + \text{OH}^*$	1.0×10^{-24}	1.0×10^{-24}	2.7×10^{-30}	1.9×10^{-35}	1.9×10^{-35}	1.6×10^{-41}
R127	$\text{CHCOOH}^* + * = \text{CHCO}^* + \text{OH}^*$	7.4×10^{-26}	7.4×10^{-26}	6.6×10^{-30}	4.1×10^{-35}	4.1×10^{-35}	5.4×10^{-41}
R128	$\text{CH}_2\text{COOH}^* + * = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{OH}^*$	8.9×10^{-28}	1.1×10^{-27}	2.0×10^{-28}	2.8×10^{-36}	2.9×10^{-36}	3.8×10^{-39}
R129	$\text{CH}_3\text{COOH}^* + * = \text{CH}_3\text{CO}^* + \text{OH}^*$	-2.4×10^{-26}	7.5×10^{-29}	2.4×10^{-26}	-9.8×10^{-38}	5.8×10^{-44}	9.8×10^{-38}
R130	$\text{CCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	6.2×10^{-26}	6.2×10^{-26}	5.1×10^{-40}	2.6×10^{-32}	2.6×10^{-32}	2.1×10^{-52}

Table S3 (Continued)

Steps		Pd(211)			Pd(111)		
		r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$	r / s^{-1}	$r_{\text{fwd}} / \text{s}^{-1}$	$r_{\text{bkd}} / \text{s}^{-1}$
R131	$\text{CHCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	3.4×10^{-22}	3.4×10^{-22}	9.5×10^{-35}	5.9×10^{-34}	5.9×10^{-34}	7.4×10^{-54}
R132	$\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	9.0×10^{-25}	9.0×10^{-25}	5.2×10^{-34}	1.5×10^{-35}	1.5×10^{-35}	1.9×10^{-52}
R133	$\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.5×10^{-29}	1.5×10^{-29}	1.5×10^{-35}	6.5×10^{-44}	6.5×10^{-44}	1.1×10^{-51}
R134	$\text{CCHOH}^* + * = \text{CCHO}^* + \text{OH}^*$	9.7×10^{-26}	9.7×10^{-26}	2.6×10^{-31}	1.8×10^{-42}	1.8×10^{-42}	1.1×10^{-48}
R135	$\text{CHCHOH}^* + * = \text{CHCHO}^* + \text{OH}^*$	4.9×10^{-29}	4.9×10^{-29}	1.0×10^{-34}	1.7×10^{-41}	1.7×10^{-41}	2.0×10^{-47}
R136	$\text{CH}_2\text{CHOH}^* + * = \text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{OH}^*$	2.8×10^{-28}	2.8×10^{-28}	8.8×10^{-32}	/	/	/
R137	$\text{CH}_3\text{CHOH}^* + * = \text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{OH}^*$	-5.7×10^{-29}	8.5×10^{-30}	6.6×10^{-29}	2.1×10^{-44}	1.1×10^{-43}	9.2×10^{-44}
R138	$\text{CCOH}^* + \text{H}^* = \text{CCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.4×10^{-27}	1.4×10^{-27}	5.8×10^{-43}	4.0×10^{-43}	4.0×10^{-43}	2.8×10^{-64}
R139	$\text{CHCOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	1.6×10^{-26}	1.6×10^{-26}	2.8×10^{-40}	2.5×10^{-36}	2.5×10^{-36}	1.4×10^{-57}
R140	$\text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	2.0×10^{-27}	2.0×10^{-27}	2.6×10^{-36}	3.2×10^{-36}	3.2×10^{-36}	1.2×10^{-54}
R141	$\text{CH}_3\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$	4.0×10^{-30}	4.0×10^{-30}	4.0×10^{-36}	2.1×10^{-43}	2.1×10^{-43}	3.4×10^{-51}
R142	$\text{C}^* + \text{CO}^* = \text{CCO}^* + *$	1.8×10^{-16}	3.2×10^{-16}	1.4×10^{-16}	2.5×10^{-33}	4.1×10^{-33}	1.6×10^{-33}
R143	$\text{CH}^* + \text{CO}^* = \text{CHCO}^* + *$	2.2×10^{-16}	3.9×10^{-16}	1.7×10^{-16}	3.3×10^{-28}	2.2×10^{-27}	1.9×10^{-27}
R144	$\text{CH}_2^* + \text{CO}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + *$	3.7×10^{-16}	3.7×10^{-16}	2.6×10^{-18}	1.2×10^{-29}	1.3×10^{-29}	5.8×10^{-31}
R145	$\text{CH}_3^* + \text{CO}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + *$	-2.0×10^{-17}	4.0×10^{-17}	6.0×10^{-17}	-2.8×10^{-31}	7.8×10^{-34}	2.8×10^{-31}
R146	$\text{C}^* + \text{CO}_2^* = \text{CCOO}^* + *$	3.7×10^{-20}	3.8×10^{-20}	9.3×10^{-22}	1.8×10^{-30}	2.0×10^{-30}	1.2×10^{-31}
R147	$\text{CH}^* + \text{CO}_2^* = \text{CHCOO}^* + *$	1.4×10^{-22}	1.5×10^{-22}	2.6×10^{-24}	1.2×10^{-31}	1.3×10^{-31}	8.9×10^{-33}
R148	$\text{CH}_2^* + \text{CO}_2^* = \text{CH}_2\text{COO}^* + *$	2.7×10^{-23}	2.7×10^{-23}	2.3×10^{-30}	1.4×10^{-31}	1.4×10^{-31}	1.5×10^{-36}
R149	$\text{CH}_3^* + \text{CO}_2^* = \text{CH}_3\text{COO}^* + *$	5.5×10^{-26}	5.5×10^{-26}	2.3×10^{-35}	2.6×10^{-38}	2.6×10^{-38}	1.1×10^{-46}
R150	$\text{C}^* + \text{HCO}^* = \text{CCHO}^* + *$	7.7×10^{-27}	1.2×10^{-26}	4.5×10^{-27}	4.0×10^{-38}	4.5×10^{-38}	5.1×10^{-39}
R151	$\text{CH}^* + \text{HCO}^* = \text{CHCHO}^* + *$	2.0×10^{-22}	2.1×10^{-22}	1.2×10^{-23}	4.9×10^{-35}	7.4×10^{-35}	2.5×10^{-35}
R152	$\text{CH}_2^* + \text{HCO}^* = \text{CH}_2\text{CHO}^* + *$	7.3×10^{-23}	7.3×10^{-23}	4.8×10^{-26}	8.3×10^{-35}	8.4×10^{-35}	9.1×10^{-37}
R153	$\text{CH}_3^* + \text{HCO}^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + *$	2.7×10^{-24}	2.9×10^{-24}	2.1×10^{-25}	5.0×10^{-40}	5.1×10^{-40}	5.5×10^{-42}
R154	$\text{O}^* + \text{H}^* = \text{OH}^* + *$	8.7×10^{-13}	2.4×10^{-12}	1.5×10^{-12}	9.0×10^{-17}	2.0×10^{-16}	1.1×10^{-16}
R155	$\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{O}^* + *$	2.1×10^{-6}	2.1×10^{-6}	6.7×10^{-15}	1.0×10^{-10}	1.0×10^{-10}	9.8×10^{-25}
R156	$\text{OH}^* + \text{OH}^* = \text{H}_2\text{O}^* + \text{O}^*$	3.9×10^{-19}	3.9×10^{-19}	1.9×10^{-27}	2.3×10^{-20}	2.3×10^{-20}	4.0×10^{-34}

Table S4. Coverages of the involved intermediates in the hydrogenation of CO₂ to C₁ & C₂ oxygenates and methane on Pd(211) and Pd(111) surfaces predicted by microkinetic simulations. Simulation conditions: 500 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

	Species	Pd(211)	Pd(111)		Species	Pd(211)	Pd(111)
M1	CO ₂ *	1.2×10 ⁻⁹	1.3×10 ⁻¹³	M36	CH ₂ CHOH*	1.2×10 ⁻²²	3.2×10 ⁻³³
M2	HCOO*	3.2×10 ⁻¹²	1.2×10 ⁻¹⁶	M37	CH ₃ CHOH*	1.5×10 ⁻²²	1.2×10 ⁻³³
M3	H ₂ COO*	1.6×10 ⁻²⁸	9.7×10 ⁻³²	M38	CCH ₂ O*	7.9×10 ⁻²⁵	1.9×10 ⁻⁴⁴
M4	COOH*	4.7×10 ⁻¹⁰	3.0×10 ⁻¹²	M39	CHCH ₂ O*	1.8×10 ⁻³¹	2.8×10 ⁻⁴³
M5	HCOOH*	4.8×10 ⁻¹⁴	1.3×10 ⁻¹⁹	M40	CH ₂ CH ₂ O*	3.2×10 ⁻³⁰	1.0×10 ⁻⁴¹
M6	H ₂ COOH*	1.8×10 ⁻²¹	7.1×10 ⁻²⁹	M41	CH ₃ CH ₂ O*	3.8×10 ⁻²⁸	2.7×10 ⁻⁴⁰
M7	HOCO*	2.6×10 ⁻⁸	1.9×10 ⁻¹²	M42	CCH ₂ OH*	5.7×10 ⁻²⁴	5.2×10 ⁻³³
M8	HOCHOH*	9.5×10 ⁻¹⁵	1.1×10 ⁻¹⁵	M43	CHCH ₂ OH*	2.0×10 ⁻²⁴	1.7×10 ⁻³⁶
M9	CO*	1.8×10 ⁻¹	1.8×10 ⁻⁵	M44	CH ₂ CH ₂ OH*	1.0×10 ⁻²⁹	1.0×10 ⁻³⁷
M10	HCO*	3.8×10 ⁻¹⁰	1.3×10 ⁻¹⁶	M45	CH ₃ CH ₂ OH*	5.4×10 ⁻²⁷	5.6×10 ⁻⁴⁰
M11	H ₂ CO*	8.4×10 ⁻¹⁴	2.4×10 ⁻²⁴	M46	CCOO*	8.2×10 ⁻²⁶	3.0×10 ⁻³⁸
M12	H ₃ CO*	3.5×10 ⁻¹⁶	7.3×10 ⁻²⁶	M47	CHCOO*	7.8×10 ⁻²⁹	2.6×10 ⁻³⁷
M13	COH*	2.4×10 ⁻⁸	1.3×10 ⁻¹²	M48	CH ₂ COO*	5.0×10 ⁻³⁰	1.7×10 ⁻³⁸
M14	HCOH*	3.0×10 ⁻⁹	2.0×10 ⁻¹⁷	M49	CH ₃ COO*	1.3×10 ⁻²⁸	4.0×10 ⁻³⁸
M15	CH ₂ OH*	1.5×10 ⁻¹¹	1.0×10 ⁻¹⁹	M50	CCOOH*	1.2×10 ⁻²³	1.5×10 ⁻³²
M16	CH ₃ OH*	3.4×10 ⁻¹⁷	5.6×10 ⁻²⁷	M51	CHCOOH*	2.3×10 ⁻²⁶	3.5×10 ⁻³⁴
M17	C*	2.9×10 ⁻¹²	4.9×10 ⁻²⁴	M52	CH ₂ COOH*	1.4×10 ⁻²⁷	4.6×10 ⁻³⁶
M18	CH*	6.5×10 ⁻¹⁴	1.6×10 ⁻¹⁹	M53	CH ₃ COOH*	4.6×10 ⁻²⁹	4.6×10 ⁻⁴¹
M19	CH ₂ *	4.5×10 ⁻¹⁵	5.4×10 ⁻²²	M54	CCOH*	6.4×10 ⁻²⁶	2.0×10 ⁻³³
M20	CH ₃ *	4.7×10 ⁻¹⁶	4.3×10 ⁻²⁴	M55	CHCOH*	2.8×10 ⁻²⁸	8.8×10 ⁻³⁶
M21	CH ₄ *	3.0×10 ⁻²²	8.7×10 ⁻³¹	M56	CH ₂ COH*	1.8×10 ⁻²⁹	1.9×10 ⁻³⁷
M22	CCO*	8.9×10 ⁻²¹	2.7×10 ⁻³⁴	M57	CH ₃ COH*	2.2×10 ⁻³³	1.6×10 ⁻⁴⁶
M23	CHCO*	1.2×10 ⁻²¹	6.6×10 ⁻³²	M58	CCHOO*	1.1×10 ⁻³⁹	1.2×10 ⁻⁵⁸
M24	CH ₂ CO*	1.2×10 ⁻²¹	6.9×10 ⁻³²	M59	CHCHOO*	8.3×10 ⁻⁴³	1.6×10 ⁻⁵⁶
M25	CH ₃ CO*	1.7×10 ⁻¹⁹	5.9×10 ⁻³⁰	M60	CH ₂ CHOO*	1.5×10 ⁻⁴²	6.0×10 ⁻⁵⁷
M26	CCOH*	1.8×10 ⁻²²	4.2×10 ⁻⁴¹	M61	CH ₃ CHOO*	8.2×10 ⁻⁴⁵	2.2×10 ⁻⁵⁷
M27	CHCOH*	5.7×10 ⁻²²	7.4×10 ⁻³⁵	M62	CCHOOH*	3.2×10 ⁻³⁰	3.8×10 ⁻⁴⁷
M28	CH ₂ COH*	3.9×10 ⁻²³	9.4×10 ⁻³⁴	M63	CHCHOOH*	4.2×10 ⁻³⁶	7.0×10 ⁻⁴⁷
M29	CH ₃ COH*	1.4×10 ⁻¹⁹	1.9×10 ⁻³¹	M64	CH ₂ CHOOH*	3.8×10 ⁻³⁶	7.0×10 ⁻⁴⁸
M30	CCHO*	3.2×10 ⁻²³	1.1×10 ⁻³⁵	M65	CH ₃ CHOOH*	5.0×10 ⁻³⁷	6.6×10 ⁻⁵⁰
M31	CHCHO*	1.6×10 ⁻²⁵	1.6×10 ⁻³⁶	M66	H*	8.2×10 ⁻¹	1.0×10 ⁰
M32	CH ₂ CHO*	1.1×10 ⁻²³	5.5×10 ⁻³⁴	M67	O*	7.7×10 ⁻²⁰	3.7×10 ⁻¹⁹
M33	CH ₃ CHO*	3.0×10 ⁻²⁴	1.3×10 ⁻³⁹	M68	OH*	3.4×10 ⁻¹²	8.5×10 ⁻¹⁷
M34	CCHOH*	2.3×10 ⁻²⁴	5.6×10 ⁻³⁶	M69	H ₂ O*	3.5×10 ⁻¹⁷	1.1×10 ⁻²²
M35	CHCHOH*	4.8×10 ⁻²⁵	3.0×10 ⁻³⁵		*	2.5×10 ⁻⁴	4.8×10 ⁻⁵

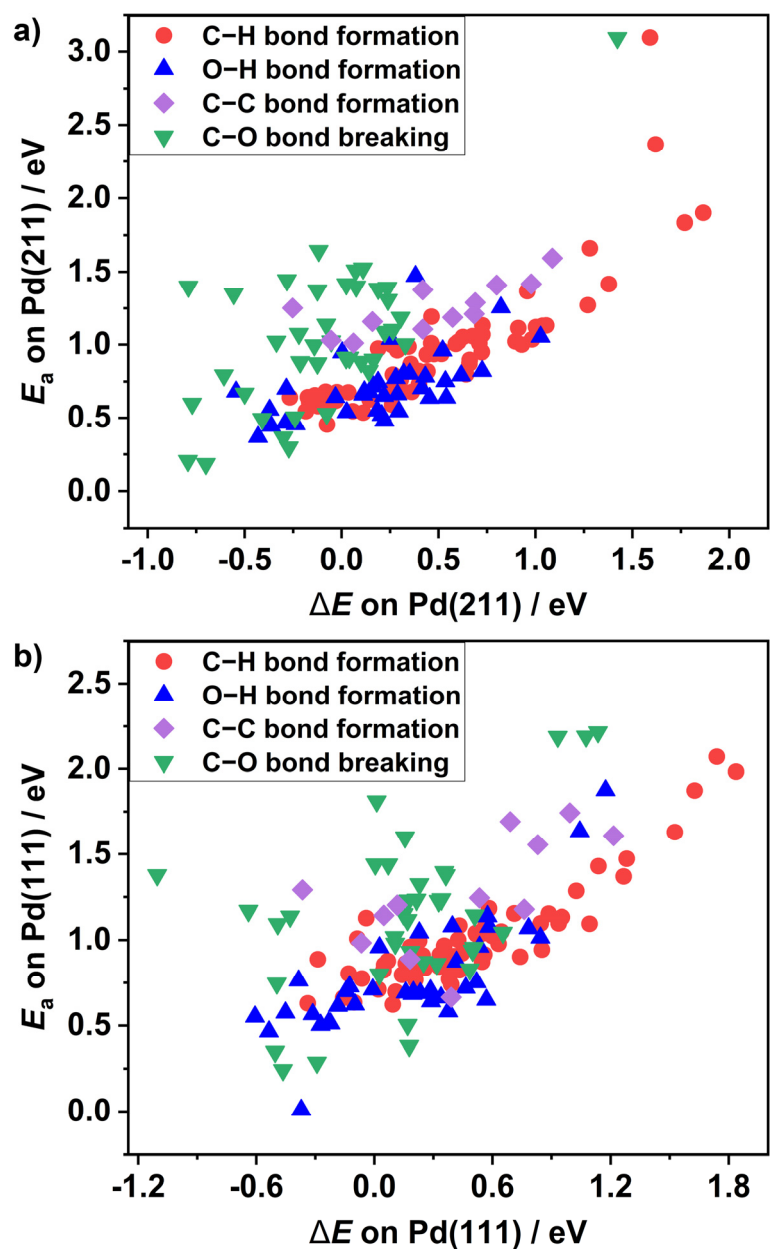


Figure S2. Relations between the reaction energies and the energy barriers of the involved elementary steps in CO₂ hydrogenation on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces.

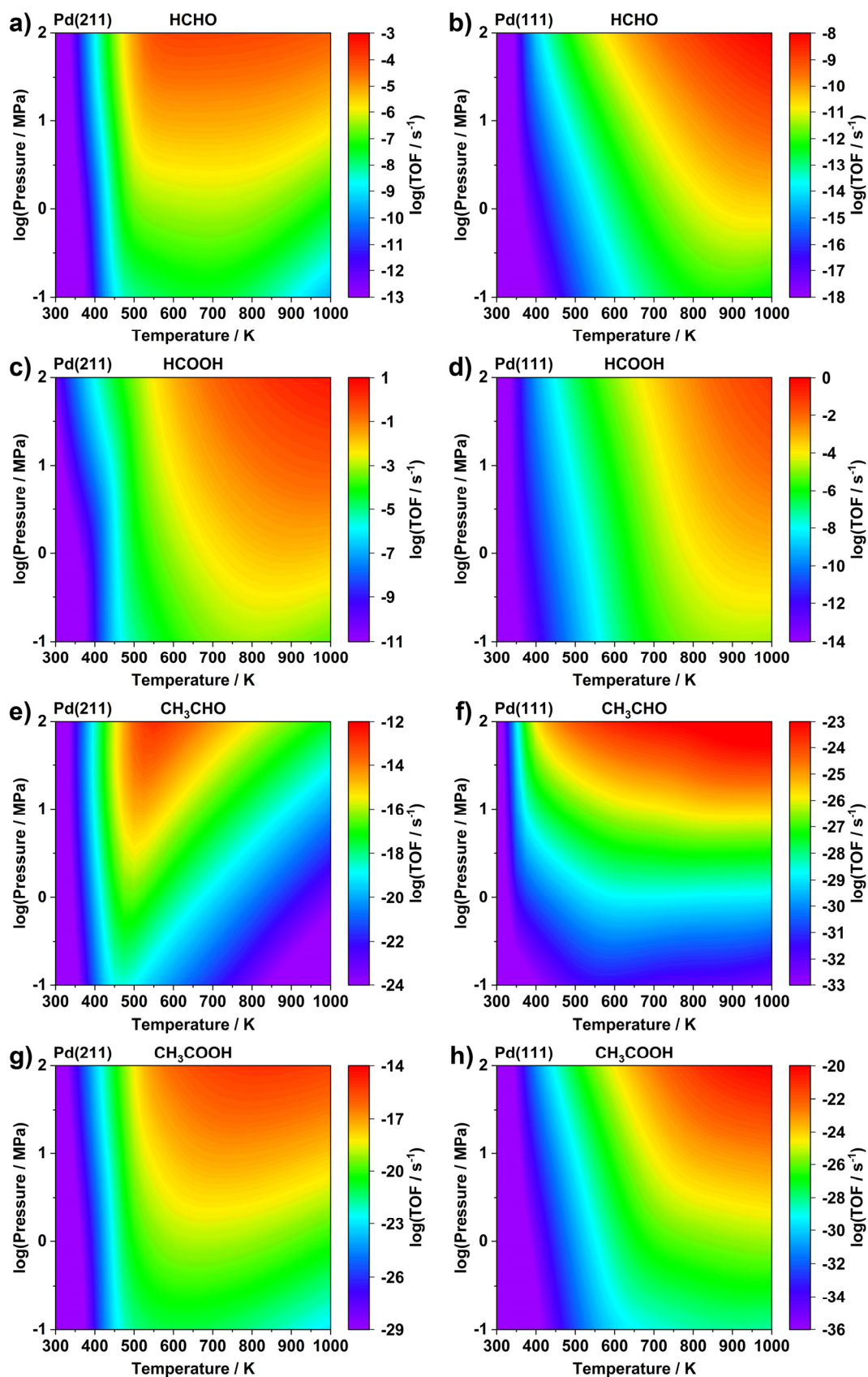


Figure S3. Catalytic activities of CO₂ hydrogenation to formic acid (a, b), formaldehyde (c, d), acetaldehyde (e, f), acetic acid (g, h) on Pd(211) (left) and Pd(111) (right) surfaces predicted by microkinetic simulations (300–1000 K, 0.1–100 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).

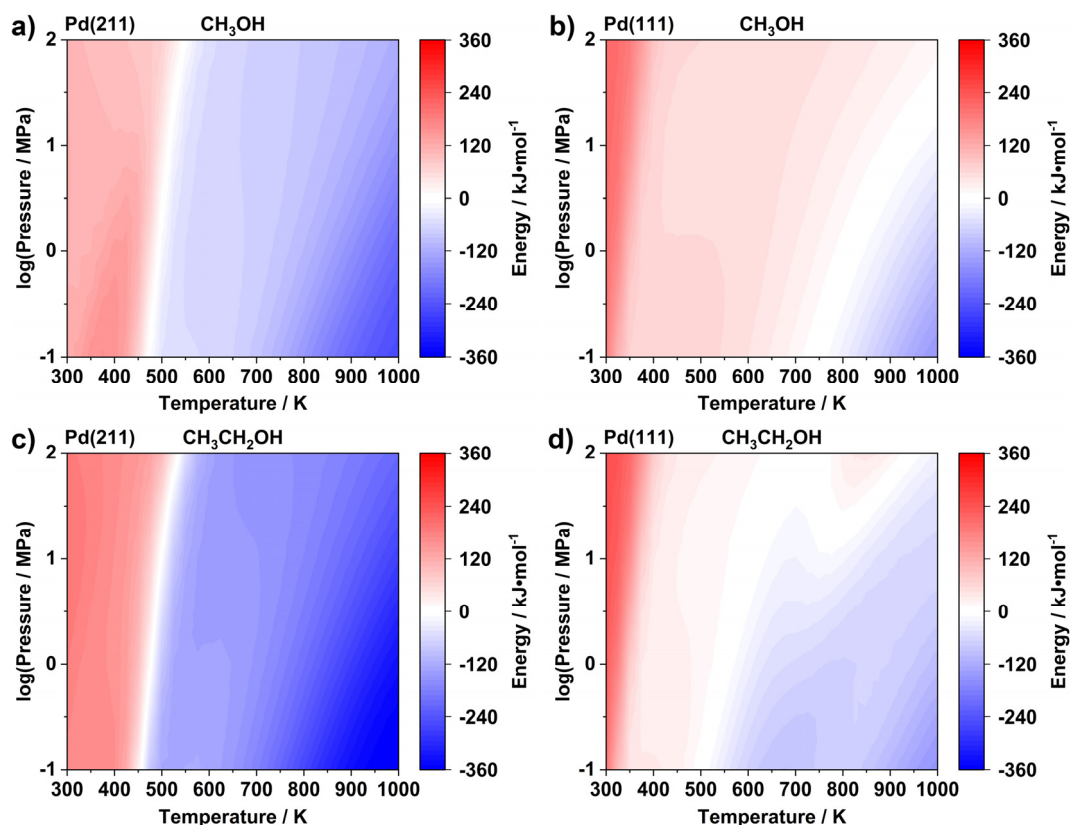


Figure S4. Apparent activation energies of CO₂ hydrogenation to methanol (a, b) and ethanol (b, d) on Pd(211) (left) and Pd(111) (right) surfaces predicted by microkinetic simulations (300–1000 K, 0.1–100 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6). According to experimental reports in Ref. S1–S5, the apparent activation energies are mainly in the range of 19–98 kJ·mol^{−1} for CO₂ hydrogenation to methanol on Pd-based catalysts at about 450–540 K.

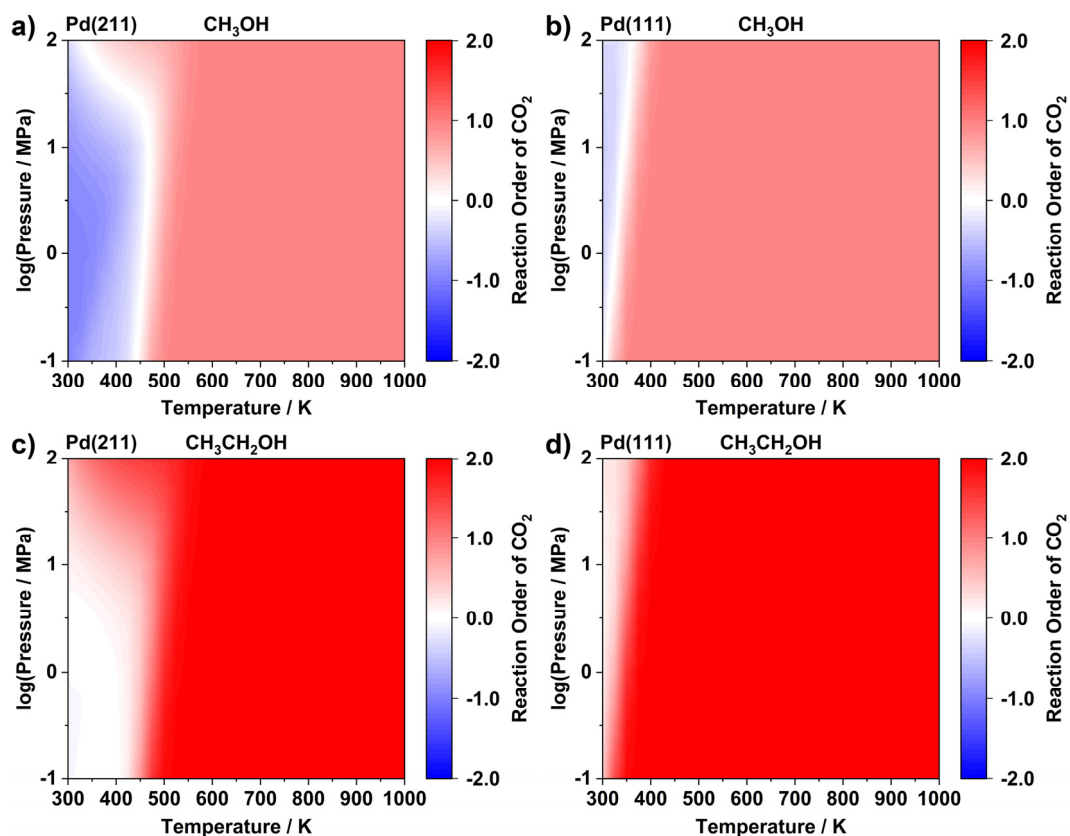


Figure S5. Reaction orders on CO₂ in the hydrogenation of CO₂ to methanol (a, b) and ethanol (c, d) on Pd(211) (left) and Pd(111) (right) surfaces predicted by microkinetic simulations (300–1000 K, 0.1–100 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).

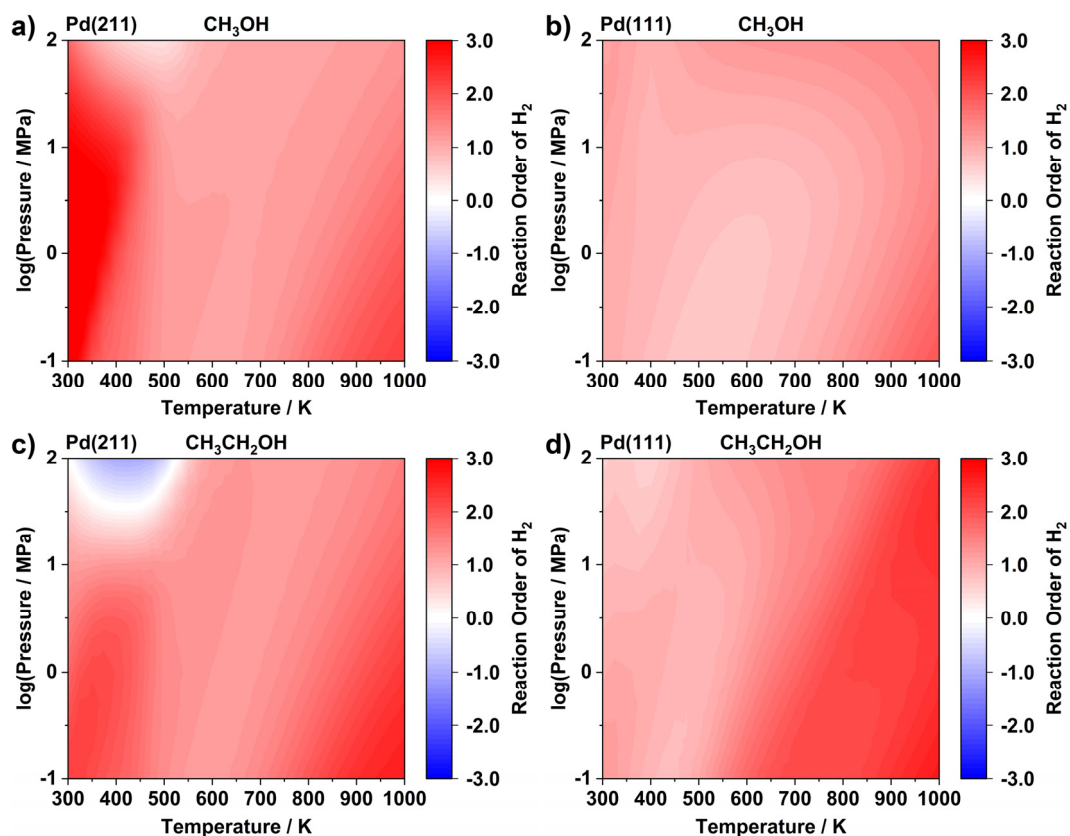


Figure S6. Reaction orders on H_2 in the hydrogenation of CO_2 to methanol (a, b) and ethanol (c, d) on Pd(211) (left) and Pd(111) (right) surfaces predicted by microkinetic simulations (300–1000 K, 0.1–100 MPa, and $CO_2:H_2 = 1:6$).

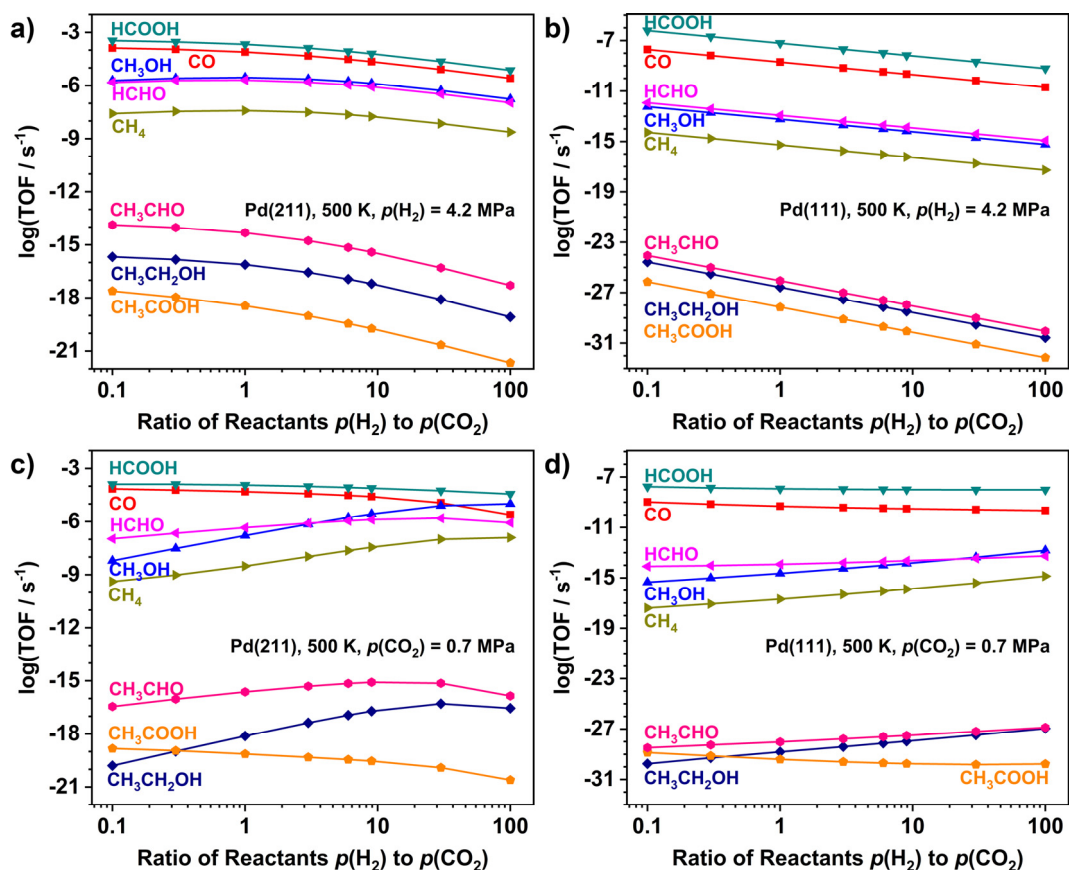


Figure S7. Catalytic activities and the individual dependences on the partial pressure of CO_2 (a, b) and H_2 (c, d) in the hydrogenation of CO_2 to C_1 & C_2 oxygenates and methane on Pd(211) (left) and Pd(111) (right) surfaces predicted by microkinetic simulations.

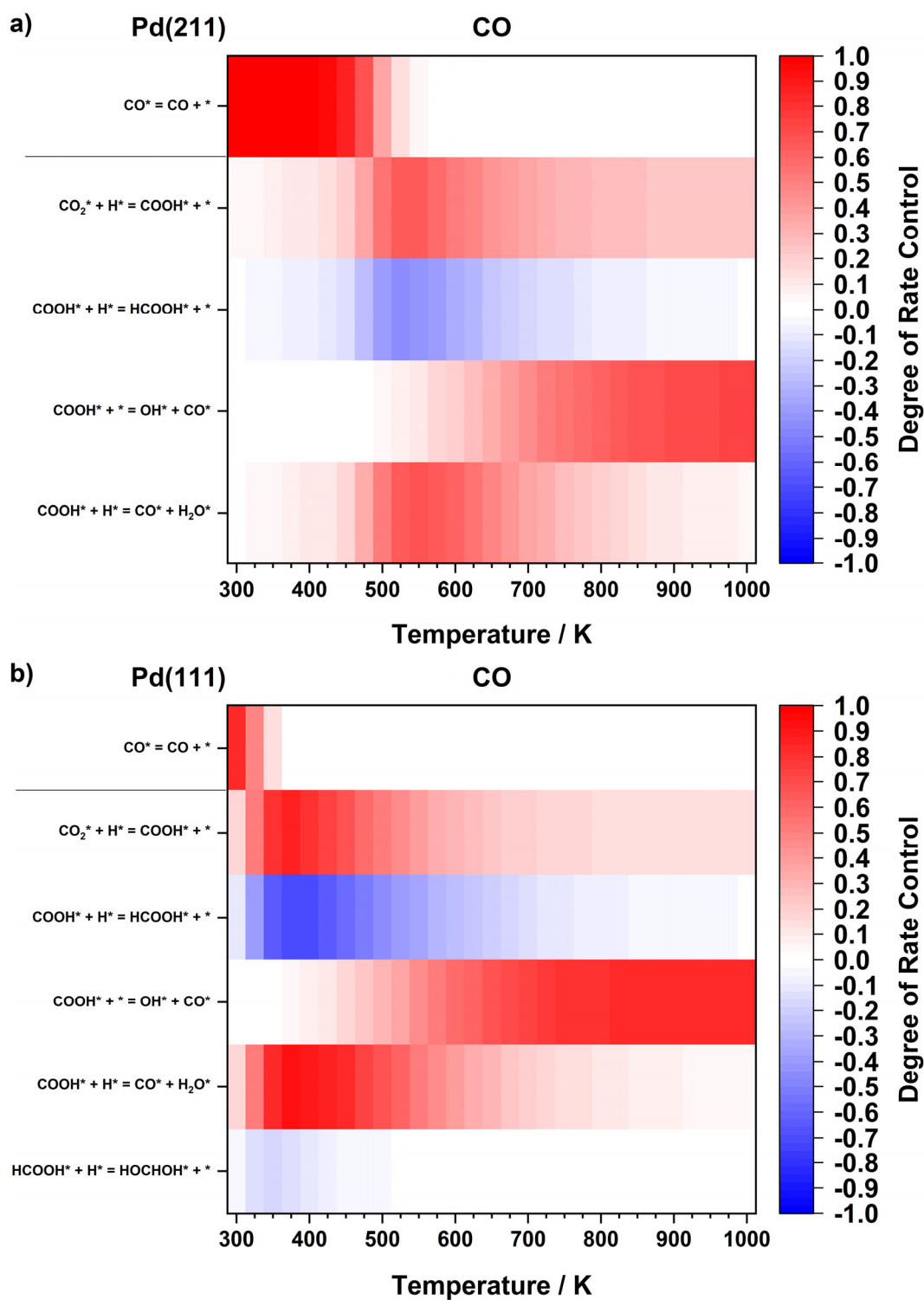


Figure S8. DRC analysis on CO_2 hydrogenation to CO on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and $\text{CO}_2:\text{H}_2 = 1:6$.

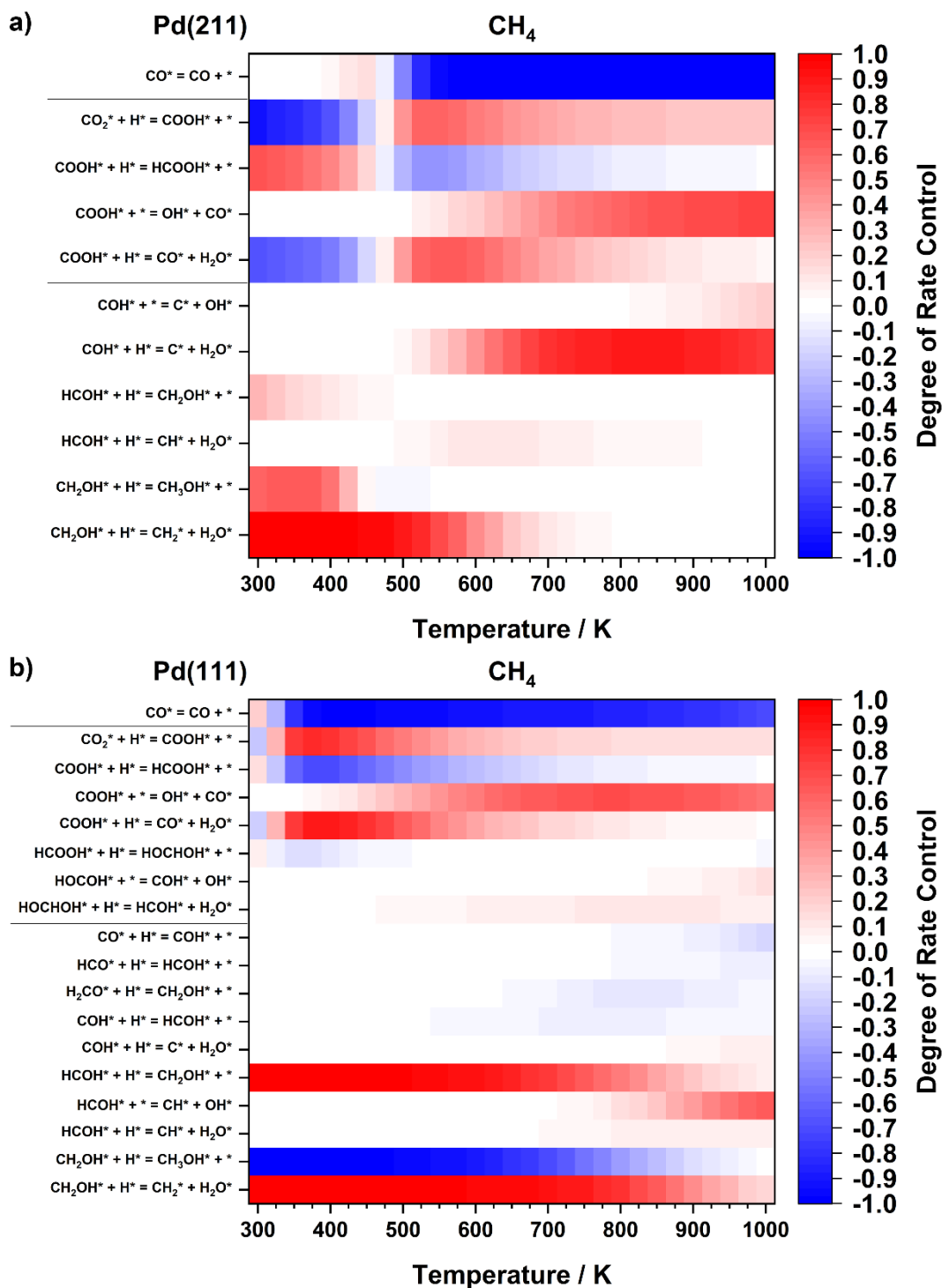


Figure S9. DRC analysis on CO₂ hydrogenation to methane on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

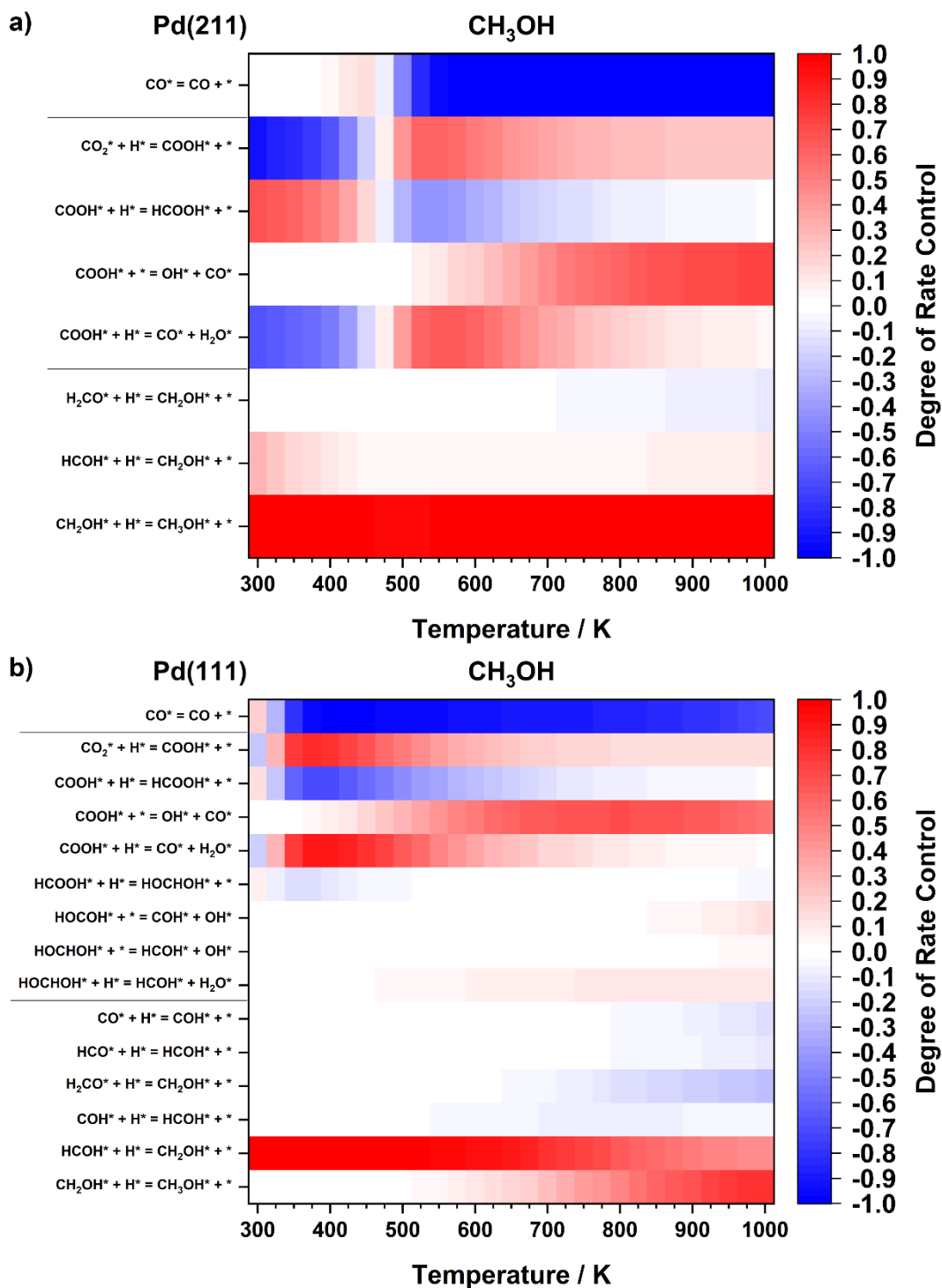


Figure S10. DRC analysis on CO₂ hydrogenation to methanol on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

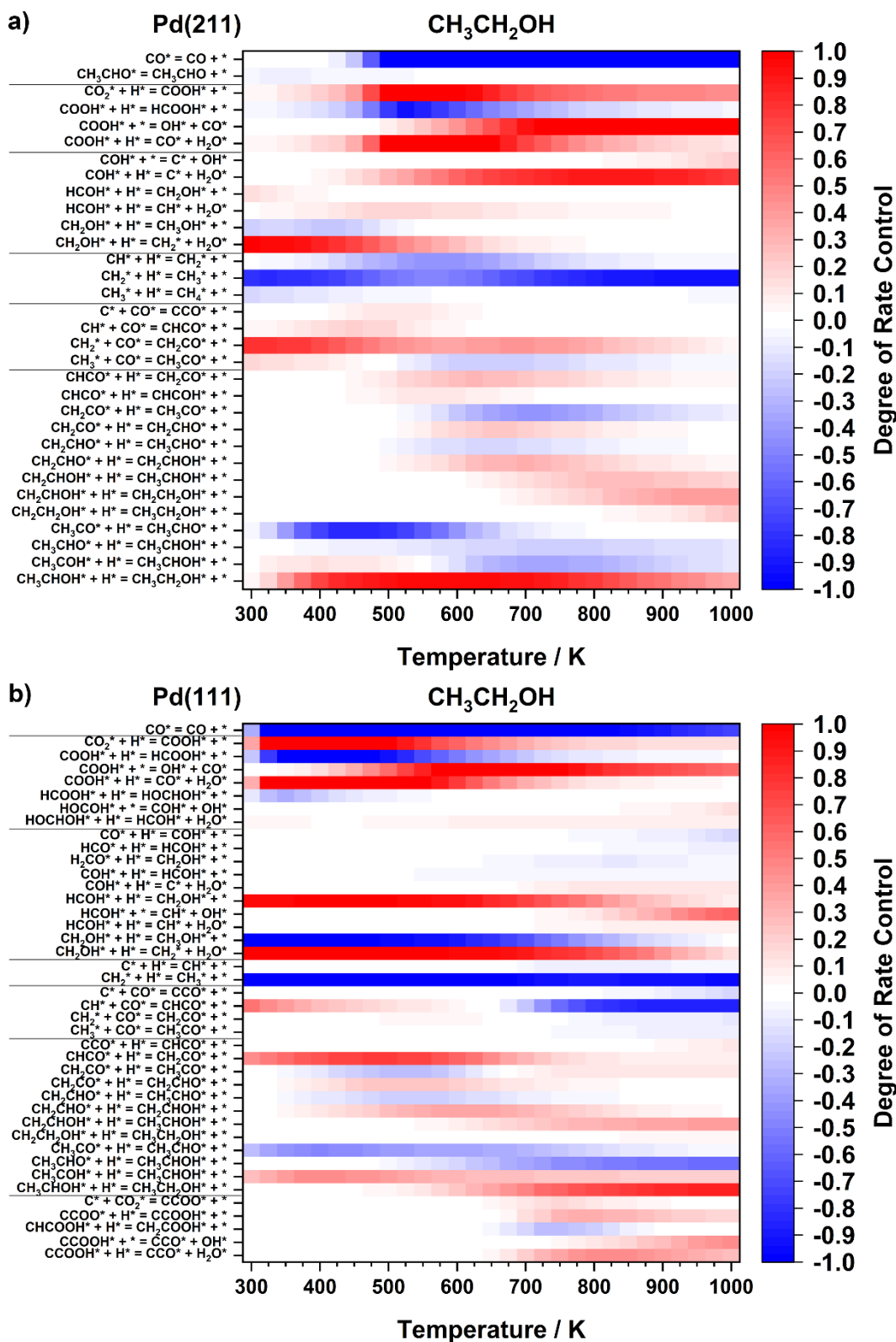


Figure S11. DRC analysis on CO₂ hydrogenation to ethanol on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

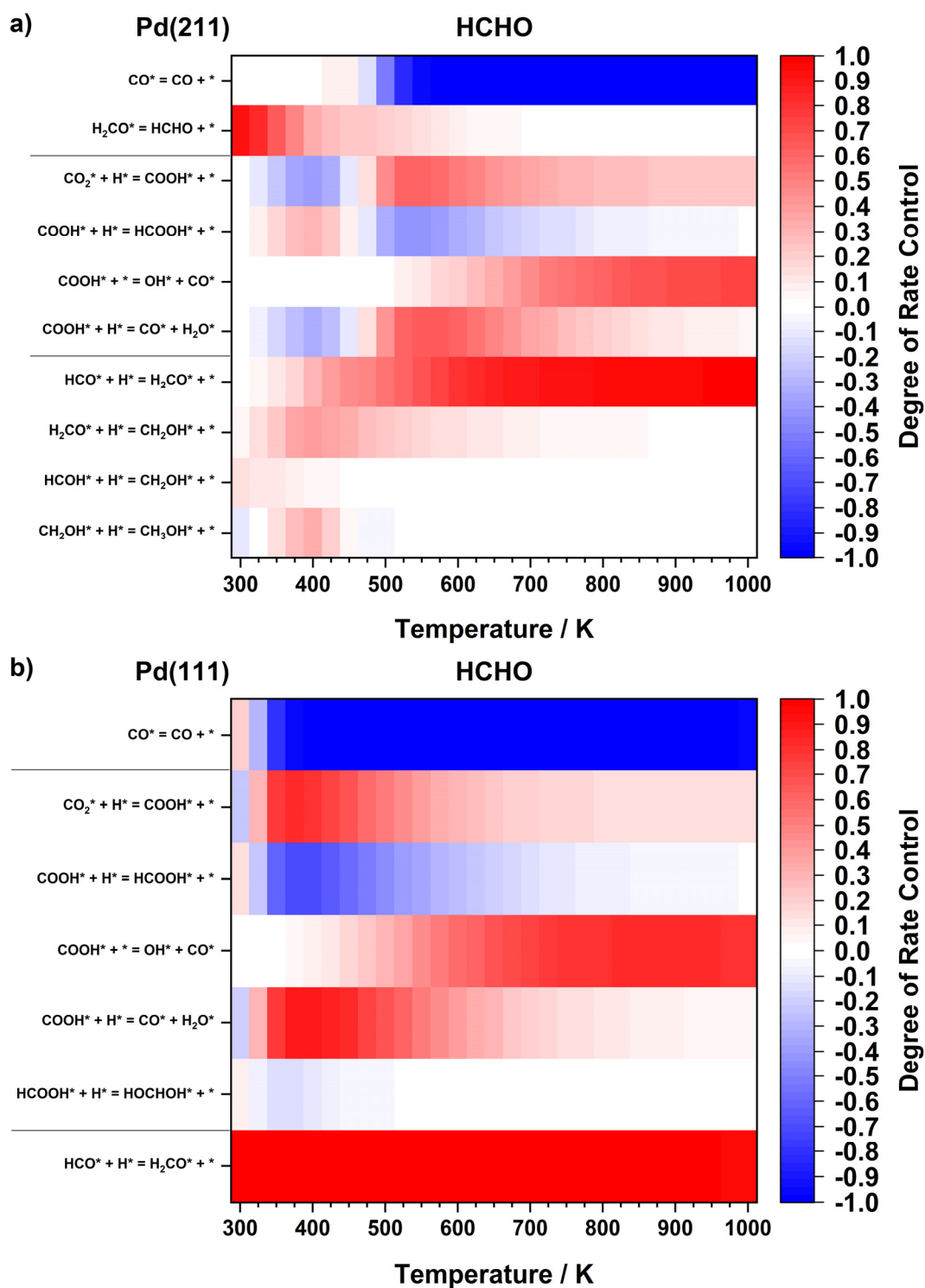


Figure S12. DRC analysis on CO_2 hydrogenation to formaldehyde on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and $\text{CO}_2:\text{H}_2 = 1:6$.

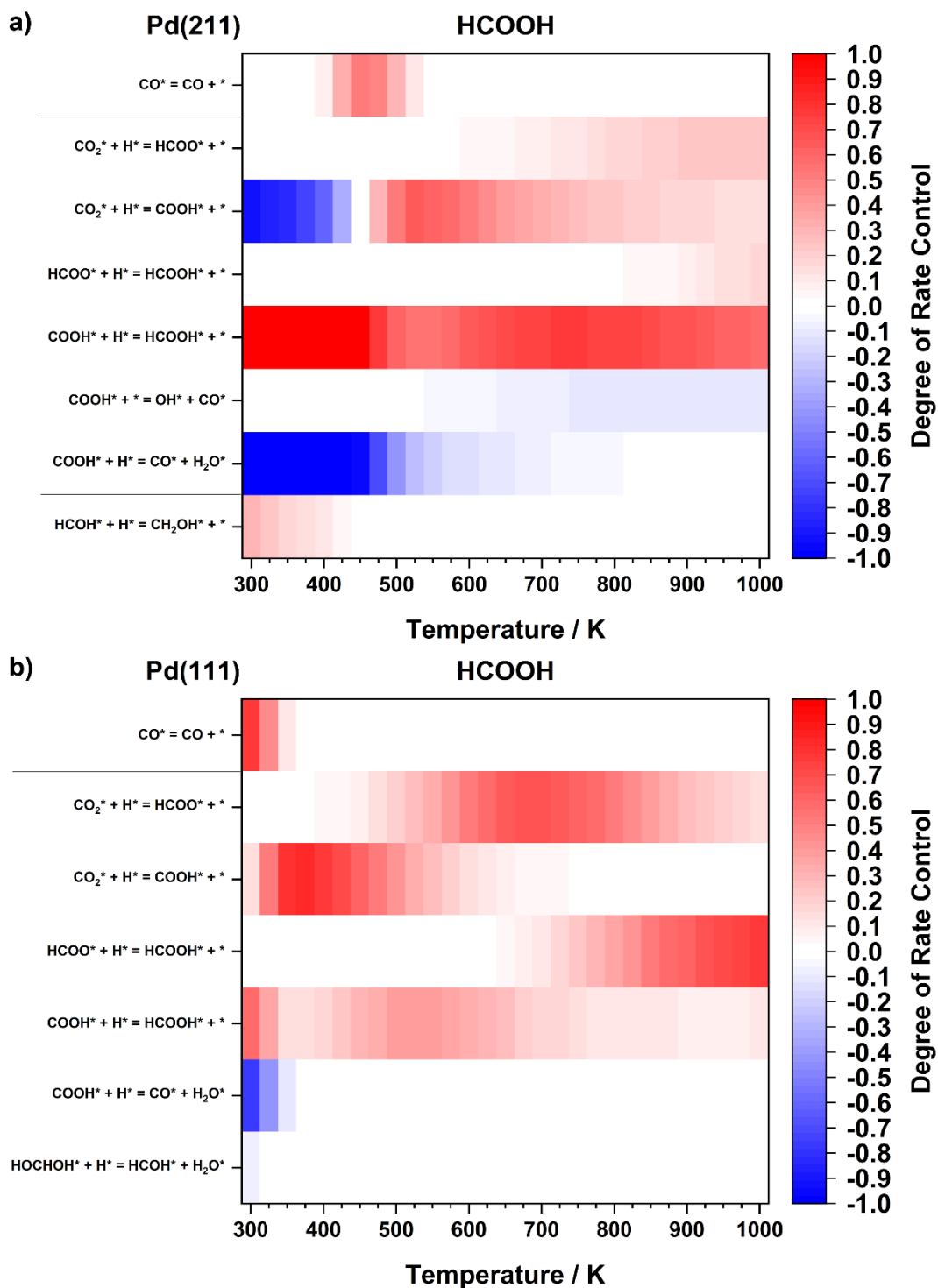


Figure S13. DRC analysis on CO_2 hydrogenation to formic acid on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and $\text{CO}_2:\text{H}_2 = 1:6$.

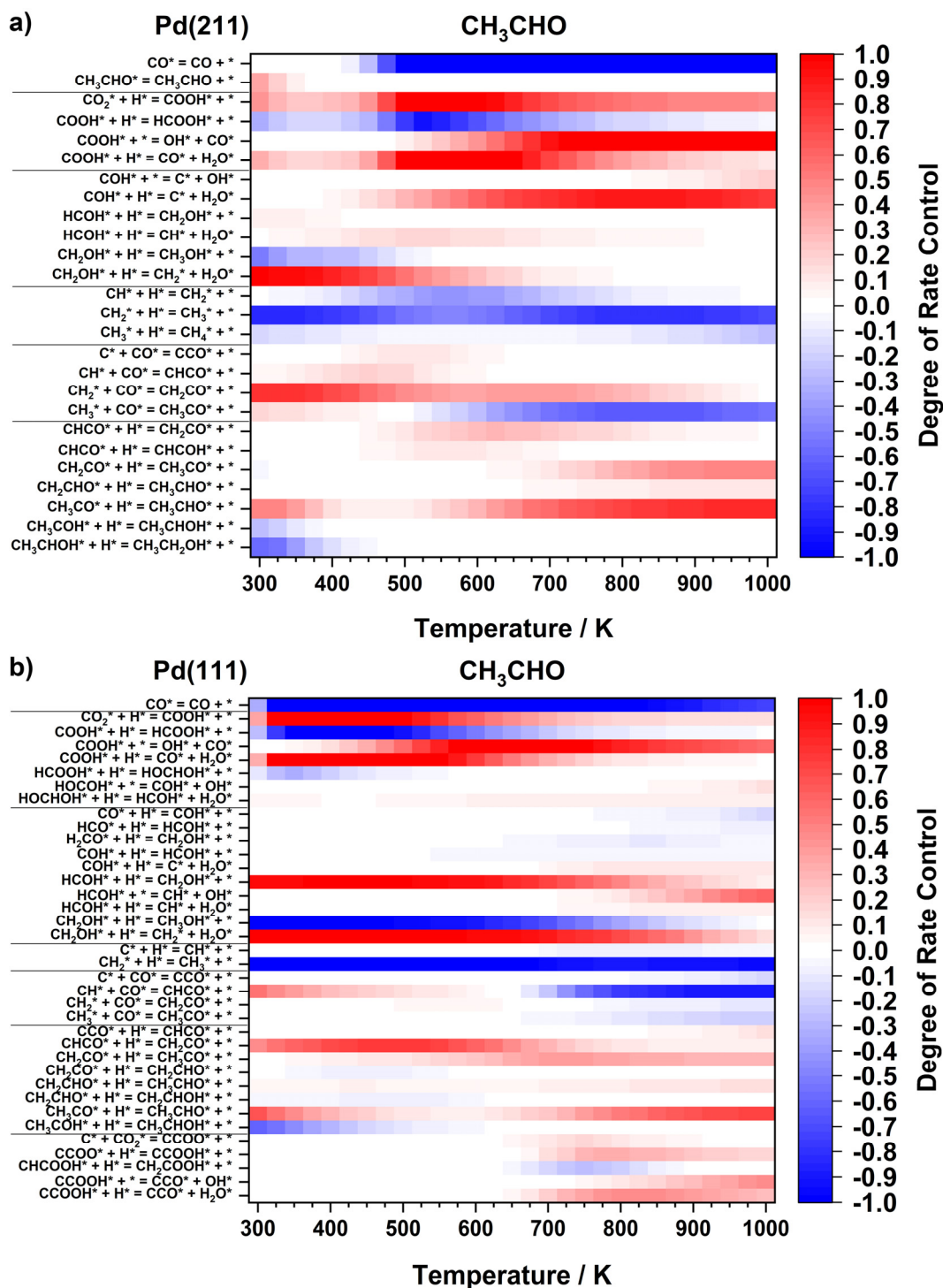


Figure S14. DRC analysis on CO₂ hydrogenation to acetaldehyde on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

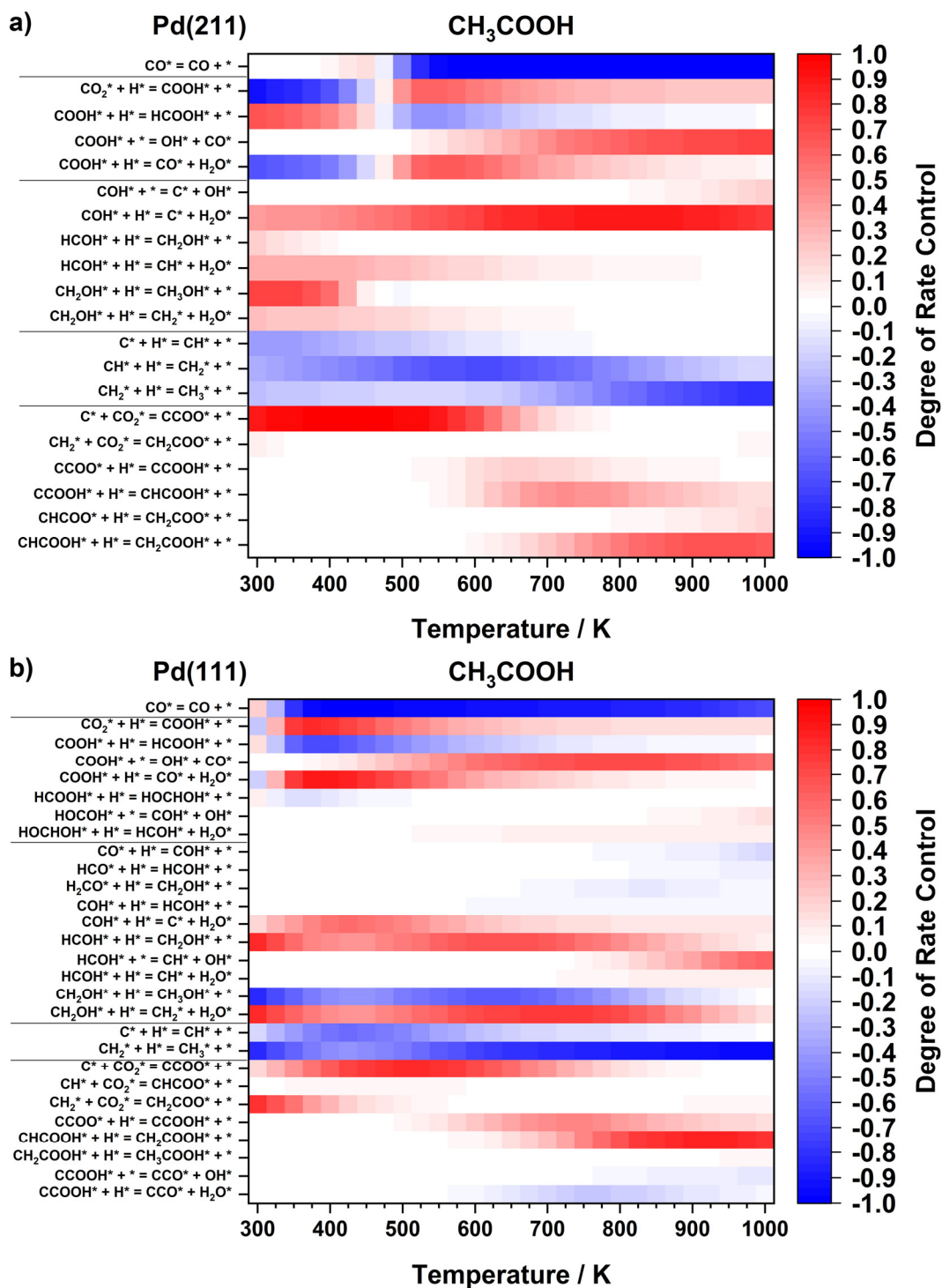


Figure S15. DRC analysis on CO₂ hydrogenation to acetic acid on Pd(211) (a) and Pd(111) (b) surfaces. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

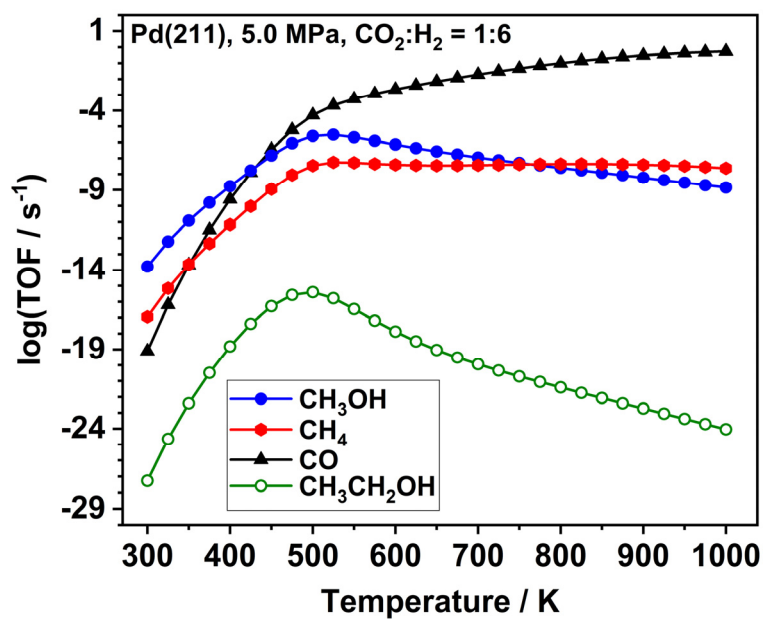


Figure S16. Catalytic activities of CO₂ hydrogenation to CO, methane, methanol, and ethanol on Pd(211) surface predicted by microkinetic simulations. It is assumed that formaldehyde, acetaldehyde, formic acid, and acetic acid are unable to desorb in microkinetic simulations.

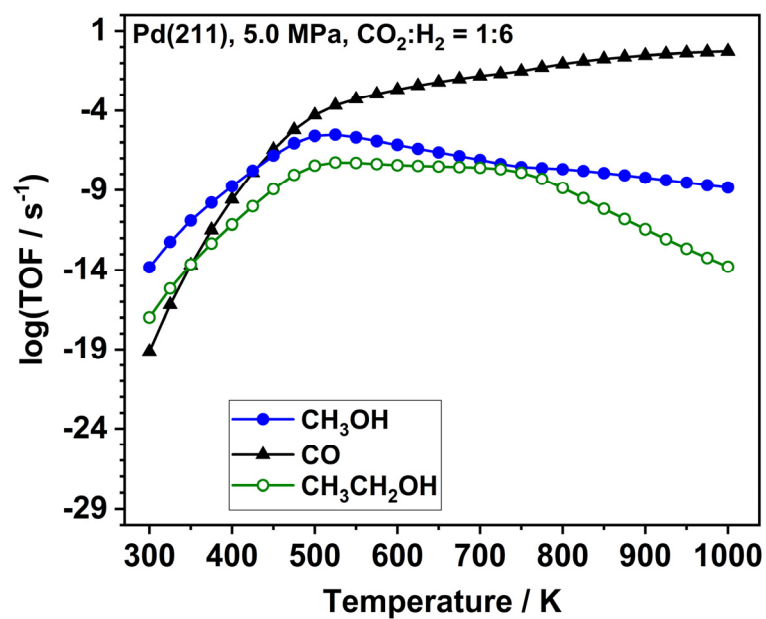


Figure S17. Catalytic activities of CO₂ hydrogenation to CO, methanol, and ethanol on Pd(211) surface predicted by microkinetic simulations. It is hypothetical that methane, aldehydes, and acids are unable to desorb in microkinetic simulations.

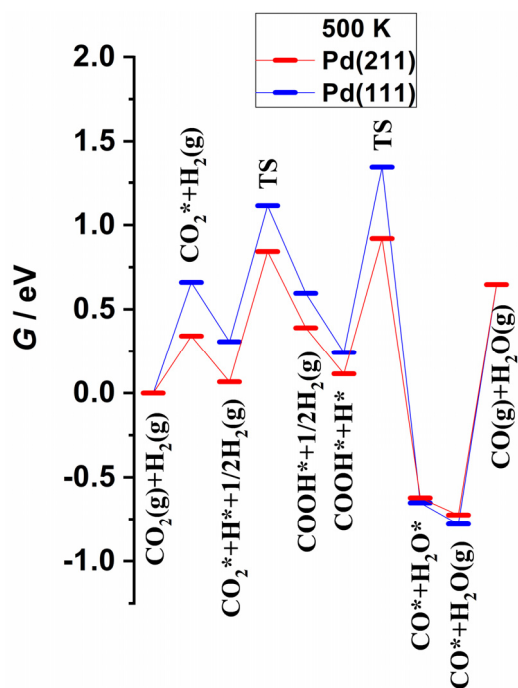


Figure S18. Gibbs free energy profiles of CO₂ hydrogenation to CO on Pd(211) and Pd(111) surfaces according to the most favorable routes predicted by microkinetic simulations (500 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).

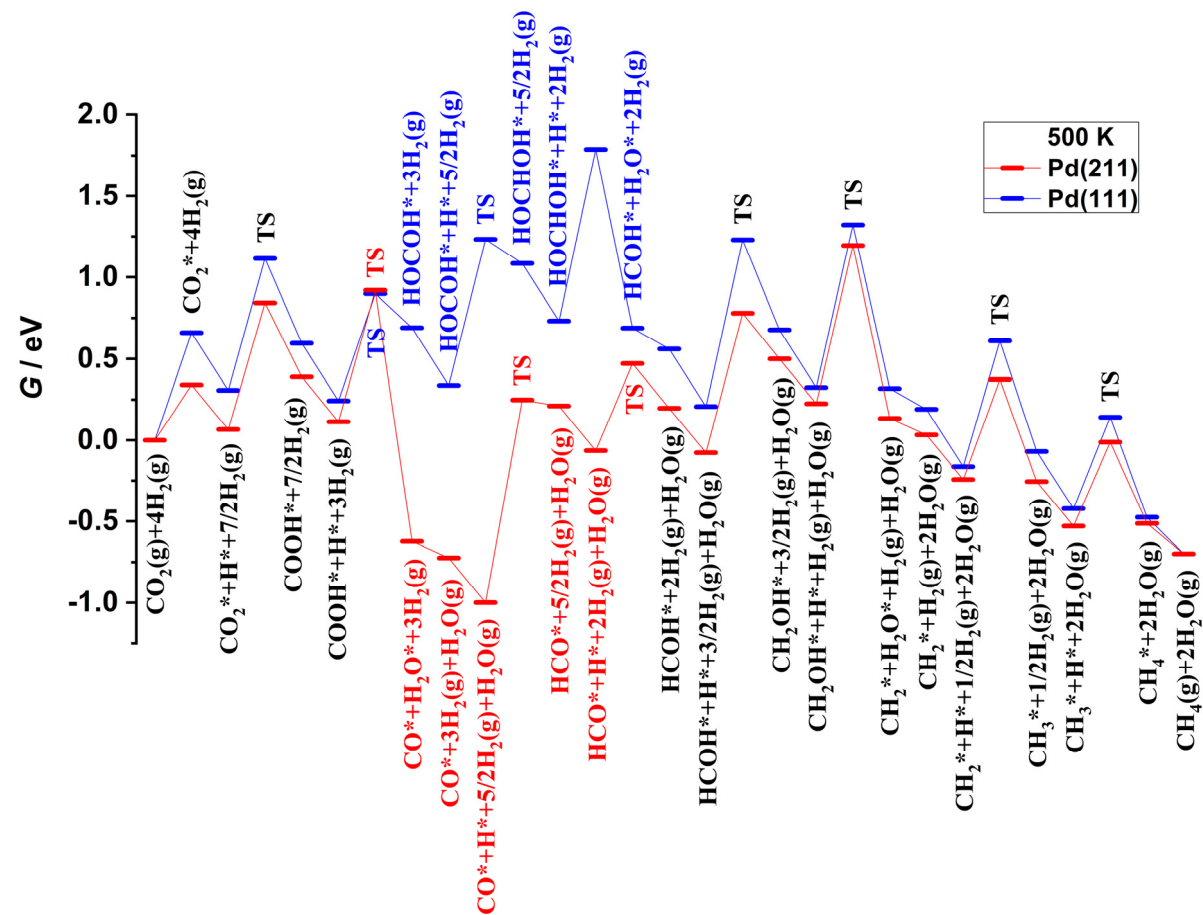
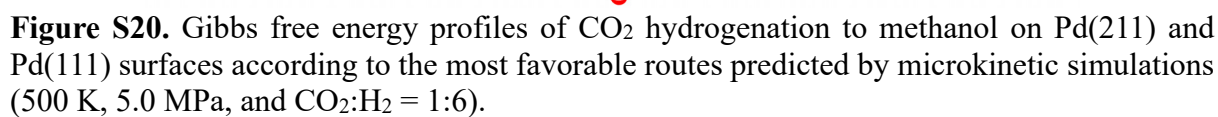


Figure S19. Gibbs free energy profiles of CO₂ hydrogenation to methane on Pd(211) and Pd(111) surfaces according to the most favorable routes predicted by microkinetic simulations (500 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).



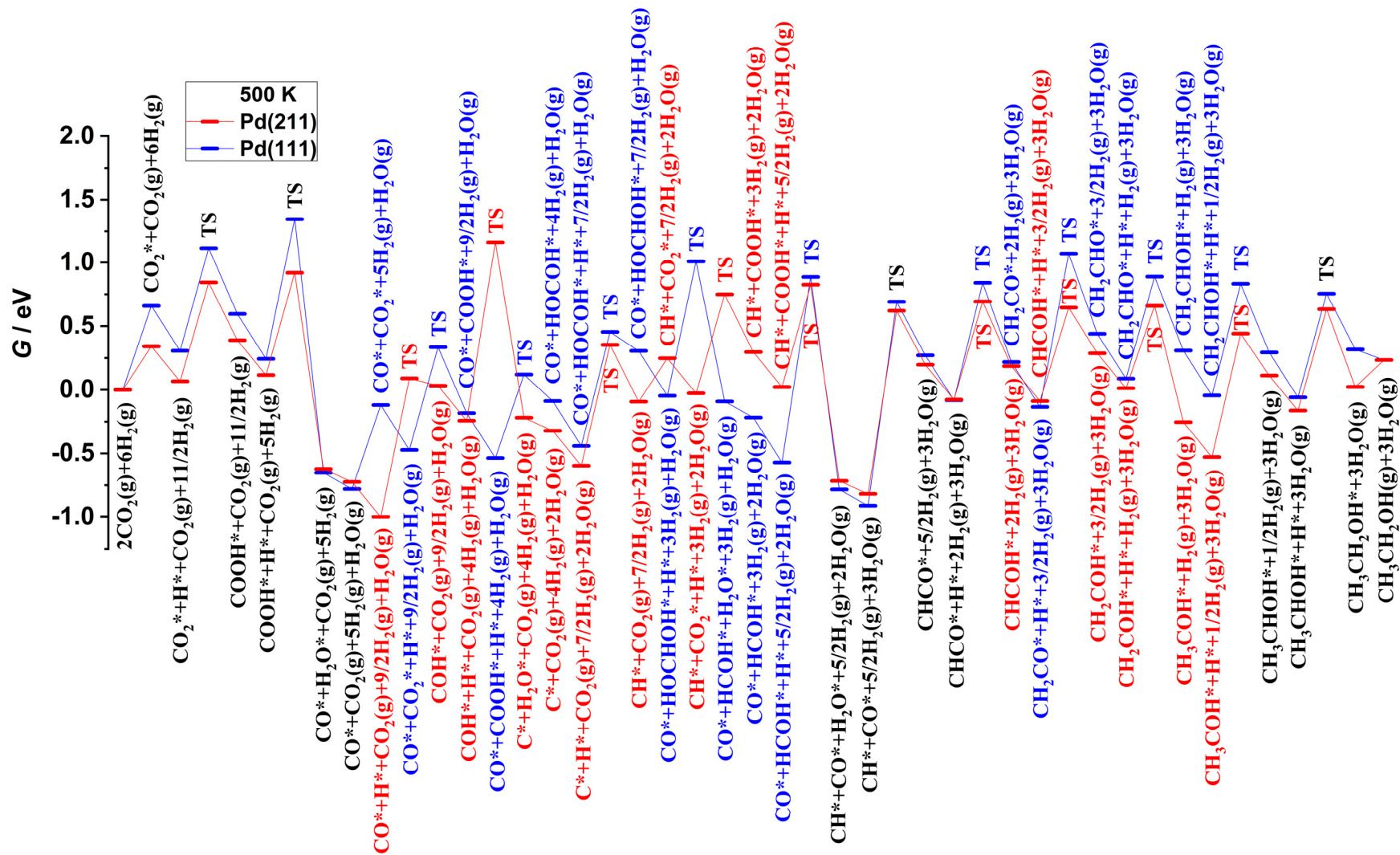


Figure S21. Gibbs free energy profiles of CO₂ hydrogenation to ethanol on Pd(211) and Pd(111) surfaces according to the most favorable routes predicted by microkinetic simulations (500 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).

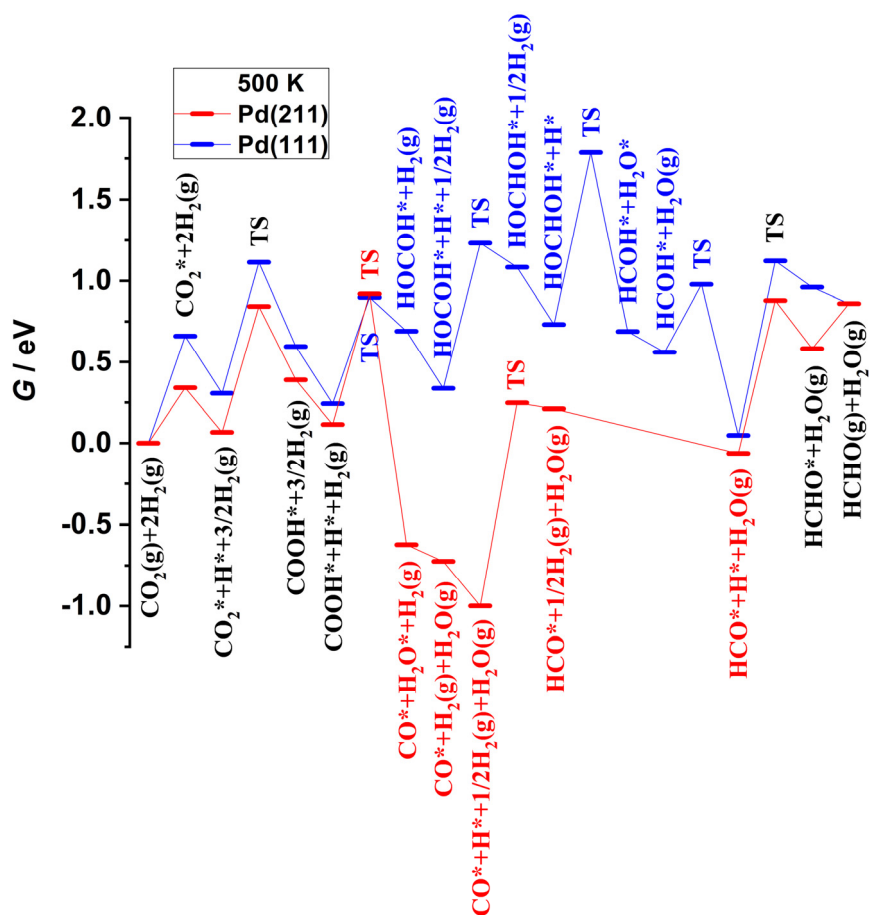


Figure S22. Gibbs free energy profiles of CO₂ hydrogenation to formaldehyde on Pd(211) and Pd(111) surfaces according to the most favorable routes predicted by microkinetic simulations (500 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).

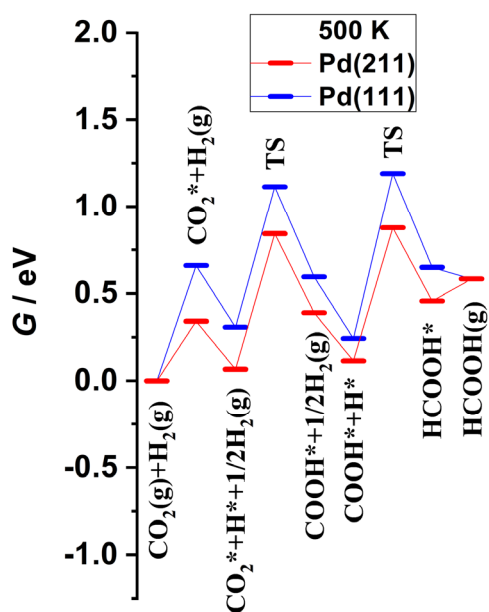
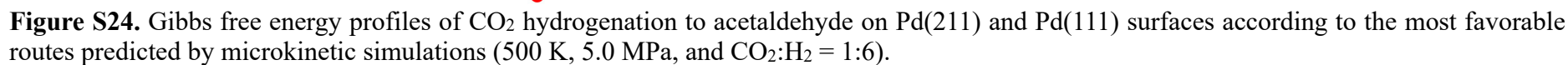


Figure S23. Gibbs free energy profiles of CO_2 hydrogenation to formic acid on Pd(211) and Pd(111) surfaces according to the most favorable routes predicted by microkinetic simulations (500 K, 5.0 MPa, and $\text{CO}_2:\text{H}_2 = 1:6$).



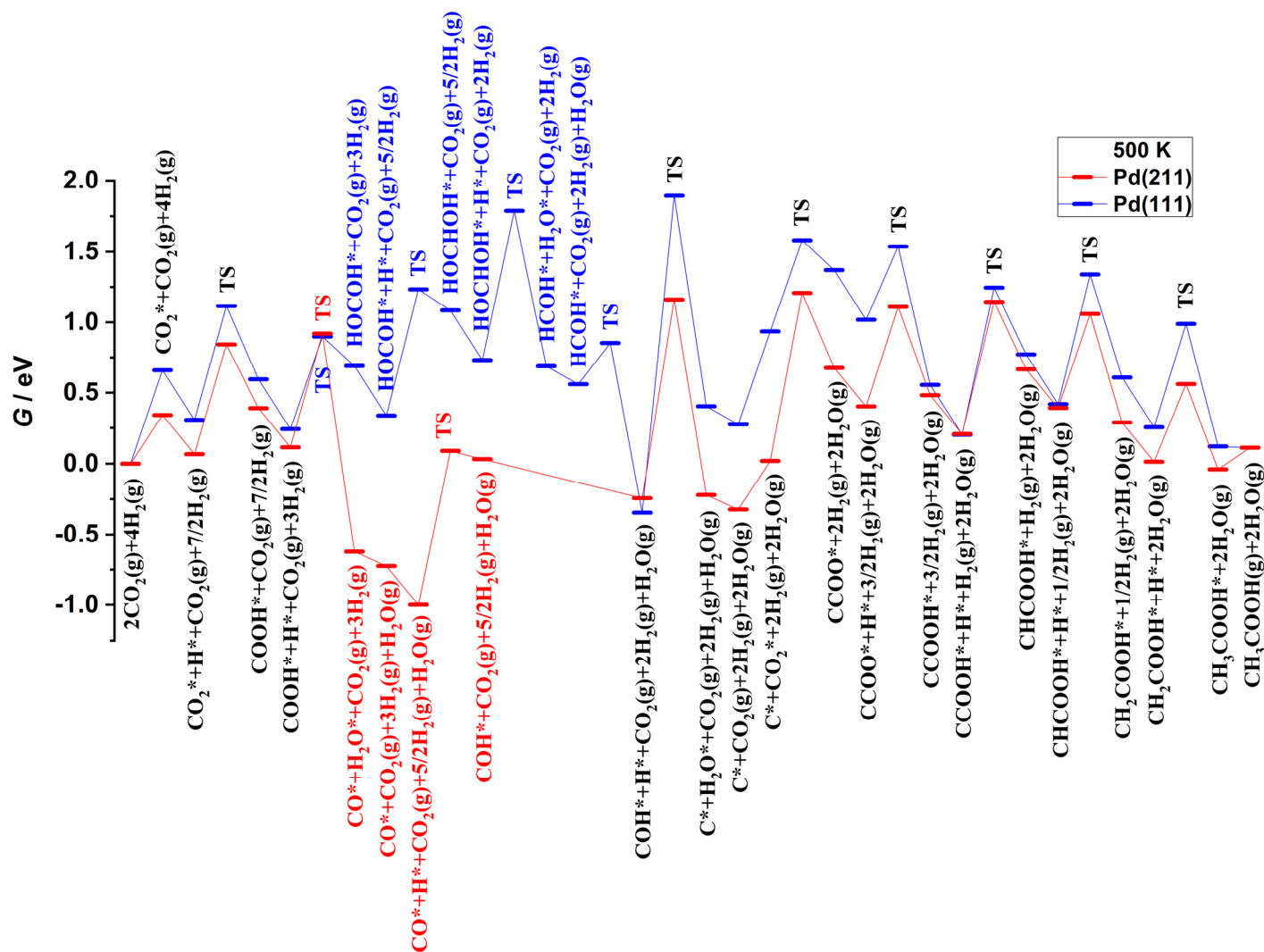


Figure S25. Gibbs free energy profiles of CO₂ hydrogenation to acetic acid on Pd(211) and Pd(111) surfaces according to the most favorable routes predicted by microkinetic simulations (500 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).

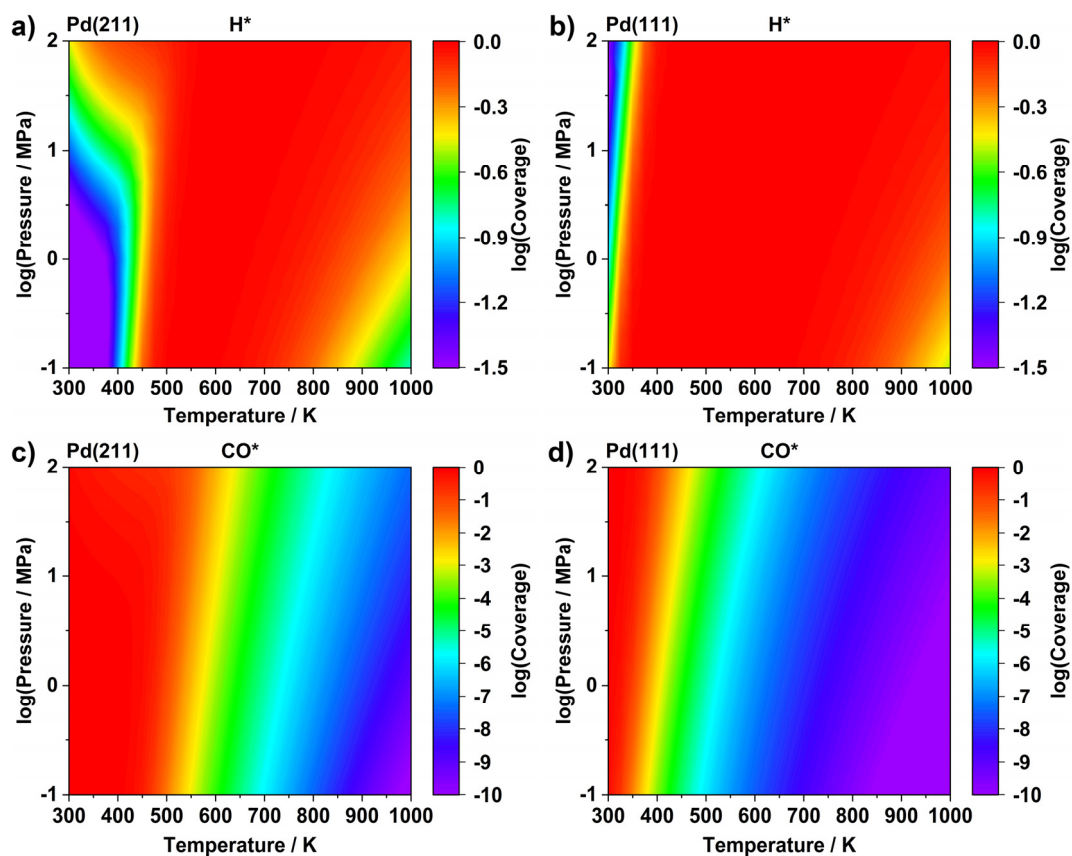


Figure S26. Coverage of H* (a, b) and CO* (c, d) in the hydrogenation of CO₂ to C₁ & C₂ oxygenates and methane on Pd(211) (left) and Pd(111) (right) surfaces predicted by microkinetic simulations (300–1000 K, 0.1–100 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6).

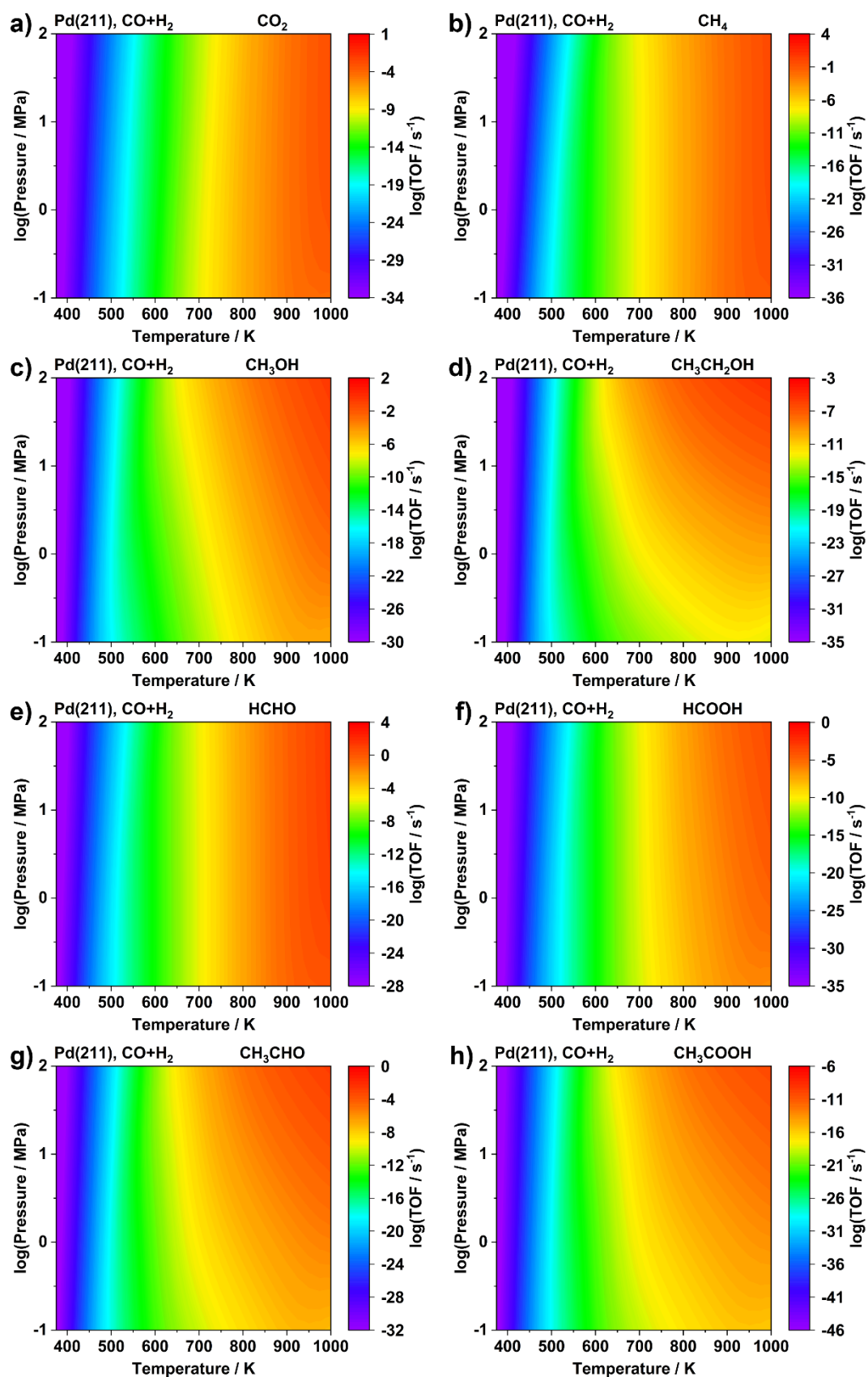


Figure S27. Catalytic activities of CO hydrogenation to different C₁ & C₂ oxygenates and methane on Pd(211) predicted by microkinetic simulations (300–1000 K, 0.1–100 MPa, and CO:H₂ = 1:6).

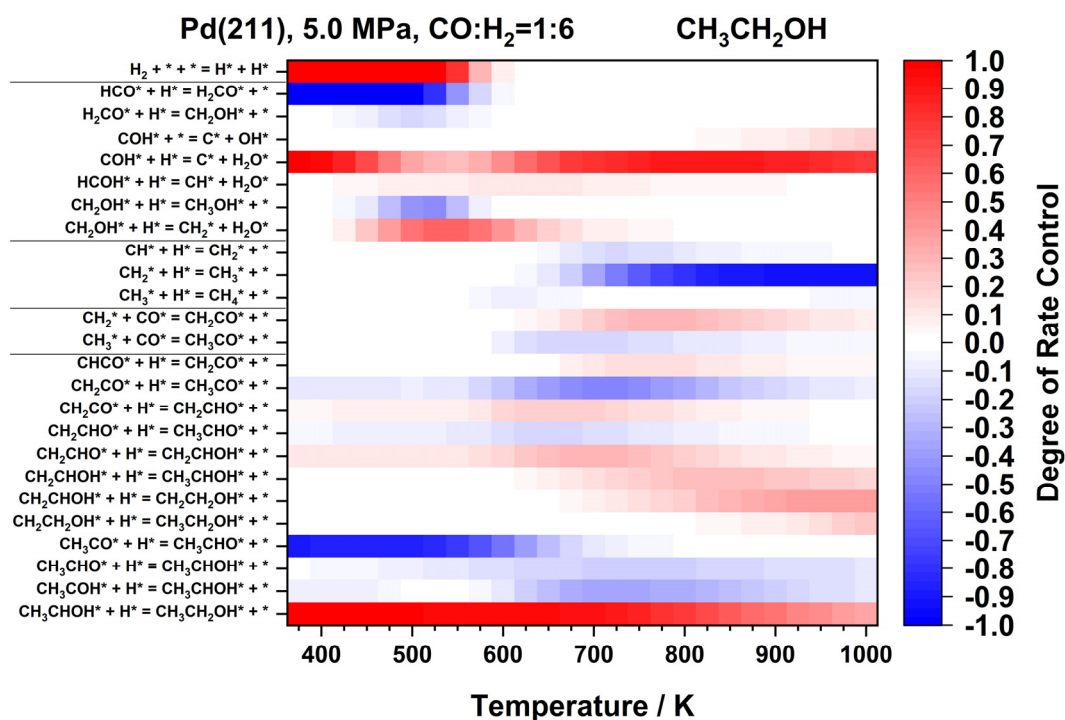


Figure S28. DRC analysis on CO hydrogenation to ethanol on Pd(211) surface based on the reaction network in Scheme 1 for microkinetic simulations. Elementary reaction steps with absolute DRC values higher than 0.05 are listed. Simulation conditions: 300–1000 K, 5.0 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

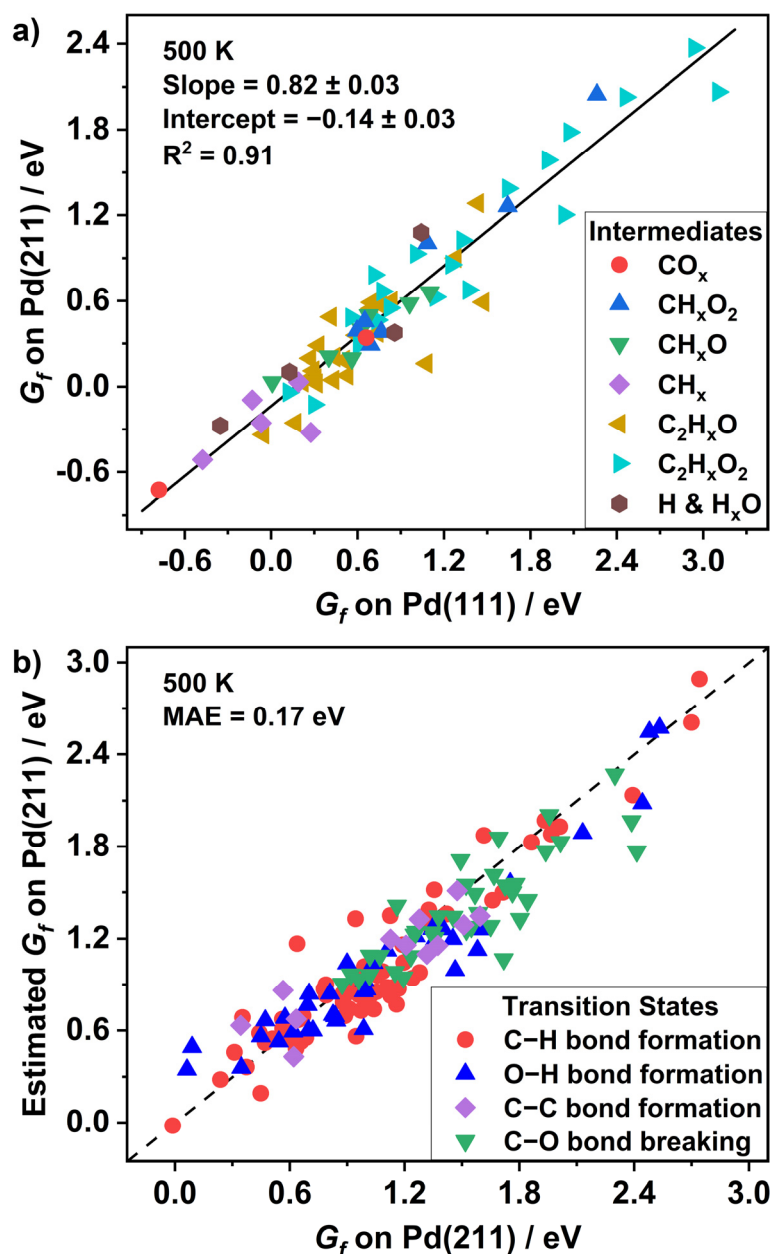


Figure S29. a) Scaling relation between the Gibbs formation energies of intermediates on Pd(211) and Pd(111) at 500 K. The scaling relations at temperatures between 300–1000 K were obtained in a similar way. b) Comparison on the Gibbs formation energies of transition states on Pd(211) at 500 K between the DFT calculated data and the estimated ones. The Gibbs formation energies of transition states on Pd(211) were estimated using the established scaling relation in panel a) and the Gibbs formation energies of transition states on Pd(111) at 500 K.

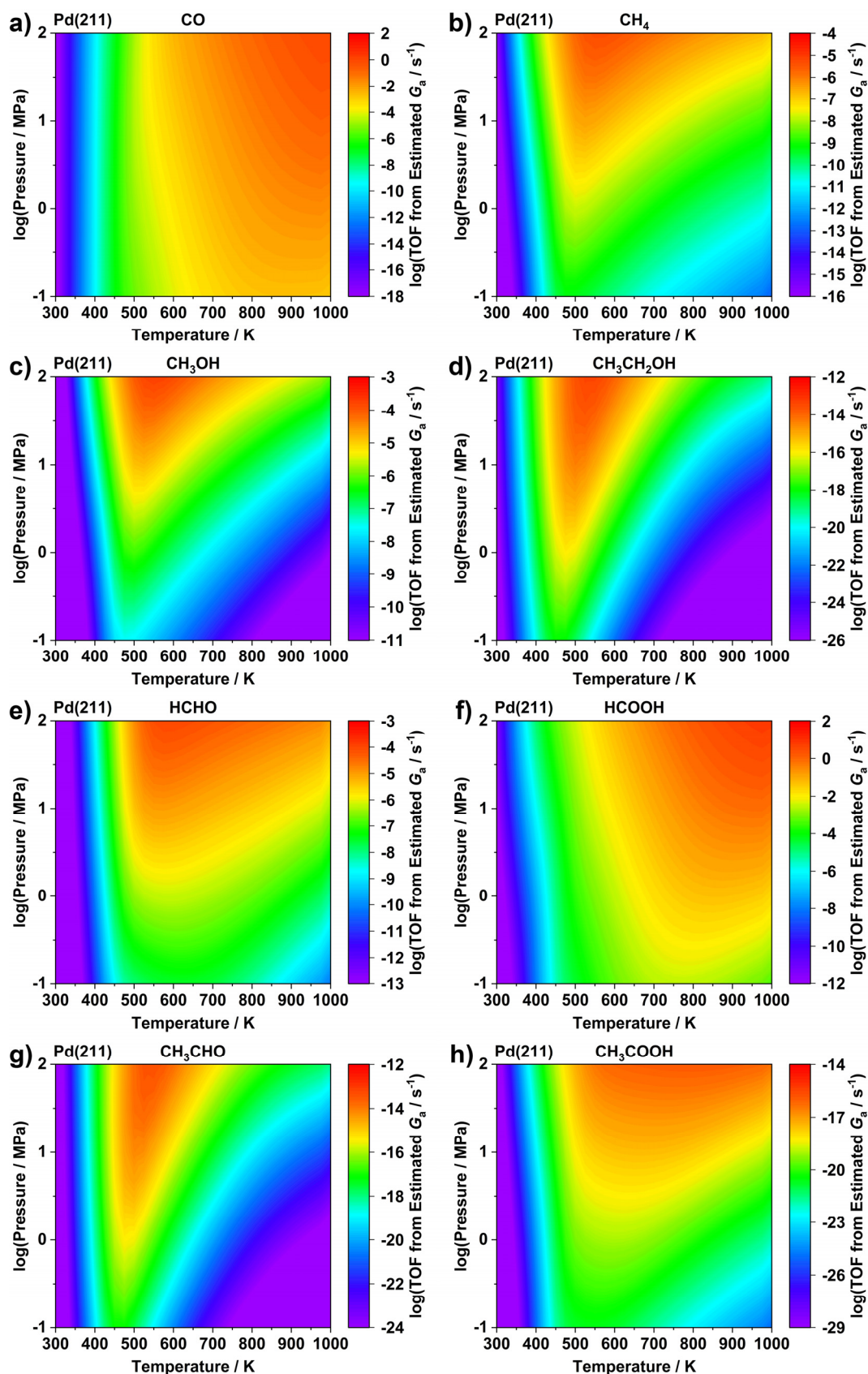


Figure S30. Catalytic activities of CO₂ hydrogenation to CO (a), methane (b), methanol (c), ethanol (d), formic acid (e), formaldehyde (f), acetaldehyde (g), and acetic acid (h) on Pd(211) predicted by microkinetic simulations (300–1000 K, 0.1–100 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6) using DFT calculated intermediate free energies and the estimated transition state free energies.

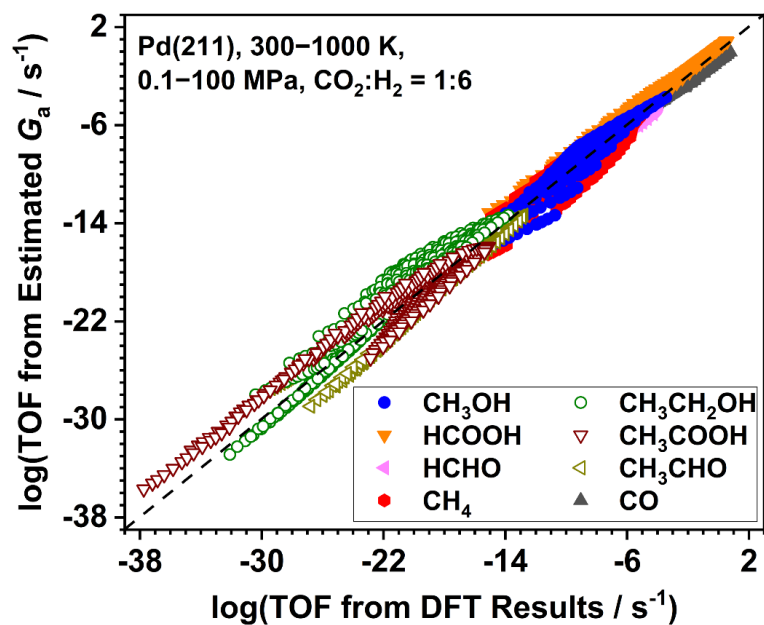


Figure S31. Comparison on the TOFs of CO₂ hydrogenation on Pd(211) between the DFT calculated data and the estimated ones using the scaling relations. Microkinetic simulation conditions: 300–1000 K, 0.1–100 MPa, and CO₂:H₂ = 1:6.

References

- S1. Liang, X. L.; Dong, X.; Lin, G. D.; Zhang, H. B., Carbon Nanotube-Supported Pd-ZnO Catalyst for Hydrogenation of CO₂ to Methanol. *Appl. Catal. B-Environ.* **2009**, *88*, 315–322.
- S2. Kong, H.; Li, H. Y.; Lin, G. D.; Zhang, H. B., Pd-Decorated CNT-Promoted Pd-Ga₂O₃ Catalyst for Hydrogenation of CO₂ to Methanol. *Catal. Lett.* **2011**, *141*, 886–894.
- S3. Wang, J. J.; Lu, S. M.; Li, J.; Li, C., A Remarkable Difference in CO₂ Hydrogenation to Methanol on Pd Nanoparticles Supported inside and Outside of Carbon Nanotubes. *Chem. Commun.* **2015**, *51*, 17615–17618.
- S4. Liao, F. L.; Wu, X. P.; Zheng, J. W.; Li, M. M. J.; Kroner, A.; Zeng, Z. Y.; Hong, X. L.; Yuan, Y. Z.; Gong, X. Q.; Tsang, S. C. E., A Promising Low Pressure Methanol Synthesis Route from CO₂ Hydrogenation over Pd@Zn Core-Shell Catalysts. *Green Chem.* **2017**, *19*, 270–280.
- S5. Hu, B.; Yin, Y. Z.; Liu, G. L.; Chen, S. L.; Hong, X. L.; Tsang, S. C. E., Hydrogen Spillover Enabled Active Cu Sites for Methanol Synthesis from CO₂ Hydrogenation over Pd Doped CuZn Catalysts. *J. Catal.* **2018**, *359*, 17–26.

Configurations of intermediates and transition states in cif format

M1 CO₂* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617

Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165812	0.000567	0.202883
Pd	Pd50	0.165776	0.250575	0.202876
Pd	Pd51	0.165728	0.500645	0.202871
Pd	Pd52	0.165844	0.750668	0.202857
Pd	Pd53	0.665735	0.999950	0.202948
Pd	Pd54	0.665345	0.249912	0.203043
Pd	Pd55	0.665446	0.499864	0.202934
Pd	Pd56	0.665163	0.750098	0.203070
Pd	Pd57	0.330908	0.125992	0.236151
Pd	Pd58	0.330704	0.375658	0.236135
Pd	Pd59	0.330808	0.625533	0.236044
Pd	Pd60	0.330886	0.875600	0.236117
Pd	Pd61	0.830318	0.125154	0.236227
Pd	Pd62	0.830467	0.374957	0.235979
Pd	Pd63	0.830610	0.625162	0.235869
Pd	Pd64	0.830228	0.875037	0.236200
Pd	Pd65	0.998585	0.000343	0.268395
Pd	Pd66	0.998778	0.250453	0.268448
Pd	Pd67	0.998941	0.500318	0.268485
Pd	Pd68	0.998714	0.750411	0.268382
Pd	Pd69	0.499032	0.000578	0.268306
Pd	Pd70	0.499085	0.251144	0.269250
Pd	Pd71	0.499219	0.499724	0.269360
Pd	Pd72	0.498588	0.748508	0.270152
Pd	Pd73	0.164505	0.126088	0.307568
Pd	Pd74	0.165064	0.376274	0.307768
Pd	Pd75	0.164629	0.626431	0.307635
Pd	Pd76	0.164551	0.876414	0.307613
Pd	Pd77	0.665137	0.124995	0.308072
Pd	Pd78	0.665442	0.374952	0.307855
Pd	Pd79	0.665971	0.625029	0.307214
Pd	Pd80	0.665176	0.875480	0.308057
Pd	Pd81	0.830080	0.750157	0.338289
Pd	Pd82	0.329549	0.002357	0.338100
Pd	Pd83	0.329687	0.252077	0.338177
Pd	Pd84	0.330007	0.502048	0.337667
Pd	Pd85	0.329159	0.752366	0.338017
Pd	Pd86	0.830121	0.000148	0.338440
Pd	Pd87	0.830025	0.250213	0.338336
Pd	Pd88	0.830267	0.500083	0.338087
Pd	Pd89	0.996909	0.125320	0.368424
Pd	Pd90	0.997146	0.375232	0.368434
Pd	Pd91	0.997127	0.625459	0.368472
Pd	Pd92	0.996897	0.875352	0.368429
Pd	Pd93	0.496889	0.126892	0.368526
Pd	Pd94	0.497819	0.378132	0.371532
Pd	Pd95	0.498924	0.632061	0.369594
Pd	Pd96	0.496543	0.879653	0.368469
C	C97	0.505542	0.447983	0.451765
O	O98	0.505881	0.561801	0.455139
O	O99	0.508779	0.358231	0.482186

M2 HCOO* on Pd(211)
data_

_cell_length_a	13.456032		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	23.511980		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617

Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165767	0.999996	0.202917
Pd	Pd50	0.165786	0.249952	0.202889
Pd	Pd51	0.165761	0.500001	0.202858
Pd	Pd52	0.165788	0.750053	0.202890
Pd	Pd53	0.665760	0.000003	0.202874
Pd	Pd54	0.665209	0.249962	0.203044
Pd	Pd55	0.665289	0.500001	0.202896
Pd	Pd56	0.665206	0.750038	0.203045
Pd	Pd57	0.330886	0.125066	0.236104
Pd	Pd58	0.330559	0.375001	0.236048
Pd	Pd59	0.330558	0.624997	0.236049
Pd	Pd60	0.330895	0.874929	0.236105
Pd	Pd61	0.830423	0.125015	0.236179
Pd	Pd62	0.830635	0.374934	0.235898
Pd	Pd63	0.830634	0.625073	0.235900
Pd	Pd64	0.830426	0.874985	0.236176
Pd	Pd65	0.998811	0.000006	0.268467
Pd	Pd66	0.998823	0.250145	0.268437
Pd	Pd67	0.998894	0.500001	0.268448
Pd	Pd68	0.998824	0.749867	0.268434
Pd	Pd69	0.498941	0.000003	0.268098
Pd	Pd70	0.498573	0.252120	0.269718
Pd	Pd71	0.499268	0.500004	0.269425
Pd	Pd72	0.498575	0.747878	0.269719
Pd	Pd73	0.164344	0.125242	0.307554
Pd	Pd74	0.164895	0.375451	0.307847
Pd	Pd75	0.164894	0.624557	0.307847
Pd	Pd76	0.164353	0.874773	0.307555
Pd	Pd77	0.665184	0.124671	0.307844
Pd	Pd78	0.666096	0.374884	0.307487
Pd	Pd79	0.666102	0.625123	0.307491
Pd	Pd80	0.665177	0.875330	0.307841
Pd	Pd81	0.830057	0.750208	0.338326
Pd	Pd82	0.328478	0.000020	0.338070
Pd	Pd83	0.328588	0.249302	0.338107
Pd	Pd84	0.330854	0.500007	0.337645
Pd	Pd85	0.328590	0.750712	0.338105
Pd	Pd86	0.830147	0.999990	0.338412
Pd	Pd87	0.830057	0.249773	0.338328
Pd	Pd88	0.830035	0.499999	0.338203
Pd	Pd89	0.996778	0.125084	0.368437
Pd	Pd90	0.996805	0.374988	0.368427
Pd	Pd91	0.996809	0.625004	0.368422
Pd	Pd92	0.996789	0.874912	0.368439
Pd	Pd93	0.496179	0.122678	0.367948
Pd	Pd94	0.498226	0.369814	0.369024
Pd	Pd95	0.498236	0.630213	0.369029
Pd	Pd96	0.496180	0.877339	0.367947
C	C97	0.497321	0.499999	0.480498
O	O98	0.497303	0.395565	0.457431
O	O99	0.497339	0.604419	0.457428
H	H100	0.497529	0.499991	0.527614

M3 H₂COO* on Pd(211)

data_	
_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980

_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd Pd49	0.165676	0.000008	0.202642
Pd Pd50	0.165848	0.249924	0.202631

Pd	Pd51	0.165035	0.500005	0.202830
Pd	Pd52	0.165846	0.750083	0.202628
Pd	Pd53	0.665517	1.000000	0.202974
Pd	Pd54	0.665454	0.250810	0.204213
Pd	Pd55	0.665934	0.499997	0.202576
Pd	Pd56	0.665447	0.749184	0.204215
Pd	Pd57	0.330550	0.125038	0.235996
Pd	Pd58	0.330682	0.375417	0.235959
Pd	Pd59	0.330680	0.624602	0.235957
Pd	Pd60	0.330543	0.874981	0.235994
Pd	Pd61	0.830523	0.125029	0.236189
Pd	Pd62	0.831949	0.375377	0.235834
Pd	Pd63	0.831948	0.624614	0.235832
Pd	Pd64	0.830514	0.874963	0.236191
Pd	Pd65	0.998808	0.000004	0.268270
Pd	Pd66	0.000081	0.250187	0.268507
Pd	Pd67	0.999113	0.500003	0.270294
Pd	Pd68	0.000074	0.749821	0.268506
Pd	Pd69	0.498708	0.000004	0.268246
Pd	Pd70	0.497483	0.249589	0.269274
Pd	Pd71	0.499208	0.500007	0.269298
Pd	Pd72	0.497471	0.750437	0.269277
Pd	Pd73	0.165657	0.124117	0.307319
Pd	Pd74	0.166539	0.374206	0.306973
Pd	Pd75	0.166531	0.625818	0.306967
Pd	Pd76	0.165654	0.875906	0.307320
Pd	Pd77	0.666004	0.122013	0.308763
Pd	Pd78	0.665539	0.368052	0.306121
Pd	Pd79	0.665531	0.631966	0.306114
Pd	Pd80	0.665993	0.878014	0.308767
Pd	Pd81	0.834306	0.751282	0.337886
Pd	Pd82	0.330036	0.000008	0.338460
Pd	Pd83	0.330180	0.249315	0.337848
Pd	Pd84	0.328702	0.500014	0.338321
Pd	Pd85	0.330161	0.750722	0.337849
Pd	Pd86	0.832570	0.000005	0.338624
Pd	Pd87	0.834320	0.248726	0.337889
Pd	Pd88	0.842719	0.500007	0.339988
Pd	Pd89	0.000208	0.124083	0.368638
Pd	Pd90	0.005354	0.372601	0.370014
Pd	Pd91	0.005356	0.627406	0.370014
Pd	Pd92	0.000201	0.875912	0.368635
Pd	Pd93	0.497353	0.122985	0.368761
Pd	Pd94	0.492626	0.368343	0.370338
Pd	Pd95	0.492578	0.631708	0.370336
Pd	Pd96	0.497345	0.877059	0.368765
C	C97	0.655327	0.500174	0.430385
O	O98	0.551943	0.500086	0.426960
O	O99	0.699030	0.500074	0.374725
H	H100	0.680833	0.417221	0.452564
H	H101	0.680754	0.583297	0.452473

M4 COOH* on Pd(211)

```

data
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000

```

```

_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd    Pd1      0.166667      0.000000      0.000000
Pd    Pd2      0.166667      0.250000      0.000000
Pd    Pd3      0.166667      0.500000      0.000000
Pd    Pd4      0.166667      0.750000      0.000000
Pd    Pd5      0.666667      0.000000      0.000000
Pd    Pd6      0.666667      0.250000      0.000000
Pd    Pd7      0.666667      0.500000      0.000000
Pd    Pd8      0.666667      0.750000      0.000000
Pd    Pd9      0.333333      0.125000      0.033723
Pd    Pd10     0.333333      0.375000      0.033723
Pd    Pd11     0.333333      0.625000      0.033723
Pd    Pd12     0.333333      0.875000      0.033723
Pd    Pd13     0.833333      0.125000      0.033723
Pd    Pd14     0.833333      0.375000      0.033723
Pd    Pd15     0.833333      0.625000      0.033723
Pd    Pd16     0.833333      0.875000      0.033723
Pd    Pd17     0.000000      0.000000      0.067447
Pd    Pd18     0.000000      0.250000      0.067447
Pd    Pd19     0.000000      0.500000      0.067447
Pd    Pd20     0.000000      0.750000      0.067447
Pd    Pd21     0.500000      0.000000      0.067447
Pd    Pd22     0.500000      0.250000      0.067447
Pd    Pd23     0.500000      0.500000      0.067447
Pd    Pd24     0.500000      0.750000      0.067447
Pd    Pd25     0.166667      0.125000      0.101170
Pd    Pd26     0.166667      0.375000      0.101170
Pd    Pd27     0.166667      0.625000      0.101170
Pd    Pd28     0.166667      0.875000      0.101170
Pd    Pd29     0.666667      0.125000      0.101170
Pd    Pd30     0.666667      0.375000      0.101170
Pd    Pd31     0.666667      0.625000      0.101170
Pd    Pd32     0.666667      0.875000      0.101170
Pd    Pd33     0.333333      0.000000      0.134894
Pd    Pd34     0.333333      0.250000      0.134894
Pd    Pd35     0.333333      0.500000      0.134894
Pd    Pd36     0.333333      0.750000      0.134894
Pd    Pd37     0.833333      0.000000      0.134894
Pd    Pd38     0.833333      0.250000      0.134894
Pd    Pd39     0.833333      0.500000      0.134894
Pd    Pd40     0.833333      0.750000      0.134894
Pd    Pd41     0.000000      0.125000      0.168617
Pd    Pd42     0.000000      0.375000      0.168617
Pd    Pd43     0.000000      0.625000      0.168617
Pd    Pd44     0.000000      0.875000      0.168617
Pd    Pd45     0.500000      0.125000      0.168617
Pd    Pd46     0.500000      0.375000      0.168617
Pd    Pd47     0.500000      0.625000      0.168617
Pd    Pd48     0.500000      0.875000      0.168617
Pd    Pd49     0.165907      0.999578      0.202893
Pd    Pd50     0.166092      0.249513      0.202887
Pd    Pd51     0.165883      0.499659      0.202869
Pd    Pd52     0.165970      0.749649      0.202892

```


Pd	Pd53	0.665733	0.999779	0.203060
Pd	Pd54	0.665218	0.249803	0.203158
Pd	Pd55	0.665835	0.499996	0.202859
Pd	Pd56	0.665244	0.750013	0.203209
Pd	Pd57	0.331337	0.124389	0.236172
Pd	Pd58	0.331010	0.374604	0.236127
Pd	Pd59	0.330999	0.624528	0.236327
Pd	Pd60	0.331200	0.874149	0.236325
Pd	Pd61	0.830393	0.124804	0.236251
Pd	Pd62	0.831067	0.374731	0.235916
Pd	Pd63	0.830933	0.624947	0.235934
Pd	Pd64	0.830466	0.874841	0.236302
Pd	Pd65	0.998935	0.999716	0.268419
Pd	Pd66	0.999119	0.249606	0.268372
Pd	Pd67	0.999347	0.499676	0.268454
Pd	Pd68	0.999219	0.749606	0.268423
Pd	Pd69	0.499476	0.999496	0.268461
Pd	Pd70	0.499046	0.251278	0.270470
Pd	Pd71	0.499993	0.499249	0.268693
Pd	Pd72	0.499030	0.748134	0.270039
Pd	Pd73	0.165106	0.124120	0.307589
Pd	Pd74	0.165391	0.374066	0.307647
Pd	Pd75	0.165516	0.623900	0.307800
Pd	Pd76	0.164962	0.874294	0.307555
Pd	Pd77	0.665747	0.124286	0.308262
Pd	Pd78	0.666723	0.374652	0.307294
Pd	Pd79	0.666394	0.624559	0.307892
Pd	Pd80	0.665685	0.874916	0.308459
Pd	Pd81	0.830712	0.749701	0.338383
Pd	Pd82	0.329949	0.998393	0.338421
Pd	Pd83	0.330010	0.248069	0.338141
Pd	Pd84	0.330790	0.498243	0.337732
Pd	Pd85	0.329151	0.749170	0.338879
Pd	Pd86	0.830760	0.999677	0.338640
Pd	Pd87	0.830809	0.249508	0.338387
Pd	Pd88	0.830750	0.499650	0.338229
Pd	Pd89	0.997630	0.124528	0.368444
Pd	Pd90	0.997819	0.374434	0.368351
Pd	Pd91	0.997675	0.624630	0.368382
Pd	Pd92	0.997559	0.874493	0.368410
Pd	Pd93	0.497277	0.120757	0.368711
Pd	Pd94	0.499631	0.369668	0.370029
Pd	Pd95	0.497598	0.625644	0.369792
Pd	Pd96	0.496819	0.873479	0.368860
C	C97	0.498677	0.559500	0.446994
O	O98	0.501231	0.447890	0.455948
O	O99	0.498342	0.634991	0.492046
H	H100	0.495755	0.718361	0.477002

M5 HCOOH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_

```

_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165787	0.999911	0.202966
Pd	Pd50	0.165842	0.249922	0.202912
Pd	Pd51	0.165842	0.500080	0.202911
Pd	Pd52	0.165783	0.750093	0.202966
Pd	Pd53	0.665868	0.000024	0.203026
Pd	Pd54	0.665551	0.249902	0.203069
Pd	Pd55	0.665550	0.500100	0.203069

Pd	Pd56	0.665867	0.749976	0.203024
Pd	Pd57	0.330771	0.125043	0.236140
Pd	Pd58	0.330606	0.374999	0.235965
Pd	Pd59	0.330768	0.624954	0.236139
Pd	Pd60	0.330798	0.874996	0.236202
Pd	Pd61	0.830668	0.125042	0.236202
Pd	Pd62	0.830928	0.375000	0.236052
Pd	Pd63	0.830666	0.624958	0.236200
Pd	Pd64	0.830623	0.875001	0.236317
Pd	Pd65	0.999025	0.000041	0.268452
Pd	Pd66	0.999394	0.250045	0.268501
Pd	Pd67	0.999394	0.499961	0.268501
Pd	Pd68	0.999025	0.749967	0.268454
Pd	Pd69	0.499337	0.000191	0.268294
Pd	Pd70	0.499067	0.251334	0.269336
Pd	Pd71	0.499067	0.498663	0.269336
Pd	Pd72	0.499337	0.749809	0.268293
Pd	Pd73	0.164922	0.124887	0.307878
Pd	Pd74	0.165534	0.374999	0.307881
Pd	Pd75	0.164929	0.625114	0.307881
Pd	Pd76	0.165011	0.875000	0.307987
Pd	Pd77	0.665668	0.125052	0.308209
Pd	Pd78	0.666360	0.375000	0.307813
Pd	Pd79	0.665666	0.624950	0.308208
Pd	Pd80	0.665194	0.875004	0.308285
Pd	Pd81	0.830345	0.750039	0.338479
Pd	Pd82	0.329785	0.999996	0.338275
Pd	Pd83	0.330433	0.249974	0.337880
Pd	Pd84	0.330434	0.500025	0.337881
Pd	Pd85	0.329786	0.750000	0.338276
Pd	Pd86	0.830343	0.999965	0.338482
Pd	Pd87	0.830998	0.249804	0.338344
Pd	Pd88	0.830998	0.500195	0.338340
Pd	Pd89	0.997226	0.124834	0.368521
Pd	Pd90	0.997648	0.375001	0.368507
Pd	Pd91	0.997225	0.625167	0.368521
Pd	Pd92	0.997071	0.875000	0.368437
Pd	Pd93	0.496824	0.122931	0.367927
Pd	Pd94	0.500322	0.374996	0.370064
Pd	Pd95	0.496828	0.627064	0.367924
Pd	Pd96	0.496734	0.874998	0.368286
C	C97	0.612032	0.375088	0.480895
O	O98	0.526673	0.375002	0.461089
O	O99	0.696197	0.375171	0.452499
H	H100	0.623832	0.375097	0.527266
H	H101	0.684335	0.375162	0.409814

M6 H₂COOH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha    90.000000
_cell_angle_beta     90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label

```

_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000	
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000	
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000	
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000	
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723	
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723	
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723	
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723	
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723	
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723	
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723	
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447	
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447	
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447	
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447	
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447	
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170	
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170	
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170	
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170	
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170	
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170	
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170	
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170	
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894	
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894	
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894	
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894	
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894	
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894	
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894	
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894	
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617	
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617	
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617	
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617	
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617	
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617	
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617	
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617	
Pd	Pd49	0.165775	0.999863	0.202870	
Pd	Pd50	0.165943	0.249775	0.202776	
Pd	Pd51	0.165789	0.499947	0.202768	
Pd	Pd52	0.166014	0.750059	0.202804	
Pd	Pd53	0.665803	0.000011	0.203065	
Pd	Pd54	0.665326	0.249870	0.203125	
Pd	Pd55	0.666016	0.499979	0.202563	
Pd	Pd56	0.665523	0.750150	0.203049	
Pd	Pd57	0.331116	0.125044	0.236028	

Pd	Pd58	0.330893	0.375324	0.236372
Pd	Pd59	0.330890	0.624549	0.236268
Pd	Pd60	0.331113	0.875008	0.235941
Pd	Pd61	0.830487	0.124967	0.236265
Pd	Pd62	0.830859	0.374751	0.235944
Pd	Pd63	0.831014	0.625131	0.235907
Pd	Pd64	0.830609	0.875014	0.236244
Pd	Pd65	0.998901	0.999893	0.268473
Pd	Pd66	0.998791	0.249849	0.268409
Pd	Pd67	0.998870	0.499935	0.268432
Pd	Pd68	0.999004	0.749971	0.268429
Pd	Pd69	0.499347	0.000091	0.268560
Pd	Pd70	0.499252	0.251356	0.270343
Pd	Pd71	0.500268	0.500203	0.268366
Pd	Pd72	0.499387	0.748909	0.270107
Pd	Pd73	0.164678	0.124279	0.307511
Pd	Pd74	0.164161	0.374070	0.307281
Pd	Pd75	0.164512	0.625077	0.307424
Pd	Pd76	0.164853	0.874850	0.307640
Pd	Pd77	0.665804	0.124665	0.308275
Pd	Pd78	0.666677	0.375039	0.307483
Pd	Pd79	0.666958	0.625133	0.307243
Pd	Pd80	0.665905	0.875527	0.308203
Pd	Pd81	0.830727	0.750258	0.338486
Pd	Pd82	0.329534	0.999560	0.338315
Pd	Pd83	0.328733	0.247693	0.338079
Pd	Pd84	0.328443	0.498636	0.337650
Pd	Pd85	0.329151	0.751536	0.337932
Pd	Pd86	0.830835	0.000011	0.338644
Pd	Pd87	0.830620	0.249751	0.338540
Pd	Pd88	0.830416	0.499993	0.338225
Pd	Pd89	0.997482	0.125067	0.368514
Pd	Pd90	0.997205	0.374966	0.368467
Pd	Pd91	0.997338	0.624967	0.368449
Pd	Pd92	0.997564	0.874892	0.368533
Pd	Pd93	0.496975	0.123240	0.368743
Pd	Pd94	0.496884	0.370437	0.368374
Pd	Pd95	0.497825	0.630793	0.368317
Pd	Pd96	0.497147	0.876815	0.368723
C	C97	0.405963	0.500764	0.469989
O	O98	0.490011	0.500275	0.434767
O	O99	0.313318	0.524030	0.441191
H	H100	0.396620	0.410108	0.489178
H	H101	0.416765	0.570807	0.503091
H	H102	0.306271	0.612245	0.435724

M7 HOCOH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x

```

_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166075	0.999998	0.202960
Pd	Pd50	0.165977	0.249979	0.202965
Pd	Pd51	0.165924	0.500002	0.202942
Pd	Pd52	0.165974	0.750021	0.202965
Pd	Pd53	0.665738	0.999998	0.203051
Pd	Pd54	0.665458	0.249869	0.203061
Pd	Pd55	0.665821	0.500001	0.202930
Pd	Pd56	0.665458	0.750127	0.203060
Pd	Pd57	0.331319	0.125352	0.236306
Pd	Pd58	0.331014	0.375176	0.236254

Pd	Pd59	0.331011	0.624820	0.236254
Pd	Pd60	0.331311	0.874641	0.236311
Pd	Pd61	0.830454	0.124989	0.236358
Pd	Pd62	0.830809	0.374919	0.236141
Pd	Pd63	0.830814	0.625086	0.236142
Pd	Pd64	0.830458	0.875009	0.236361
Pd	Pd65	0.998845	0.000001	0.268392
Pd	Pd66	0.999025	0.250050	0.268432
Pd	Pd67	0.999436	0.499997	0.268543
Pd	Pd68	0.999029	0.749952	0.268433
Pd	Pd69	0.499525	0.999998	0.268562
Pd	Pd70	0.499430	0.251146	0.269603
Pd	Pd71	0.499782	0.500003	0.269245
Pd	Pd72	0.499431	0.748861	0.269604
Pd	Pd73	0.164964	0.124546	0.307625
Pd	Pd74	0.165241	0.374536	0.307862
Pd	Pd75	0.165239	0.625468	0.307864
Pd	Pd76	0.164959	0.875463	0.307628
Pd	Pd77	0.665742	0.124660	0.308388
Pd	Pd78	0.666130	0.374509	0.307847
Pd	Pd79	0.666125	0.625481	0.307848
Pd	Pd80	0.665742	0.875338	0.308388
Pd	Pd81	0.830552	0.749847	0.338636
Pd	Pd82	0.330716	0.999999	0.338358
Pd	Pd83	0.330270	0.250480	0.338404
Pd	Pd84	0.329031	0.500002	0.338543
Pd	Pd85	0.330269	0.749516	0.338403
Pd	Pd86	0.830650	0.000009	0.338641
Pd	Pd87	0.830551	0.250157	0.338637
Pd	Pd88	0.830426	0.500003	0.338527
Pd	Pd89	0.997348	0.125120	0.368400
Pd	Pd90	0.997237	0.375016	0.368457
Pd	Pd91	0.997246	0.624997	0.368462
Pd	Pd92	0.997351	0.874894	0.368404
Pd	Pd93	0.497363	0.125209	0.368533
Pd	Pd94	0.498600	0.375148	0.371172
Pd	Pd95	0.498598	0.624852	0.371174
Pd	Pd96	0.497358	0.874791	0.368533
C	C97	0.536044	0.500002	0.432490
O	O98	0.477147	0.499997	0.479231
O	O99	0.630890	0.499999	0.450147
H	H100	0.408158	0.499996	0.465888
H	H101	0.674190	0.500002	0.415983

M8 HOCHOH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

```

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165871	0.000131	0.203047
Pd	Pd50	0.165837	0.250145	0.203035
Pd	Pd51	0.165921	0.500103	0.202990
Pd	Pd52	0.165935	0.750106	0.203048
Pd	Pd53	0.665888	0.999982	0.203038
Pd	Pd54	0.665538	0.249701	0.202861
Pd	Pd55	0.665570	0.500287	0.202784
Pd	Pd56	0.665817	0.750273	0.202938
Pd	Pd57	0.330972	0.125545	0.236272
Pd	Pd58	0.330987	0.375219	0.236282
Pd	Pd59	0.331010	0.624950	0.236162
Pd	Pd60	0.330864	0.875323	0.236205

Pd	Pd61	0.830597	0.125180	0.236338
Pd	Pd62	0.830500	0.375163	0.236322
Pd	Pd63	0.830782	0.624936	0.236323
Pd	Pd64	0.830697	0.874944	0.236323
Pd	Pd65	0.999066	0.000091	0.268476
Pd	Pd66	0.999209	0.250224	0.268539
Pd	Pd67	0.999246	0.500011	0.268545
Pd	Pd68	0.999174	0.750138	0.268521
Pd	Pd69	0.499456	0.000241	0.268305
Pd	Pd70	0.499292	0.250829	0.269160
Pd	Pd71	0.499522	0.500196	0.269247
Pd	Pd72	0.499296	0.750061	0.268550
Pd	Pd73	0.165121	0.125151	0.307900
Pd	Pd74	0.165858	0.375342	0.308088
Pd	Pd75	0.165266	0.625406	0.307915
Pd	Pd76	0.165516	0.875210	0.308073
Pd	Pd77	0.665709	0.124733	0.308349
Pd	Pd78	0.665724	0.375181	0.306924
Pd	Pd79	0.666031	0.625944	0.307650
Pd	Pd80	0.665549	0.875297	0.308353
Pd	Pd81	0.830478	0.750065	0.338731
Pd	Pd82	0.330293	0.000941	0.338350
Pd	Pd83	0.330952	0.251210	0.338686
Pd	Pd84	0.331322	0.499984	0.338337
Pd	Pd85	0.330798	0.750025	0.338122
Pd	Pd86	0.830636	0.000152	0.338582
Pd	Pd87	0.830156	0.250387	0.338700
Pd	Pd88	0.830021	0.500073	0.339089
Pd	Pd89	0.997126	0.125293	0.368464
Pd	Pd90	0.997107	0.375239	0.368414
Pd	Pd91	0.997098	0.624996	0.368459
Pd	Pd92	0.997380	0.875188	0.368455
Pd	Pd93	0.496830	0.124772	0.368334
Pd	Pd94	0.502495	0.375732	0.371623
Pd	Pd95	0.497987	0.627915	0.368906
Pd	Pd96	0.497244	0.876601	0.368487
C	C97	0.589854	0.386451	0.443327
O	O98	0.525989	0.374162	0.488334
O	O99	0.634919	0.497166	0.447048
H	H100	0.639955	0.308409	0.435094
H	H101	0.498374	0.291822	0.487302
H	H102	0.682507	0.504558	0.414800

M9 CO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032

_cell_length_b 10.986804

_cell_length_c 23.511980

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000

Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165918	0.999827	0.202813
Pd	Pd50	0.165919	0.250155	0.202820
Pd	Pd51	0.165705	0.500552	0.203398
Pd	Pd52	0.165706	0.749424	0.203406
Pd	Pd53	0.665581	0.000217	0.202854
Pd	Pd54	0.665589	0.249818	0.202847
Pd	Pd55	0.665837	0.499917	0.202622
Pd	Pd56	0.665835	0.750118	0.202629
Pd	Pd57	0.330537	0.124993	0.236130
Pd	Pd58	0.330493	0.375923	0.236796
Pd	Pd59	0.330497	0.624994	0.237095
Pd	Pd60	0.330486	0.874084	0.236807
Pd	Pd61	0.830242	0.125026	0.236020

Pd	Pd62	0.830259	0.374864	0.235947
Pd	Pd63	0.830675	0.625029	0.235958
Pd	Pd64	0.830264	0.875174	0.235951
Pd	Pd65	0.998402	0.000164	0.268206
Pd	Pd66	0.998396	0.249859	0.268204
Pd	Pd67	0.998646	0.500059	0.268569
Pd	Pd68	0.998653	0.749998	0.268573
Pd	Pd69	0.498978	0.000074	0.268330
Pd	Pd70	0.498984	0.249969	0.268326
Pd	Pd71	0.498589	0.499903	0.268749
Pd	Pd72	0.498578	0.750128	0.268751
Pd	Pd73	0.165147	0.125002	0.308057
Pd	Pd74	0.164229	0.372614	0.307298
Pd	Pd75	0.162624	0.625010	0.310529
Pd	Pd76	0.164244	0.877398	0.307302
Pd	Pd77	0.665014	0.125066	0.307967
Pd	Pd78	0.665014	0.374740	0.307488
Pd	Pd79	0.665596	0.625037	0.306882
Pd	Pd80	0.664998	0.875358	0.307485
Pd	Pd81	0.829166	0.750536	0.337943
Pd	Pd82	0.330485	0.999784	0.338066
Pd	Pd83	0.330475	0.250240	0.338039
Pd	Pd84	0.330277	0.498985	0.342399
Pd	Pd85	0.330290	0.751003	0.342398
Pd	Pd86	0.829609	0.000197	0.338173
Pd	Pd87	0.829624	0.249900	0.338179
Pd	Pd88	0.829183	0.499571	0.337938
Pd	Pd89	0.996531	0.125033	0.368148
Pd	Pd90	0.996207	0.374406	0.368255
Pd	Pd91	0.992810	0.625068	0.369301
Pd	Pd92	0.996203	0.875687	0.368261
Pd	Pd93	0.496986	0.125029	0.368198
Pd	Pd94	0.498602	0.373989	0.368595
Pd	Pd95	0.501996	0.624981	0.368448
Pd	Pd96	0.498594	0.876006	0.368594
C	C97	0.246045	0.625005	0.384548
O	O98	0.217589	0.624971	0.432788

M10 HCO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032

_cell_length_b 10.986804

_cell_length_c 23.511980

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000

Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165508	0.000001	0.202972
Pd	Pd50	0.165360	0.249937	0.203000
Pd	Pd51	0.165171	0.500001	0.203021
Pd	Pd52	0.165362	0.750066	0.202999
Pd	Pd53	0.665253	0.000001	0.202981
Pd	Pd54	0.664906	0.249729	0.203016
Pd	Pd55	0.664899	0.500000	0.202986
Pd	Pd56	0.664906	0.750273	0.203016
Pd	Pd57	0.330248	0.125216	0.236202
Pd	Pd58	0.330079	0.375107	0.236069
Pd	Pd59	0.330079	0.624892	0.236069
Pd	Pd60	0.330249	0.874780	0.236203
Pd	Pd61	0.829585	0.124986	0.236220
Pd	Pd62	0.829853	0.375002	0.235906
Pd	Pd63	0.829853	0.624998	0.235905
Pd	Pd64	0.829584	0.875017	0.236220
Pd	Pd65	0.997565	0.000001	0.268361
Pd	Pd66	0.997679	0.249993	0.268397

Pd	Pd67	0.997801	0.500001	0.268514
Pd	Pd68	0.997679	0.750008	0.268397
Pd	Pd69	0.498075	1.000000	0.268324
Pd	Pd70	0.497904	0.251034	0.269293
Pd	Pd71	0.498006	0.500000	0.269425
Pd	Pd72	0.497907	0.748967	0.269292
Pd	Pd73	0.163208	0.124698	0.307695
Pd	Pd74	0.163316	0.374663	0.307808
Pd	Pd75	0.163315	0.625344	0.307808
Pd	Pd76	0.163205	0.875308	0.307693
Pd	Pd77	0.663545	0.124586	0.308247
Pd	Pd78	0.663996	0.374396	0.307364
Pd	Pd79	0.663991	0.625609	0.307364
Pd	Pd80	0.663546	0.875418	0.308247
Pd	Pd81	0.828253	0.749985	0.338176
Pd	Pd82	0.328475	0.000004	0.338187
Pd	Pd83	0.328562	0.250906	0.338259
Pd	Pd84	0.328001	0.500002	0.337628
Pd	Pd85	0.328561	0.749097	0.338259
Pd	Pd86	0.828247	0.000002	0.338471
Pd	Pd87	0.828254	0.250015	0.338177
Pd	Pd88	0.827907	0.500002	0.338061
Pd	Pd89	0.994879	0.124988	0.368320
Pd	Pd90	0.994929	0.374960	0.368409
Pd	Pd91	0.994928	0.625045	0.368409
Pd	Pd92	0.994877	0.875013	0.368319
Pd	Pd93	0.494917	0.125197	0.368355
Pd	Pd94	0.497654	0.375778	0.372092
Pd	Pd95	0.497655	0.624225	0.372092
Pd	Pd96	0.494916	0.874805	0.368354
C	C97	0.537337	0.499998	0.433570
O	O98	0.622772	0.499996	0.451598
H	H99	0.470713	0.500018	0.462626

M11 H₂CO* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723

Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166027	0.999881	0.202968
Pd	Pd50	0.166005	0.249699	0.202921
Pd	Pd51	0.165663	0.499881	0.202866
Pd	Pd52	0.165914	0.749993	0.202931
Pd	Pd53	0.665891	0.999956	0.202948
Pd	Pd54	0.665164	0.249831	0.203157
Pd	Pd55	0.665606	0.500027	0.202982
Pd	Pd56	0.665443	0.750090	0.203094
Pd	Pd57	0.331391	0.124975	0.236225
Pd	Pd58	0.330788	0.374917	0.235930
Pd	Pd59	0.330738	0.624750	0.236067
Pd	Pd60	0.331195	0.874533	0.236270
Pd	Pd61	0.830649	0.124930	0.236207
Pd	Pd62	0.830652	0.374807	0.235984
Pd	Pd63	0.830524	0.624947	0.236136
Pd	Pd64	0.830610	0.874870	0.236278
Pd	Pd65	0.999131	0.999828	0.268395
Pd	Pd66	0.999230	0.249815	0.268415
Pd	Pd67	0.999137	0.499778	0.268456
Pd	Pd68	0.999131	0.749728	0.268403
Pd	Pd69	0.499619	0.999856	0.268200
Pd	Pd70	0.499008	0.252025	0.270467

Pd	Pd71	0.499442	0.499730	0.268766
Pd	Pd72	0.499114	0.748564	0.269401
Pd	Pd73	0.165495	0.124510	0.307821
Pd	Pd74	0.165345	0.374446	0.307717
Pd	Pd75	0.165420	0.624623	0.307790
Pd	Pd76	0.165201	0.874763	0.307789
Pd	Pd77	0.665948	0.124486	0.308059
Pd	Pd78	0.665649	0.374892	0.307700
Pd	Pd79	0.665237	0.624858	0.308094
Pd	Pd80	0.665705	0.874939	0.308178
Pd	Pd81	0.830465	0.749684	0.338405
Pd	Pd82	0.330366	0.999016	0.338331
Pd	Pd83	0.330505	0.249443	0.338027
Pd	Pd84	0.330715	0.499308	0.337554
Pd	Pd85	0.330285	0.748966	0.338360
Pd	Pd86	0.830690	0.999747	0.338560
Pd	Pd87	0.830648	0.249843	0.338289
Pd	Pd88	0.830507	0.499767	0.338113
Pd	Pd89	0.997559	0.124691	0.368353
Pd	Pd90	0.997518	0.374634	0.368439
Pd	Pd91	0.997409	0.624810	0.368384
Pd	Pd92	0.997375	0.874630	0.368339
Pd	Pd93	0.497508	0.121699	0.368287
Pd	Pd94	0.499106	0.371809	0.371236
Pd	Pd95	0.498125	0.624085	0.371130
Pd	Pd96	0.497299	0.873905	0.368240
C	C97	0.510792	0.553079	0.453963
O	O98	0.520783	0.434441	0.451904
H	H99	0.438048	0.589374	0.468608
H	H100	0.577708	0.605480	0.466647

M12 H₃CO* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723

Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166001	0.000002	0.202818
Pd	Pd50	0.165990	0.250012	0.202871
Pd	Pd51	0.165960	0.499998	0.202899
Pd	Pd52	0.166000	0.749985	0.202871
Pd	Pd53	0.665835	0.000001	0.203039
Pd	Pd54	0.665510	0.249565	0.202960
Pd	Pd55	0.666083	0.499997	0.202560
Pd	Pd56	0.665512	0.750436	0.202960
Pd	Pd57	0.331345	0.125127	0.236214
Pd	Pd58	0.331229	0.375047	0.236114
Pd	Pd59	0.331234	0.624951	0.236113
Pd	Pd60	0.331344	0.874865	0.236213
Pd	Pd61	0.830651	0.124990	0.236320
Pd	Pd62	0.831055	0.374887	0.236088
Pd	Pd63	0.831052	0.625113	0.236088
Pd	Pd64	0.830652	0.875016	0.236320
Pd	Pd65	0.999090	0.999999	0.268366
Pd	Pd66	0.999373	0.250184	0.268447
Pd	Pd67	0.999547	0.500003	0.268520
Pd	Pd68	0.999371	0.749809	0.268451
Pd	Pd69	0.499496	0.000000	0.268489
Pd	Pd70	0.499256	0.251477	0.270169
Pd	Pd71	0.500551	0.500003	0.268560
Pd	Pd72	0.499258	0.748510	0.270174
Pd	Pd73	0.165453	0.124803	0.307379

Pd	Pd74	0.165838	0.374961	0.307766
Pd	Pd75	0.165833	0.625040	0.307767
Pd	Pd76	0.165454	0.875197	0.307378
Pd	Pd77	0.666260	0.124363	0.308328
Pd	Pd78	0.667174	0.374419	0.307083
Pd	Pd79	0.667170	0.625582	0.307085
Pd	Pd80	0.666267	0.875630	0.308330
Pd	Pd81	0.831199	0.750202	0.338597
Pd	Pd82	0.330159	0.000001	0.338489
Pd	Pd83	0.330242	0.249453	0.338315
Pd	Pd84	0.331174	0.500000	0.337563
Pd	Pd85	0.330251	0.750538	0.338313
Pd	Pd86	0.831381	0.000003	0.338658
Pd	Pd87	0.831196	0.249804	0.338598
Pd	Pd88	0.830786	0.499997	0.338472
Pd	Pd89	0.998256	0.125046	0.368393
Pd	Pd90	0.997903	0.375007	0.368465
Pd	Pd91	0.997904	0.625002	0.368462
Pd	Pd92	0.998256	0.874960	0.368394
Pd	Pd93	0.497777	0.123182	0.368782
Pd	Pd94	0.500005	0.369658	0.369100
Pd	Pd95	0.500014	0.630345	0.369110
Pd	Pd96	0.497779	0.876812	0.368782
C	C97	0.615205	0.499952	0.461424
O	O98	0.522141	0.499993	0.431752
H	H99	0.618755	0.581660	0.488474
H	H100	0.618724	0.418215	0.488465
H	H101	0.679233	0.499946	0.432033

M13 COH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165715	0.999729	0.202814
Pd	Pd50	0.166066	0.249911	0.202590
Pd	Pd51	0.166034	0.500080	0.202583
Pd	Pd52	0.165744	0.750278	0.202817
Pd	Pd53	0.666112	0.000069	0.202913
Pd	Pd54	0.665955	0.250316	0.203330
Pd	Pd55	0.665956	0.499650	0.203329
Pd	Pd56	0.666152	0.749946	0.202919
Pd	Pd57	0.330455	0.124750	0.235981
Pd	Pd58	0.331038	0.375016	0.236080
Pd	Pd59	0.330437	0.625212	0.235988
Pd	Pd60	0.330501	0.875021	0.236080
Pd	Pd61	0.830822	0.126048	0.237225
Pd	Pd62	0.831144	0.374998	0.237079
Pd	Pd63	0.830860	0.623949	0.237216
Pd	Pd64	0.830992	0.874997	0.236321
Pd	Pd65	0.999653	0.999962	0.268447
Pd	Pd66	0.999157	0.250013	0.269055
Pd	Pd67	0.999153	0.499968	0.269052
Pd	Pd68	0.999657	0.750050	0.268446
Pd	Pd69	0.498816	0.999807	0.268343
Pd	Pd70	0.498952	0.249571	0.268599
Pd	Pd71	0.498919	0.500446	0.268631
Pd	Pd72	0.498792	0.750201	0.268324
Pd	Pd73	0.165655	0.124444	0.307434
Pd	Pd74	0.166468	0.374989	0.306779
Pd	Pd75	0.165638	0.625544	0.307420

Pd	Pd76	0.165938	0.875010	0.308069
Pd	Pd77	0.664711	0.122154	0.307498
Pd	Pd78	0.662544	0.375008	0.309927
Pd	Pd79	0.664705	0.627853	0.307492
Pd	Pd80	0.666005	0.874995	0.308171
Pd	Pd81	0.831541	0.749918	0.338321
Pd	Pd82	0.330594	0.999891	0.338304
Pd	Pd83	0.329696	0.249245	0.338175
Pd	Pd84	0.329648	0.500760	0.338212
Pd	Pd85	0.330635	0.750072	0.338287
Pd	Pd86	0.831541	0.000085	0.338329
Pd	Pd87	0.831869	0.248152	0.343573
Pd	Pd88	0.831886	0.501839	0.343586
Pd	Pd89	0.000068	0.123644	0.369025
Pd	Pd90	0.004001	0.374997	0.369133
Pd	Pd91	0.000060	0.626379	0.369022
Pd	Pd92	0.998414	0.874990	0.368333
Pd	Pd93	0.497172	0.124853	0.368695
Pd	Pd94	0.493525	0.375035	0.369152
Pd	Pd95	0.497137	0.625095	0.368666
Pd	Pd96	0.497673	0.874984	0.368329
C	C97	0.748263	0.374993	0.377810
O	O98	0.714173	0.374990	0.430585
H	H99	0.639557	0.375011	0.429132

M14 HCOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol	
_atom_site_label	
_atom_site_fract_x	
_atom_site_fract_y	
_atom_site_fract_z	

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166293	0.000004	0.202892
Pd	Pd50	0.166077	0.249968	0.202938
Pd	Pd51	0.166008	0.500000	0.202892
Pd	Pd52	0.166076	0.750034	0.202938
Pd	Pd53	0.665877	0.000001	0.203007
Pd	Pd54	0.665497	0.249719	0.202998
Pd	Pd55	0.665644	0.500004	0.202919
Pd	Pd56	0.665493	0.750283	0.202999
Pd	Pd57	0.331496	0.125322	0.236379
Pd	Pd58	0.331202	0.375232	0.236310
Pd	Pd59	0.331199	0.624771	0.236310
Pd	Pd60	0.331498	0.874681	0.236379
Pd	Pd61	0.830595	0.125022	0.236330
Pd	Pd62	0.830685	0.375000	0.236180
Pd	Pd63	0.830685	0.624998	0.236179
Pd	Pd64	0.830590	0.874980	0.236330
Pd	Pd65	0.999066	0.999998	0.268342
Pd	Pd66	0.999082	0.250050	0.268424
Pd	Pd67	0.999408	0.499996	0.268496
Pd	Pd68	0.999080	0.749947	0.268424
Pd	Pd69	0.499791	0.000005	0.268625
Pd	Pd70	0.499583	0.251068	0.269644
Pd	Pd71	0.499847	0.500002	0.269413
Pd	Pd72	0.499583	0.748939	0.269642
Pd	Pd73	0.165249	0.124562	0.307564
Pd	Pd74	0.165334	0.374582	0.307693
Pd	Pd75	0.165333	0.625419	0.307690
Pd	Pd76	0.165248	0.875444	0.307562
Pd	Pd77	0.665943	0.124523	0.308362
Pd	Pd78	0.666232	0.374247	0.307736
Pd	Pd79	0.666229	0.625757	0.307735

Pd	Pd80	0.665941	0.875484	0.308361
Pd	Pd81	0.830694	0.749898	0.338626
Pd	Pd82	0.331088	0.000002	0.338427
Pd	Pd83	0.330813	0.250841	0.338499
Pd	Pd84	0.329658	0.500001	0.338492
Pd	Pd85	0.330814	0.749158	0.338496
Pd	Pd86	0.830901	0.999999	0.338631
Pd	Pd87	0.830696	0.250100	0.338626
Pd	Pd88	0.830325	0.499998	0.338651
Pd	Pd89	0.997681	0.125068	0.368291
Pd	Pd90	0.997414	0.375044	0.368397
Pd	Pd91	0.997413	0.624949	0.368397
Pd	Pd92	0.997679	0.874924	0.368290
Pd	Pd93	0.497861	0.125662	0.368696
Pd	Pd94	0.499801	0.375630	0.371908
Pd	Pd95	0.499799	0.624366	0.371911
Pd	Pd96	0.497858	0.874343	0.368694
C	C97	0.542185	0.500001	0.429728
O	O98	0.637234	0.500007	0.447682
H	H99	0.492530	0.500001	0.467252
H	H100	0.682844	0.500017	0.414300

M15 CH₂OH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447

Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165854	0.000012	0.203001
Pd	Pd50	0.165897	0.249895	0.202995
Pd	Pd51	0.165639	0.499930	0.202923
Pd	Pd52	0.165739	0.750026	0.202971
Pd	Pd53	0.665725	0.999785	0.202989
Pd	Pd54	0.665548	0.249376	0.202713
Pd	Pd55	0.665430	0.499817	0.202772
Pd	Pd56	0.665203	0.750142	0.202950
Pd	Pd57	0.330937	0.124818	0.236266
Pd	Pd58	0.330600	0.375235	0.236015
Pd	Pd59	0.330639	0.624751	0.236197
Pd	Pd60	0.330868	0.874499	0.236319
Pd	Pd61	0.830389	0.125010	0.236260
Pd	Pd62	0.830647	0.374932	0.236152
Pd	Pd63	0.830004	0.624725	0.236342
Pd	Pd64	0.830311	0.874725	0.236250
Pd	Pd65	0.998742	0.999975	0.268318
Pd	Pd66	0.999050	0.249923	0.268441
Pd	Pd67	0.998792	0.499880	0.268468
Pd	Pd68	0.998750	0.749782	0.268408
Pd	Pd69	0.499229	0.999485	0.268366
Pd	Pd70	0.498716	0.250541	0.269027
Pd	Pd71	0.498865	0.499396	0.269188
Pd	Pd72	0.498674	0.748630	0.269395
Pd	Pd73	0.165349	0.125088	0.308023
Pd	Pd74	0.165040	0.374629	0.307886
Pd	Pd75	0.165000	0.624981	0.307827
Pd	Pd76	0.164622	0.875449	0.307683
Pd	Pd77	0.665258	0.124483	0.308149
Pd	Pd78	0.665616	0.373766	0.306531
Pd	Pd79	0.664884	0.624670	0.307469
Pd	Pd80	0.665282	0.875098	0.308211
Pd	Pd81	0.829666	0.749464	0.338546
Pd	Pd82	0.330134	0.999272	0.338392

Pd	Pd83	0.331520	0.250977	0.337957
Pd	Pd84	0.330499	0.500084	0.338157
Pd	Pd85	0.330062	0.748887	0.338613
Pd	Pd86	0.830044	0.999813	0.338468
Pd	Pd87	0.829875	0.249910	0.338658
Pd	Pd88	0.829295	0.499613	0.338995
Pd	Pd89	0.996899	0.124746	0.368204
Pd	Pd90	0.996577	0.374885	0.368283
Pd	Pd91	0.996421	0.624737	0.368238
Pd	Pd92	0.996675	0.874771	0.368175
Pd	Pd93	0.497111	0.123097	0.368273
Pd	Pd94	0.499464	0.372184	0.370701
Pd	Pd95	0.500517	0.624541	0.371362
Pd	Pd96	0.496993	0.873884	0.368478
C	C97	0.577413	0.578352	0.442482
O	O98	0.608390	0.455994	0.441462
H	H99	0.523527	0.589748	0.477163
H	H100	0.640112	0.642552	0.443270
H	H101	0.668207	0.449694	0.416918

M16 CH₃OH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166021	0.000066	0.203055
Pd	Pd50	0.166015	0.250075	0.203012
Pd	Pd51	0.165964	0.500033	0.203027
Pd	Pd52	0.165997	0.750067	0.203065
Pd	Pd53	0.666022	0.999927	0.203062
Pd	Pd54	0.665892	0.249565	0.202745
Pd	Pd55	0.665885	0.500334	0.202691
Pd	Pd56	0.666009	0.750249	0.202959
Pd	Pd57	0.331135	0.125310	0.236246
Pd	Pd58	0.331053	0.375065	0.235964
Pd	Pd59	0.331071	0.624930	0.236248
Pd	Pd60	0.331012	0.875104	0.236236
Pd	Pd61	0.830983	0.125091	0.236385
Pd	Pd62	0.831384	0.374879	0.236105
Pd	Pd63	0.830965	0.624936	0.236242
Pd	Pd64	0.830947	0.875046	0.236393
Pd	Pd65	0.999544	0.000000	0.268526
Pd	Pd66	0.999856	0.250059	0.268622
Pd	Pd67	0.999948	0.499943	0.268600
Pd	Pd68	0.999516	0.749992	0.268512
Pd	Pd69	0.499791	0.000198	0.268481
Pd	Pd70	0.499541	0.250771	0.269105
Pd	Pd71	0.499389	0.499267	0.269099
Pd	Pd72	0.499717	0.750226	0.268351
Pd	Pd73	0.166053	0.125291	0.308154
Pd	Pd74	0.166500	0.375108	0.308271
Pd	Pd75	0.165942	0.624986	0.308191
Pd	Pd76	0.165839	0.875140	0.308158
Pd	Pd77	0.666128	0.125010	0.308251
Pd	Pd78	0.666041	0.375149	0.305954
Pd	Pd79	0.666012	0.625299	0.307908
Pd	Pd80	0.665910	0.875091	0.308398
Pd	Pd81	0.830941	0.749829	0.338596
Pd	Pd82	0.330888	0.000385	0.338333
Pd	Pd83	0.332353	0.251185	0.338152
Pd	Pd84	0.332231	0.499391	0.338122

Pd	Pd85	0.330676	0.750210	0.338371
Pd	Pd86	0.830949	0.000085	0.338675
Pd	Pd87	0.830642	0.250257	0.338923
Pd	Pd88	0.830952	0.499868	0.338370
Pd	Pd89	0.997715	0.125024	0.368411
Pd	Pd90	0.997781	0.374949	0.368505
Pd	Pd91	0.997678	0.624941	0.368460
Pd	Pd92	0.997800	0.874941	0.368439
Pd	Pd93	0.497788	0.124310	0.368250
Pd	Pd94	0.500667	0.376014	0.371902
Pd	Pd95	0.497457	0.626761	0.368038
Pd	Pd96	0.497704	0.875232	0.368470
C	C97	0.660081	0.473920	0.466739
O	O98	0.622914	0.362888	0.441132
H	H99	0.598121	0.514211	0.490422
H	H100	0.686015	0.538493	0.433978
H	H101	0.721349	0.452434	0.496087
H	H102	0.675479	0.329803	0.416230

M17 C* on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170

Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166042	0.000000	0.202620
Pd	Pd50	0.165755	0.249602	0.202655
Pd	Pd51	0.165781	0.500000	0.202689
Pd	Pd52	0.165755	0.750398	0.202655
Pd	Pd53	0.666128	0.000000	0.203085
Pd	Pd54	0.665258	0.250436	0.203722
Pd	Pd55	0.665817	0.500000	0.202876
Pd	Pd56	0.665258	0.749564	0.203722
Pd	Pd57	0.331123	0.124981	0.236031
Pd	Pd58	0.330641	0.374920	0.236155
Pd	Pd59	0.330641	0.625080	0.236155
Pd	Pd60	0.331123	0.875019	0.236031
Pd	Pd61	0.831029	0.125092	0.236342
Pd	Pd62	0.830751	0.374915	0.236454
Pd	Pd63	0.830751	0.625085	0.236454
Pd	Pd64	0.831029	0.874908	0.236342
Pd	Pd65	0.999597	0.000000	0.268363
Pd	Pd66	0.999639	0.249923	0.268474
Pd	Pd67	0.999945	0.500000	0.268492
Pd	Pd68	0.999639	0.750077	0.268474
Pd	Pd69	0.500066	0.000000	0.268493
Pd	Pd70	0.499118	0.248543	0.269520
Pd	Pd71	0.497229	0.500000	0.270329
Pd	Pd72	0.499118	0.751457	0.269520
Pd	Pd73	0.166000	0.124057	0.307444
Pd	Pd74	0.165659	0.374037	0.307109
Pd	Pd75	0.165659	0.625963	0.307109
Pd	Pd76	0.166000	0.875943	0.307444
Pd	Pd77	0.667105	0.124517	0.308395
Pd	Pd78	0.667893	0.373362	0.310695
Pd	Pd79	0.667893	0.626638	0.310695
Pd	Pd80	0.667105	0.875483	0.308395
Pd	Pd81	0.833847	0.750713	0.339043
Pd	Pd82	0.331994	0.000000	0.338148
Pd	Pd83	0.330795	0.250465	0.338054
Pd	Pd84	0.327276	0.500000	0.339372
Pd	Pd85	0.330795	0.749535	0.338054

Pd	Pd86	0.832507	0.000000	0.338431
Pd	Pd87	0.833847	0.249287	0.339043
Pd	Pd88	0.836548	0.500000	0.338553
Pd	Pd89	0.000738	0.124148	0.368777
Pd	Pd90	0.000933	0.373916	0.368952
Pd	Pd91	0.000933	0.626084	0.368952
Pd	Pd92	0.000738	0.875852	0.368777
Pd	Pd93	0.498741	0.123095	0.369083
Pd	Pd94	0.494213	0.370702	0.375832
Pd	Pd95	0.494213	0.629298	0.375832
Pd	Pd96	0.498741	0.876905	0.369083
C	C97	0.576718	0.500000	0.342232

M18 CH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170

Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165753	0.000000	0.202685
Pd	Pd50	0.165814	0.249842	0.202752
Pd	Pd51	0.165774	0.500000	0.202693
Pd	Pd52	0.165814	0.750158	0.202752
Pd	Pd53	0.665977	0.000000	0.203150
Pd	Pd54	0.665242	0.250629	0.203731
Pd	Pd55	0.665827	0.500000	0.203266
Pd	Pd56	0.665242	0.749371	0.203731
Pd	Pd57	0.330847	0.124864	0.236033
Pd	Pd58	0.330592	0.374849	0.235930
Pd	Pd59	0.330592	0.625151	0.235930
Pd	Pd60	0.330847	0.875136	0.236033
Pd	Pd61	0.830493	0.125078	0.236282
Pd	Pd62	0.830508	0.374977	0.236473
Pd	Pd63	0.830508	0.625023	0.236473
Pd	Pd64	0.830493	0.874922	0.236282
Pd	Pd65	0.998659	0.000000	0.268278
Pd	Pd66	0.999058	0.249971	0.268369
Pd	Pd67	0.000098	0.500000	0.268349
Pd	Pd68	0.999058	0.750029	0.268369
Pd	Pd69	0.499706	0.000000	0.268718
Pd	Pd70	0.499465	0.249724	0.269118
Pd	Pd71	0.497375	0.500000	0.267900
Pd	Pd72	0.499465	0.750276	0.269118
Pd	Pd73	0.164553	0.124031	0.307414
Pd	Pd74	0.165544	0.374167	0.307266
Pd	Pd75	0.165544	0.625833	0.307266
Pd	Pd76	0.164553	0.875969	0.307414
Pd	Pd77	0.666178	0.125317	0.308388
Pd	Pd78	0.666543	0.376441	0.310791
Pd	Pd79	0.666543	0.623559	0.310791
Pd	Pd80	0.666178	0.874683	0.308388
Pd	Pd81	0.832409	0.750541	0.338831
Pd	Pd82	0.330777	0.000000	0.338183
Pd	Pd83	0.330535	0.250427	0.337677
Pd	Pd84	0.328376	0.500000	0.338190
Pd	Pd85	0.330535	0.749573	0.337677
Pd	Pd86	0.830920	0.000000	0.338387
Pd	Pd87	0.832409	0.249459	0.338831
Pd	Pd88	0.836189	0.500000	0.338365
Pd	Pd89	0.998597	0.124262	0.368582
Pd	Pd90	0.999932	0.373864	0.368657
Pd	Pd91	0.999932	0.626136	0.368657

Pd	Pd92	0.998597	0.875738	0.368582
Pd	Pd93	0.497300	0.124637	0.368837
Pd	Pd94	0.497072	0.375758	0.370582
Pd	Pd95	0.497072	0.624242	0.370582
Pd	Pd96	0.497300	0.875363	0.368837
C	C97	0.611126	0.500000	0.369787
H	H98	0.652245	0.500000	0.410704

M19 CH₂* on Pd(211)

data					
_cell_length_a		13.456032			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		23.511980			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'			
loop					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000	
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000	
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000	
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000	
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723	
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723	
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723	
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723	
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723	
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723	
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723	
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447	
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447	
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447	
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447	
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447	
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170	
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170	
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170	
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170	
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170	
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170	
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170	
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170	
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894	
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894	
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894	
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894	

Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166189	0.999998	0.202921
Pd	Pd50	0.165995	0.249893	0.202932
Pd	Pd51	0.165826	0.499999	0.202905
Pd	Pd52	0.165999	0.750113	0.202927
Pd	Pd53	0.665833	0.000001	0.203032
Pd	Pd54	0.665504	0.249833	0.203156
Pd	Pd55	0.665765	0.500009	0.203066
Pd	Pd56	0.665502	0.750170	0.203158
Pd	Pd57	0.331420	0.125145	0.236230
Pd	Pd58	0.331128	0.375067	0.236174
Pd	Pd59	0.331129	0.624935	0.236175
Pd	Pd60	0.331427	0.874849	0.236231
Pd	Pd61	0.830743	0.124927	0.236258
Pd	Pd62	0.830678	0.374886	0.236059
Pd	Pd63	0.830682	0.625121	0.236056
Pd	Pd64	0.830737	0.875072	0.236258
Pd	Pd65	0.999328	0.999999	0.268466
Pd	Pd66	0.999179	0.249928	0.268416
Pd	Pd67	0.999226	0.500005	0.268513
Pd	Pd68	0.999175	0.750068	0.268417
Pd	Pd69	0.499850	0.000001	0.268705
Pd	Pd70	0.499385	0.250994	0.269665
Pd	Pd71	0.499809	0.500001	0.269278
Pd	Pd72	0.499396	0.749014	0.269666
Pd	Pd73	0.165511	0.124649	0.307616
Pd	Pd74	0.165351	0.374679	0.307671
Pd	Pd75	0.165354	0.625314	0.307672
Pd	Pd76	0.165506	0.875344	0.307613
Pd	Pd77	0.666135	0.124643	0.308320
Pd	Pd78	0.666104	0.374666	0.308240
Pd	Pd79	0.666104	0.625338	0.308238
Pd	Pd80	0.666139	0.875362	0.308320
Pd	Pd81	0.831014	0.750014	0.338416
Pd	Pd82	0.331346	0.999996	0.338301
Pd	Pd83	0.330474	0.250067	0.338442
Pd	Pd84	0.329369	0.500002	0.337831
Pd	Pd85	0.330464	0.749936	0.338444
Pd	Pd86	0.831080	0.000001	0.338650
Pd	Pd87	0.831010	0.249992	0.338416
Pd	Pd88	0.830843	0.500005	0.338210
Pd	Pd89	0.997941	0.125099	0.368403
Pd	Pd90	0.997804	0.374967	0.368467
Pd	Pd91	0.997808	0.625038	0.368466
Pd	Pd92	0.997945	0.874912	0.368401
Pd	Pd93	0.498060	0.126047	0.368751
Pd	Pd94	0.498298	0.374382	0.371594
Pd	Pd95	0.498305	0.625624	0.371596
Pd	Pd96	0.498059	0.873956	0.368753

C	C97	0.508602	0.499998	0.431844
H	H98	0.444152	0.500001	0.460761
H	H99	0.581886	0.500002	0.452819

M20 CH₃* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166161	-0.000000	0.202925
Pd	Pd50	0.165937	0.249870	0.202892
Pd	Pd51	0.165894	0.500000	0.202907
Pd	Pd52	0.165937	0.750130	0.202892
Pd	Pd53	0.665849	-0.000000	0.202982
Pd	Pd54	0.665534	0.249953	0.203103
Pd	Pd55	0.665749	0.500000	0.202950
Pd	Pd56	0.665534	0.750047	0.203103
Pd	Pd57	0.331430	0.125188	0.236240
Pd	Pd58	0.331001	0.374890	0.236072
Pd	Pd59	0.331001	0.625110	0.236072
Pd	Pd60	0.331430	0.874812	0.236240
Pd	Pd61	0.830659	0.124934	0.236262
Pd	Pd62	0.830844	0.374876	0.235998
Pd	Pd63	0.830844	0.625124	0.235998
Pd	Pd64	0.830659	0.875066	0.236262
Pd	Pd65	0.999256	-0.000000	0.268370
Pd	Pd66	0.999196	0.250010	0.268414
Pd	Pd67	0.999295	0.500000	0.268532
Pd	Pd68	0.999196	0.749990	0.268414
Pd	Pd69	0.499570	-0.000000	0.268577
Pd	Pd70	0.499526	0.251503	0.269514
Pd	Pd71	0.499577	0.500000	0.269494
Pd	Pd72	0.499526	0.748497	0.269514
Pd	Pd73	0.165309	0.124686	0.307673
Pd	Pd74	0.165116	0.374623	0.307739
Pd	Pd75	0.165116	0.625377	0.307739
Pd	Pd76	0.165309	0.875314	0.307673
Pd	Pd77	0.665628	0.124705	0.308260
Pd	Pd78	0.666321	0.374672	0.307915
Pd	Pd79	0.666321	0.625328	0.307915
Pd	Pd80	0.665628	0.875295	0.308260
Pd	Pd81	0.830731	0.750195	0.338371
Pd	Pd82	0.330532	-0.000000	0.338303
Pd	Pd83	0.330048	0.250087	0.338241
Pd	Pd84	0.328704	0.500000	0.337660
Pd	Pd85	0.330048	0.749913	0.338241
Pd	Pd86	0.830852	-0.000000	0.338484
Pd	Pd87	0.830731	0.249805	0.338371
Pd	Pd88	0.830618	0.500000	0.338143
Pd	Pd89	0.997692	0.125019	0.368371
Pd	Pd90	0.997387	0.374962	0.368479
Pd	Pd91	0.997387	0.625038	0.368479
Pd	Pd92	0.997692	0.874981	0.368371
Pd	Pd93	0.497173	0.125012	0.368472
Pd	Pd94	0.498073	0.375071	0.370332
Pd	Pd95	0.498073	0.624929	0.370332
Pd	Pd96	0.497173	0.874988	0.368472
C	C97	0.517177	0.500000	0.441410
H	H98	0.595893	0.500000	0.453412
H	H99	0.477492	0.420093	0.459839
H	H100	0.477492	0.579907	0.459839

M21 CH₄* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617

Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165651	0.999978	0.202962
Pd	Pd50	0.165788	0.249965	0.202945
Pd	Pd51	0.165790	0.500015	0.202947
Pd	Pd52	0.165659	0.750007	0.202961
Pd	Pd53	0.665776	0.999987	0.202952
Pd	Pd54	0.665621	0.249939	0.202994
Pd	Pd55	0.665621	0.500057	0.202994
Pd	Pd56	0.665779	0.750016	0.202950
Pd	Pd57	0.330620	0.125080	0.236142
Pd	Pd58	0.330553	0.374993	0.236092
Pd	Pd59	0.330623	0.624910	0.236144
Pd	Pd60	0.330376	0.874996	0.236196
Pd	Pd61	0.830548	0.125046	0.236182
Pd	Pd62	0.830882	0.374994	0.236013
Pd	Pd63	0.830552	0.624928	0.236182
Pd	Pd64	0.830437	0.874984	0.236260
Pd	Pd65	0.998809	0.000021	0.268447
Pd	Pd66	0.999121	0.250010	0.268473
Pd	Pd67	0.999128	0.499969	0.268476
Pd	Pd68	0.998817	0.749968	0.268447
Pd	Pd69	0.498943	0.000046	0.268208
Pd	Pd70	0.499083	0.250873	0.268923
Pd	Pd71	0.499082	0.499114	0.268922
Pd	Pd72	0.498950	0.749935	0.268207
Pd	Pd73	0.164860	0.124911	0.307904
Pd	Pd74	0.165268	0.374985	0.307929
Pd	Pd75	0.164873	0.625062	0.307907
Pd	Pd76	0.164799	0.874985	0.307948
Pd	Pd77	0.665258	0.124885	0.307957
Pd	Pd78	0.665786	0.374982	0.307447
Pd	Pd79	0.665261	0.625077	0.307951
Pd	Pd80	0.664937	0.874985	0.308053
Pd	Pd81	0.829994	0.749978	0.338398
Pd	Pd82	0.329609	0.999922	0.338308
Pd	Pd83	0.330083	0.249860	0.338042
Pd	Pd84	0.330088	0.500097	0.338042
Pd	Pd85	0.329618	0.750061	0.338307
Pd	Pd86	0.829992	0.999971	0.338396
Pd	Pd87	0.830211	0.250027	0.338326
Pd	Pd88	0.830220	0.499937	0.338321
Pd	Pd89	0.996830	0.124904	0.368427
Pd	Pd90	0.997154	0.374972	0.368411
Pd	Pd91	0.996842	0.625053	0.368426
Pd	Pd92	0.996744	0.874990	0.368394
Pd	Pd93	0.496630	0.123053	0.367899
Pd	Pd94	0.498811	0.374965	0.369518
Pd	Pd95	0.496638	0.626914	0.367899
Pd	Pd96	0.496561	0.874980	0.368193
C	C97	0.499885	0.375050	0.480569
H	H98	0.498399	0.290145	0.454626
H	H99	0.498309	0.459525	0.454318
H	H100	0.433606	0.375255	0.507558
H	H101	0.568599	0.375331	0.505480

M22 CCO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617

Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165878	0.999999	0.202820
Pd	Pd50	0.165752	0.249960	0.202864
Pd	Pd51	0.165268	0.499998	0.202941
Pd	Pd52	0.165749	0.750038	0.202864
Pd	Pd53	0.666119	0.000000	0.202920
Pd	Pd54	0.665596	0.249901	0.203145
Pd	Pd55	0.665655	0.500000	0.202400
Pd	Pd56	0.665595	0.750100	0.203144
Pd	Pd57	0.330715	0.125032	0.236204
Pd	Pd58	0.330259	0.375200	0.236046
Pd	Pd59	0.330256	0.624797	0.236045
Pd	Pd60	0.330714	0.874968	0.236203
Pd	Pd61	0.830926	0.125197	0.236228
Pd	Pd62	0.831240	0.375727	0.237061
Pd	Pd63	0.831239	0.624275	0.237061
Pd	Pd64	0.830925	0.874804	0.236228
Pd	Pd65	0.999460	0.999999	0.268394
Pd	Pd66	0.999495	0.249770	0.268567
Pd	Pd67	0.996742	0.499999	0.269695
Pd	Pd68	0.999494	0.750227	0.268567
Pd	Pd69	0.499109	1.000000	0.268403
Pd	Pd70	0.498349	0.250146	0.269102
Pd	Pd71	0.497625	0.500000	0.269054
Pd	Pd72	0.498347	0.749854	0.269100
Pd	Pd73	0.165352	0.124512	0.307584
Pd	Pd74	0.165071	0.374986	0.307645
Pd	Pd75	0.165066	0.625008	0.307646
Pd	Pd76	0.165349	0.875481	0.307583
Pd	Pd77	0.666136	0.123281	0.308090
Pd	Pd78	0.665094	0.369746	0.306625
Pd	Pd79	0.665092	0.630251	0.306626
Pd	Pd80	0.666136	0.876715	0.308091
Pd	Pd81	0.832812	0.752513	0.338884
Pd	Pd82	0.330830	0.999996	0.338444
Pd	Pd83	0.331265	0.251202	0.338093
Pd	Pd84	0.330402	0.499998	0.338341
Pd	Pd85	0.331261	0.748792	0.338089
Pd	Pd86	0.831870	1.000000	0.338153
Pd	Pd87	0.832813	0.247484	0.338885
Pd	Pd88	0.826107	0.500000	0.347897
Pd	Pd89	0.999445	0.124299	0.368768
Pd	Pd90	0.997834	0.374724	0.368645
Pd	Pd91	0.997832	0.625275	0.368645
Pd	Pd92	0.999442	0.875699	0.368768
Pd	Pd93	0.497920	0.124447	0.368613
Pd	Pd94	0.499724	0.375644	0.372331
Pd	Pd95	0.499726	0.624355	0.372330
Pd	Pd96	0.497918	0.875546	0.368611
C	C97	0.681085	0.499999	0.363800
C	C98	0.604971	0.499997	0.408825
O	O99	0.606666	0.499997	0.460932

M23 CHCO* on Pd(211)

data_
 _cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804

_cell_length_c	23.511980		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd Pd49	0.165910	0.000001	0.202641

Pd	Pd50	0.165966	0.249627	0.202568
Pd	Pd51	0.165399	0.500005	0.202524
Pd	Pd52	0.165952	0.750377	0.202571
Pd	Pd53	0.665857	0.999997	0.203100
Pd	Pd54	0.665351	0.251374	0.204090
Pd	Pd55	0.665158	0.499999	0.204332
Pd	Pd56	0.665347	0.748628	0.204089
Pd	Pd57	0.331305	0.124929	0.236006
Pd	Pd58	0.331209	0.374935	0.235720
Pd	Pd59	0.331208	0.625066	0.235720
Pd	Pd60	0.331300	0.875066	0.236006
Pd	Pd61	0.830633	0.125029	0.236110
Pd	Pd62	0.830486	0.375023	0.236435
Pd	Pd63	0.830493	0.624981	0.236436
Pd	Pd64	0.830632	0.874964	0.236113
Pd	Pd65	0.998886	0.999998	0.268303
Pd	Pd66	0.999686	0.249713	0.268272
Pd	Pd67	0.999303	0.500001	0.269307
Pd	Pd68	0.999693	0.750276	0.268279
Pd	Pd69	0.499966	0.999999	0.268669
Pd	Pd70	0.500149	0.250508	0.269246
Pd	Pd71	0.498831	0.500003	0.269713
Pd	Pd72	0.500154	0.749504	0.269252
Pd	Pd73	0.165098	0.123702	0.307096
Pd	Pd74	0.166515	0.373748	0.306425
Pd	Pd75	0.166517	0.626236	0.306429
Pd	Pd76	0.165095	0.876285	0.307103
Pd	Pd77	0.666660	0.125470	0.308320
Pd	Pd78	0.666556	0.376585	0.313258
Pd	Pd79	0.666560	0.623431	0.313258
Pd	Pd80	0.666663	0.874537	0.308331
Pd	Pd81	0.834629	0.751942	0.338134
Pd	Pd82	0.331137	0.999991	0.338178
Pd	Pd83	0.330482	0.249882	0.337480
Pd	Pd84	0.327530	0.499990	0.337456
Pd	Pd85	0.330477	0.750109	0.337485
Pd	Pd86	0.831846	0.000000	0.338309
Pd	Pd87	0.834618	0.248064	0.338126
Pd	Pd88	0.842915	0.500001	0.339336
Pd	Pd89	0.000303	0.123562	0.368916
Pd	Pd90	0.005126	0.371866	0.369280
Pd	Pd91	0.005132	0.628135	0.369289
Pd	Pd92	0.000315	0.876442	0.368923
Pd	Pd93	0.497976	0.124682	0.368752
Pd	Pd94	0.492524	0.371790	0.372412
Pd	Pd95	0.492527	0.628199	0.372414
Pd	Pd96	0.497970	0.875323	0.368761
C	C97	0.574259	0.500002	0.410065
C	C98	0.671653	0.499999	0.384344
O	O99	0.752865	0.500002	0.412319
H	H100	0.571507	0.500004	0.456983

M24 CH₂CO* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000

```

```

_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd    Pd1      0.166667      0.000000      0.000000
Pd    Pd2      0.166667      0.250000      0.000000
Pd    Pd3      0.166667      0.500000      0.000000
Pd    Pd4      0.166667      0.750000      0.000000
Pd    Pd5      0.666667      0.000000      0.000000
Pd    Pd6      0.666667      0.250000      0.000000
Pd    Pd7      0.666667      0.500000      0.000000
Pd    Pd8      0.666667      0.750000      0.000000
Pd    Pd9      0.333333      0.125000      0.033723
Pd    Pd10     0.333333      0.375000      0.033723
Pd    Pd11     0.333333      0.625000      0.033723
Pd    Pd12     0.333333      0.875000      0.033723
Pd    Pd13     0.833333      0.125000      0.033723
Pd    Pd14     0.833333      0.375000      0.033723
Pd    Pd15     0.833333      0.625000      0.033723
Pd    Pd16     0.833333      0.875000      0.033723
Pd    Pd17     0.000000      0.000000      0.067447
Pd    Pd18     0.000000      0.250000      0.067447
Pd    Pd19     0.000000      0.500000      0.067447
Pd    Pd20     0.000000      0.750000      0.067447
Pd    Pd21     0.500000      0.000000      0.067447
Pd    Pd22     0.500000      0.250000      0.067447
Pd    Pd23     0.500000      0.500000      0.067447
Pd    Pd24     0.500000      0.750000      0.067447
Pd    Pd25     0.166667      0.125000      0.101170
Pd    Pd26     0.166667      0.375000      0.101170
Pd    Pd27     0.166667      0.625000      0.101170
Pd    Pd28     0.166667      0.875000      0.101170
Pd    Pd29     0.666667      0.125000      0.101170
Pd    Pd30     0.666667      0.375000      0.101170
Pd    Pd31     0.666667      0.625000      0.101170
Pd    Pd32     0.666667      0.875000      0.101170
Pd    Pd33     0.333333      0.000000      0.134894
Pd    Pd34     0.333333      0.250000      0.134894
Pd    Pd35     0.333333      0.500000      0.134894
Pd    Pd36     0.333333      0.750000      0.134894
Pd    Pd37     0.833333      0.000000      0.134894
Pd    Pd38     0.833333      0.250000      0.134894
Pd    Pd39     0.833333      0.500000      0.134894
Pd    Pd40     0.833333      0.750000      0.134894
Pd    Pd41     0.000000      0.125000      0.168617
Pd    Pd42     0.000000      0.375000      0.168617
Pd    Pd43     0.000000      0.625000      0.168617
Pd    Pd44     0.000000      0.875000      0.168617
Pd    Pd45     0.500000      0.125000      0.168617
Pd    Pd46     0.500000      0.375000      0.168617
Pd    Pd47     0.500000      0.625000      0.168617
Pd    Pd48     0.500000      0.875000      0.168617
Pd    Pd49     0.166161      0.999943      0.202978
Pd    Pd50     0.166065      0.249946      0.202959
Pd    Pd51     0.165965      0.499994      0.202876
Pd    Pd52     0.166080      0.750082      0.202906

```

Pd	Pd53	0.665820	0.999891	0.203015
Pd	Pd54	0.665305	0.249989	0.203162
Pd	Pd55	0.665666	0.500060	0.203085
Pd	Pd56	0.665185	0.749944	0.203325
Pd	Pd57	0.331498	0.125256	0.236278
Pd	Pd58	0.331115	0.375033	0.236303
Pd	Pd59	0.331218	0.624802	0.236233
Pd	Pd60	0.331659	0.874557	0.236253
Pd	Pd61	0.830601	0.125110	0.236226
Pd	Pd62	0.830927	0.374960	0.235965
Pd	Pd63	0.830612	0.625167	0.236135
Pd	Pd64	0.830559	0.875054	0.236251
Pd	Pd65	0.999073	0.999991	0.268394
Pd	Pd66	0.999350	0.250040	0.268442
Pd	Pd67	0.999525	0.500000	0.268505
Pd	Pd68	0.999102	0.750076	0.268404
Pd	Pd69	0.499706	0.999869	0.268562
Pd	Pd70	0.499440	0.250960	0.269910
Pd	Pd71	0.499810	0.499442	0.269287
Pd	Pd72	0.499478	0.747744	0.270381
Pd	Pd73	0.165249	0.124809	0.307635
Pd	Pd74	0.165952	0.375045	0.307822
Pd	Pd75	0.165457	0.625448	0.307634
Pd	Pd76	0.165399	0.875279	0.307656
Pd	Pd77	0.665974	0.124785	0.308181
Pd	Pd78	0.666332	0.374820	0.308004
Pd	Pd79	0.665826	0.624731	0.308573
Pd	Pd80	0.665992	0.875221	0.308259
Pd	Pd81	0.830816	0.750077	0.338465
Pd	Pd82	0.330823	0.000342	0.338222
Pd	Pd83	0.330452	0.250213	0.338502
Pd	Pd84	0.330449	0.500176	0.338318
Pd	Pd85	0.330398	0.750184	0.338367
Pd	Pd86	0.830905	0.000077	0.338548
Pd	Pd87	0.830906	0.250080	0.338372
Pd	Pd88	0.830992	0.500021	0.338212
Pd	Pd89	0.997762	0.125002	0.368432
Pd	Pd90	0.998059	0.374931	0.368385
Pd	Pd91	0.997800	0.625261	0.368438
Pd	Pd92	0.997861	0.875067	0.368418
Pd	Pd93	0.497863	0.124738	0.368794
Pd	Pd94	0.498384	0.374492	0.371864
Pd	Pd95	0.497802	0.625088	0.371414
Pd	Pd96	0.497698	0.875512	0.368588
C	C97	0.508419	0.549019	0.451346
C	C98	0.510688	0.415381	0.452619
O	O99	0.519069	0.336496	0.487826
H	H100	0.441893	0.582550	0.473660
H	H101	0.578094	0.586447	0.468540

M25 CH₃CO* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha    90.000000
_cell_angle_beta     90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

```


loop_	_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
	Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
	Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
	Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
	Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
	Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
	Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
	Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
	Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
	Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
	Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
	Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
	Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
	Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
	Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
	Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
	Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
	Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
	Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
	Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
	Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
	Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
	Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
	Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
	Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
	Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
	Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
	Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
	Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
	Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
	Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
	Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
	Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
	Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
	Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
	Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
	Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
	Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
	Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
	Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
	Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
	Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
	Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
	Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
	Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
	Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
	Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
	Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
	Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
	Pd	Pd49	0.165869	0.999576	0.202888
	Pd	Pd50	0.166046	0.249519	0.202899
	Pd	Pd51	0.165876	0.499670	0.202862
	Pd	Pd52	0.165953	0.749670	0.202914
	Pd	Pd53	0.665800	0.999765	0.203037
	Pd	Pd54	0.665289	0.249761	0.203116

Pd	Pd55	0.665793	0.500042	0.202934
Pd	Pd56	0.665189	0.749960	0.203265
Pd	Pd57	0.331195	0.124459	0.236177
Pd	Pd58	0.330972	0.374722	0.236084
Pd	Pd59	0.331005	0.624587	0.236265
Pd	Pd60	0.331206	0.874175	0.236313
Pd	Pd61	0.830383	0.124788	0.236275
Pd	Pd62	0.831114	0.374728	0.235898
Pd	Pd63	0.830854	0.624912	0.235952
Pd	Pd64	0.830474	0.874790	0.236286
Pd	Pd65	0.998824	0.999669	0.268405
Pd	Pd66	0.999099	0.249542	0.268367
Pd	Pd67	0.999333	0.499658	0.268448
Pd	Pd68	0.999097	0.749579	0.268408
Pd	Pd69	0.499463	0.999584	0.268287
Pd	Pd70	0.499007	0.251457	0.270288
Pd	Pd71	0.499977	0.499616	0.268748
Pd	Pd72	0.499096	0.748089	0.270146
Pd	Pd73	0.164983	0.124003	0.307656
Pd	Pd74	0.165330	0.374047	0.307631
Pd	Pd75	0.165544	0.623997	0.307807
Pd	Pd76	0.164847	0.874313	0.307590
Pd	Pd77	0.665780	0.124391	0.308245
Pd	Pd78	0.666772	0.374772	0.307209
Pd	Pd79	0.665986	0.624604	0.308139
Pd	Pd80	0.665798	0.874940	0.308386
Pd	Pd81	0.830567	0.749571	0.338416
Pd	Pd82	0.329966	0.998419	0.338396
Pd	Pd83	0.329903	0.248243	0.338092
Pd	Pd84	0.330930	0.498546	0.337660
Pd	Pd85	0.329584	0.748938	0.338722
Pd	Pd86	0.830652	0.999630	0.338668
Pd	Pd87	0.830759	0.249642	0.338404
Pd	Pd88	0.830712	0.499729	0.338212
Pd	Pd89	0.997439	0.124491	0.368439
Pd	Pd90	0.997725	0.374384	0.368328
Pd	Pd91	0.997622	0.624615	0.368357
Pd	Pd92	0.997361	0.874446	0.368387
Pd	Pd93	0.497199	0.121275	0.368504
Pd	Pd94	0.499687	0.369674	0.369896
Pd	Pd95	0.497980	0.624200	0.371247
Pd	Pd96	0.497006	0.874099	0.368503
C	C97	0.502905	0.647033	0.496719
C	C98	0.501479	0.559354	0.447467
O	O99	0.503660	0.447659	0.455245
H	H100	0.434214	0.633612	0.521378
H	H101	0.566668	0.625302	0.524185
H	H102	0.507133	0.741728	0.482399

M26 CCOH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha    90.000000
_cell_angle_beta     90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_

```

_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166280	0.999998	0.202868
Pd	Pd50	0.166085	0.249900	0.202918
Pd	Pd51	0.165547	0.499999	0.202964
Pd	Pd52	0.166088	0.750097	0.202916
Pd	Pd53	0.666283	0.000001	0.202864
Pd	Pd54	0.665820	0.249866	0.203103
Pd	Pd55	0.665941	0.500001	0.202385

Pd	Pd56	0.665822	0.750136	0.203104
Pd	Pd57	0.331243	0.125102	0.236440
Pd	Pd58	0.330808	0.375348	0.236212
Pd	Pd59	0.330808	0.624651	0.236216
Pd	Pd60	0.331244	0.874894	0.236440
Pd	Pd61	0.831347	0.125174	0.236255
Pd	Pd62	0.831559	0.375636	0.237147
Pd	Pd63	0.831562	0.624367	0.237147
Pd	Pd64	0.831348	0.874826	0.236257
Pd	Pd65	0.000035	0.999999	0.268355
Pd	Pd66	0.000072	0.249816	0.268592
Pd	Pd67	0.997130	0.500000	0.269737
Pd	Pd68	0.000074	0.750186	0.268592
Pd	Pd69	0.499855	0.999998	0.268562
Pd	Pd70	0.499010	0.249659	0.269198
Pd	Pd71	0.498225	0.499999	0.269218
Pd	Pd72	0.499011	0.750337	0.269197
Pd	Pd73	0.166269	0.124372	0.307662
Pd	Pd74	0.165764	0.374841	0.307650
Pd	Pd75	0.165765	0.625153	0.307650
Pd	Pd76	0.166272	0.875624	0.307661
Pd	Pd77	0.667099	0.123075	0.308110
Pd	Pd78	0.665672	0.369498	0.306519
Pd	Pd79	0.665674	0.630497	0.306522
Pd	Pd80	0.667100	0.876925	0.308111
Pd	Pd81	0.833635	0.752457	0.338992
Pd	Pd82	0.332130	0.999994	0.338720
Pd	Pd83	0.332761	0.251866	0.338333
Pd	Pd84	0.330309	0.499994	0.339058
Pd	Pd85	0.332766	0.748121	0.338334
Pd	Pd86	0.832840	0.000001	0.338214
Pd	Pd87	0.833632	0.247542	0.338990
Pd	Pd88	0.826567	0.500000	0.348340
Pd	Pd89	0.000473	0.124316	0.368747
Pd	Pd90	0.998584	0.374808	0.368639
Pd	Pd91	0.998585	0.625191	0.368638
Pd	Pd92	0.000475	0.875683	0.368747
Pd	Pd93	0.499210	0.124915	0.368814
Pd	Pd94	0.499881	0.375730	0.372923
Pd	Pd95	0.499879	0.624245	0.372923
Pd	Pd96	0.499214	0.875066	0.368813
C	C97	0.681722	0.499998	0.364051
C	C98	0.601548	0.499985	0.404642
O	O99	0.623737	0.499987	0.461167
H	H100	0.561612	0.499974	0.482692

M27 CHCOH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x

```

_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165738	0.999973	0.202705
Pd	Pd50	0.165994	0.249864	0.202765
Pd	Pd51	0.165941	0.499979	0.202685
Pd	Pd52	0.166082	0.750087	0.202740
Pd	Pd53	0.665869	0.999952	0.203005
Pd	Pd54	0.665426	0.251145	0.204161
Pd	Pd55	0.665490	0.499956	0.203558
Pd	Pd56	0.665624	0.749004	0.203925
Pd	Pd57	0.330917	0.125089	0.236164
Pd	Pd58	0.331272	0.375104	0.236007

Pd	Pd59	0.331291	0.624604	0.236018
Pd	Pd60	0.330901	0.875025	0.236127
Pd	Pd61	0.830546	0.124795	0.236330
Pd	Pd62	0.830733	0.374827	0.236374
Pd	Pd63	0.830940	0.624988	0.236183
Pd	Pd64	0.830573	0.875148	0.236339
Pd	Pd65	0.998554	0.999962	0.268302
Pd	Pd66	0.999390	0.249776	0.268388
Pd	Pd67	0.999706	0.499883	0.268420
Pd	Pd68	0.999651	0.750005	0.268328
Pd	Pd69	0.499486	0.000022	0.268441
Pd	Pd70	0.499859	0.249706	0.269387
Pd	Pd71	0.499363	0.499437	0.269168
Pd	Pd72	0.499671	0.750391	0.269022
Pd	Pd73	0.164579	0.123997	0.307330
Pd	Pd74	0.165496	0.374100	0.307007
Pd	Pd75	0.165422	0.625628	0.306999
Pd	Pd76	0.164442	0.876083	0.307295
Pd	Pd77	0.666419	0.123242	0.308529
Pd	Pd78	0.667823	0.373141	0.311401
Pd	Pd79	0.667455	0.626492	0.310495
Pd	Pd80	0.666343	0.875824	0.308810
Pd	Pd81	0.833873	0.750986	0.338409
Pd	Pd82	0.330124	0.999878	0.338228
Pd	Pd83	0.331137	0.250760	0.337650
Pd	Pd84	0.328436	0.499832	0.338451
Pd	Pd85	0.330467	0.749302	0.337598
Pd	Pd86	0.831625	0.999562	0.338831
Pd	Pd87	0.833542	0.248141	0.338776
Pd	Pd88	0.835964	0.499418	0.338290
Pd	Pd89	0.999217	0.123913	0.368850
Pd	Pd90	0.000400	0.373625	0.368725
Pd	Pd91	0.000101	0.625423	0.368643
Pd	Pd92	0.999112	0.875443	0.368797
Pd	Pd93	0.497185	0.122634	0.368797
Pd	Pd94	0.494907	0.373195	0.371447
Pd	Pd95	0.494401	0.626002	0.370421
Pd	Pd96	0.497032	0.876337	0.368720
C	C97	0.632836	0.436642	0.390539
C	C98	0.633847	0.567142	0.390956
O	O99	0.675274	0.624177	0.436773
H	H100	0.666579	0.388445	0.426782
H	H101	0.674547	0.712085	0.429266

M28 CH₂COH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha    90.000000
_cell_angle_beta     90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

```

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166454	0.999896	0.203159
Pd	Pd50	0.166455	0.250107	0.203159
Pd	Pd51	0.166136	0.499577	0.202496
Pd	Pd52	0.166136	0.750428	0.202496
Pd	Pd53	0.665836	0.000027	0.202959
Pd	Pd54	0.665835	0.249978	0.202959
Pd	Pd55	0.665538	0.499980	0.202955
Pd	Pd56	0.665538	0.750026	0.202955
Pd	Pd57	0.331220	0.125001	0.236361
Pd	Pd58	0.330889	0.376943	0.237725
Pd	Pd59	0.330854	0.625006	0.237327
Pd	Pd60	0.330884	0.873066	0.237726

Pd	Pd61	0.830568	0.125003	0.236228
Pd	Pd62	0.830553	0.374743	0.236102
Pd	Pd63	0.830864	0.625003	0.235676
Pd	Pd64	0.830554	0.875259	0.236102
Pd	Pd65	0.999318	0.000443	0.268496
Pd	Pd66	0.999315	0.249564	0.268495
Pd	Pd67	0.998112	0.499089	0.268110
Pd	Pd68	0.998112	0.750914	0.268112
Pd	Pd69	0.499532	0.999989	0.268421
Pd	Pd70	0.499533	0.250010	0.268422
Pd	Pd71	0.498740	0.500250	0.269692
Pd	Pd72	0.498741	0.749751	0.269691
Pd	Pd73	0.165933	0.125006	0.308342
Pd	Pd74	0.164962	0.374977	0.308073
Pd	Pd75	0.161260	0.625003	0.304872
Pd	Pd76	0.164963	0.875031	0.308074
Pd	Pd77	0.665740	0.125004	0.308226
Pd	Pd78	0.665550	0.374756	0.307780
Pd	Pd79	0.664640	0.625001	0.307190
Pd	Pd80	0.665550	0.875250	0.307779
Pd	Pd81	0.829380	0.749947	0.338161
Pd	Pd82	0.330588	0.998619	0.338315
Pd	Pd83	0.330585	0.251385	0.338316
Pd	Pd84	0.326186	0.502344	0.343721
Pd	Pd85	0.326185	0.747660	0.343719
Pd	Pd86	0.830661	0.999851	0.338362
Pd	Pd87	0.830664	0.250149	0.338363
Pd	Pd88	0.829382	0.500058	0.338161
Pd	Pd89	0.997386	0.125003	0.368592
Pd	Pd90	0.997250	0.375586	0.368441
Pd	Pd91	0.996418	0.625002	0.367835
Pd	Pd92	0.997248	0.874422	0.368442
Pd	Pd93	0.497343	0.125000	0.368164
Pd	Pd94	0.497784	0.372984	0.368443
Pd	Pd95	0.499583	0.625000	0.372209
Pd	Pd96	0.497785	0.877014	0.368440
C	C97	0.402669	0.625011	0.440207
C	C98	0.308616	0.625002	0.408580
O	O99	0.223496	0.624998	0.438370
H	H100	0.415707	0.541819	0.465293
H	H101	0.415699	0.708214	0.465282
H	H102	0.165785	0.624992	0.411297

M29 CH₃COH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032

_cell_length_b 10.986804

_cell_length_c 23.511980

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000

Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166205	1.000000	0.202925
Pd	Pd50	0.166032	0.249937	0.202959
Pd	Pd51	0.165954	0.500002	0.202928
Pd	Pd52	0.166033	0.750066	0.202959
Pd	Pd53	0.665877	0.000001	0.203047
Pd	Pd54	0.665539	0.249799	0.203081
Pd	Pd55	0.665831	0.500002	0.202973
Pd	Pd56	0.665538	0.750202	0.203081
Pd	Pd57	0.331468	0.125251	0.236350
Pd	Pd58	0.331138	0.375082	0.236239
Pd	Pd59	0.331139	0.624917	0.236240
Pd	Pd60	0.331469	0.874751	0.236352
Pd	Pd61	0.830617	0.124985	0.236397

Pd	Pd62	0.830770	0.374930	0.236217
Pd	Pd63	0.830769	0.625069	0.236217
Pd	Pd64	0.830618	0.875015	0.236398
Pd	Pd65	0.999067	0.000000	0.268395
Pd	Pd66	0.999102	0.250023	0.268466
Pd	Pd67	0.999443	0.500000	0.268558
Pd	Pd68	0.999104	0.749979	0.268467
Pd	Pd69	0.499752	0.999998	0.268619
Pd	Pd70	0.499568	0.251117	0.269651
Pd	Pd71	0.499885	0.499997	0.269174
Pd	Pd72	0.499567	0.748875	0.269652
Pd	Pd73	0.165296	0.124519	0.307632
Pd	Pd74	0.165289	0.374499	0.307758
Pd	Pd75	0.165287	0.625496	0.307758
Pd	Pd76	0.165296	0.875480	0.307633
Pd	Pd77	0.665964	0.124623	0.308414
Pd	Pd78	0.666199	0.374460	0.307986
Pd	Pd79	0.666197	0.625544	0.307988
Pd	Pd80	0.665963	0.875377	0.308414
Pd	Pd81	0.830754	0.749909	0.338693
Pd	Pd82	0.331120	0.999996	0.338444
Pd	Pd83	0.330566	0.250557	0.338486
Pd	Pd84	0.329217	0.499996	0.338098
Pd	Pd85	0.330565	0.749430	0.338489
Pd	Pd86	0.830942	0.000000	0.338738
Pd	Pd87	0.830757	0.250093	0.338693
Pd	Pd88	0.830623	0.500000	0.338627
Pd	Pd89	0.997754	0.125059	0.368413
Pd	Pd90	0.997569	0.374985	0.368518
Pd	Pd91	0.997568	0.625015	0.368518
Pd	Pd92	0.997754	0.874942	0.368414
Pd	Pd93	0.497732	0.125665	0.368645
Pd	Pd94	0.498660	0.375819	0.371495
Pd	Pd95	0.498656	0.624157	0.371497
Pd	Pd96	0.497730	0.874325	0.368642
C	C97	0.463967	0.499958	0.482702
C	C98	0.532922	0.499984	0.432230
O	O99	0.629113	0.499992	0.449062
H	H100	0.478332	0.580964	0.509091
H	H101	0.478387	0.418963	0.509091
H	H102	0.385982	0.499922	0.469281
H	H103	0.672990	0.499999	0.415063

M30 CCHO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032

_cell_length_b 10.986804

_cell_length_c 23.511980

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000

Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165823	0.000139	0.202906
Pd	Pd50	0.165824	0.249861	0.202905
Pd	Pd51	0.165652	0.500033	0.202750
Pd	Pd52	0.165652	0.749969	0.202751
Pd	Pd53	0.666201	0.000223	0.202775
Pd	Pd54	0.666204	0.249779	0.202775
Pd	Pd55	0.665857	0.499770	0.202760
Pd	Pd56	0.665855	0.750230	0.202758
Pd	Pd57	0.330619	0.125001	0.236099
Pd	Pd58	0.330575	0.375192	0.236024
Pd	Pd59	0.330997	0.625000	0.235617
Pd	Pd60	0.330574	0.874809	0.236024
Pd	Pd61	0.831176	0.124998	0.236558

Pd	Pd62	0.830823	0.375627	0.237156
Pd	Pd63	0.831895	0.625002	0.236453
Pd	Pd64	0.830819	0.874373	0.237156
Pd	Pd65	0.999660	0.000013	0.268468
Pd	Pd66	0.999660	0.249984	0.268467
Pd	Pd67	0.999119	0.500070	0.269502
Pd	Pd68	0.999117	0.749929	0.269502
Pd	Pd69	0.498959	0.000096	0.268106
Pd	Pd70	0.498960	0.249909	0.268106
Pd	Pd71	0.498503	0.500586	0.269277
Pd	Pd72	0.498502	0.749418	0.269276
Pd	Pd73	0.166136	0.125001	0.307999
Pd	Pd74	0.166033	0.374903	0.307643
Pd	Pd75	0.167523	0.625002	0.307172
Pd	Pd76	0.166030	0.875102	0.307645
Pd	Pd77	0.666152	0.125002	0.308313
Pd	Pd78	0.665166	0.372070	0.307084
Pd	Pd79	0.663094	0.625001	0.306040
Pd	Pd80	0.665164	0.877931	0.307083
Pd	Pd81	0.832111	0.752379	0.343379
Pd	Pd82	0.330459	0.999842	0.338263
Pd	Pd83	0.330461	0.250162	0.338264
Pd	Pd84	0.332084	0.500991	0.337960
Pd	Pd85	0.332085	0.749018	0.337959
Pd	Pd86	0.831512	0.000177	0.338747
Pd	Pd87	0.831516	0.249823	0.338746
Pd	Pd88	0.832113	0.497621	0.343377
Pd	Pd89	0.998889	0.124998	0.368289
Pd	Pd90	0.000092	0.373281	0.369187
Pd	Pd91	0.003623	0.624999	0.369394
Pd	Pd92	0.000088	0.876716	0.369189
Pd	Pd93	0.497547	0.125003	0.368149
Pd	Pd94	0.497161	0.373271	0.368100
Pd	Pd95	0.499065	0.625003	0.373855
Pd	Pd96	0.497162	0.876735	0.368100
C	C97	0.745377	0.624998	0.374786
C	C98	0.702595	0.625001	0.431144
O	O99	0.610346	0.625002	0.440711
H	H100	0.753805	0.625001	0.467903

M31 CHCHO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000

Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166162	0.000002	0.202867
Pd	Pd50	0.166112	0.249842	0.202738
Pd	Pd51	0.165676	0.500002	0.202698
Pd	Pd52	0.166111	0.750163	0.202738
Pd	Pd53	0.665957	0.000003	0.203055
Pd	Pd54	0.665533	0.249851	0.203171
Pd	Pd55	0.665859	0.500003	0.202688
Pd	Pd56	0.665532	0.750151	0.203173
Pd	Pd57	0.331508	0.125355	0.235985
Pd	Pd58	0.330720	0.376113	0.237075
Pd	Pd59	0.330719	0.623881	0.237078
Pd	Pd60	0.331507	0.874649	0.235983
Pd	Pd61	0.830814	0.124970	0.236272
Pd	Pd62	0.830816	0.374794	0.235950
Pd	Pd63	0.830813	0.625214	0.235951
Pd	Pd64	0.830815	0.875034	0.236273

Pd	Pd65	0.999311	0.000003	0.268360
Pd	Pd66	0.998989	0.249858	0.268383
Pd	Pd67	0.998883	0.500002	0.268429
Pd	Pd68	0.998989	0.750146	0.268383
Pd	Pd69	0.500127	0.000004	0.268749
Pd	Pd70	0.499535	0.250851	0.269778
Pd	Pd71	0.499927	0.499998	0.269144
Pd	Pd72	0.499535	0.749151	0.269778
Pd	Pd73	0.165541	0.124489	0.307524
Pd	Pd74	0.164180	0.373661	0.306994
Pd	Pd75	0.164178	0.626349	0.306997
Pd	Pd76	0.165539	0.875520	0.307523
Pd	Pd77	0.666382	0.124601	0.308288
Pd	Pd78	0.667129	0.374844	0.307805
Pd	Pd79	0.667132	0.625147	0.307806
Pd	Pd80	0.666384	0.875408	0.308290
Pd	Pd81	0.831149	0.750196	0.338574
Pd	Pd82	0.331541	0.000006	0.338007
Pd	Pd83	0.330536	0.248572	0.338159
Pd	Pd84	0.325762	0.500006	0.339849
Pd	Pd85	0.330529	0.751443	0.338159
Pd	Pd86	0.831408	0.000006	0.338685
Pd	Pd87	0.831150	0.249814	0.338573
Pd	Pd88	0.831072	0.500003	0.338211
Pd	Pd89	0.998201	0.125010	0.368419
Pd	Pd90	0.997873	0.374916	0.368473
Pd	Pd91	0.997872	0.625093	0.368474
Pd	Pd92	0.998202	0.874991	0.368419
Pd	Pd93	0.498535	0.125350	0.368893
Pd	Pd94	0.498974	0.373361	0.370020
Pd	Pd95	0.498964	0.626645	0.370020
Pd	Pd96	0.498536	0.874664	0.368893
C	C97	0.484075	0.500006	0.432633
C	C98	0.386742	0.500088	0.457334
O	O99	0.304797	0.500006	0.430489
H	H100	0.546916	0.500013	0.462548
H	H101	0.380372	0.500235	0.504343

M32 CH₂CHO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000

Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165865	0.000077	0.202896
Pd	Pd50	0.165950	0.249897	0.202901
Pd	Pd51	0.165810	0.499986	0.202840
Pd	Pd52	0.165918	0.750116	0.202889
Pd	Pd53	0.665812	0.999855	0.202939
Pd	Pd54	0.665290	0.249787	0.203110
Pd	Pd55	0.665395	0.499962	0.203081
Pd	Pd56	0.665390	0.749928	0.203123
Pd	Pd57	0.331242	0.125101	0.236179
Pd	Pd58	0.331000	0.375188	0.235973
Pd	Pd59	0.330906	0.624975	0.236043
Pd	Pd60	0.331112	0.874907	0.236211
Pd	Pd61	0.830501	0.124838	0.236229
Pd	Pd62	0.830748	0.374723	0.235978
Pd	Pd63	0.831092	0.624821	0.235757
Pd	Pd64	0.830510	0.874837	0.236262
Pd	Pd65	0.998930	0.999965	0.268385
Pd	Pd66	0.999046	0.249870	0.268400

Pd	Pd67	0.999110	0.499809	0.268422
Pd	Pd68	0.999125	0.749839	0.268404
Pd	Pd69	0.499613	0.999941	0.268264
Pd	Pd70	0.498985	0.252136	0.270205
Pd	Pd71	0.499649	0.500551	0.269788
Pd	Pd72	0.498980	0.748601	0.269702
Pd	Pd73	0.165140	0.125080	0.307667
Pd	Pd74	0.165080	0.374850	0.307626
Pd	Pd75	0.165069	0.624832	0.307653
Pd	Pd76	0.164802	0.875314	0.307564
Pd	Pd77	0.665944	0.124289	0.308080
Pd	Pd78	0.666263	0.374457	0.307560
Pd	Pd79	0.666044	0.624719	0.307524
Pd	Pd80	0.665805	0.874836	0.308196
Pd	Pd81	0.830461	0.749440	0.338302
Pd	Pd82	0.329844	0.999875	0.338329
Pd	Pd83	0.330133	0.249767	0.338052
Pd	Pd84	0.330292	0.499627	0.337197
Pd	Pd85	0.329026	0.750452	0.338146
Pd	Pd86	0.830719	0.999520	0.338628
Pd	Pd87	0.830758	0.249464	0.338405
Pd	Pd88	0.830400	0.499547	0.338173
Pd	Pd89	0.997596	0.124595	0.368421
Pd	Pd90	0.997475	0.374584	0.368455
Pd	Pd91	0.997353	0.624635	0.368415
Pd	Pd92	0.997296	0.874516	0.368403
Pd	Pd93	0.497374	0.122848	0.368266
Pd	Pd94	0.499218	0.371888	0.370716
Pd	Pd95	0.497086	0.628074	0.371288
Pd	Pd96	0.496946	0.875781	0.368181
C	C97	0.451769	0.623859	0.458037
C	C98	0.531816	0.538979	0.458804
O	O99	0.522145	0.421115	0.453724
H	H100	0.375700	0.589001	0.459566
H	H101	0.464032	0.713605	0.476799
H	H102	0.607053	0.572337	0.469430

M33 CH₃CHO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032

_cell_length_b 10.986804

_cell_length_c 23.511980

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000

Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166061	0.999804	0.202993
Pd	Pd50	0.166070	0.249611	0.202945
Pd	Pd51	0.165796	0.499761	0.202897
Pd	Pd52	0.165948	0.749859	0.202956
Pd	Pd53	0.665926	0.999979	0.202967
Pd	Pd54	0.665281	0.249804	0.203151
Pd	Pd55	0.665713	0.499986	0.202968
Pd	Pd56	0.665505	0.750088	0.203086
Pd	Pd57	0.331482	0.124881	0.236282
Pd	Pd58	0.330969	0.374806	0.235967
Pd	Pd59	0.330887	0.624662	0.236146
Pd	Pd60	0.331309	0.874428	0.236298
Pd	Pd61	0.830759	0.124836	0.236279
Pd	Pd62	0.830909	0.374733	0.235980
Pd	Pd63	0.830650	0.624917	0.236179
Pd	Pd64	0.830612	0.874788	0.236372
Pd	Pd65	0.999199	0.999705	0.268427
Pd	Pd66	0.999446	0.249735	0.268476
Pd	Pd67	0.999359	0.499702	0.268508

Pd	Pd68	0.999230	0.749580	0.268450
Pd	Pd69	0.499717	0.999850	0.268229
Pd	Pd70	0.499216	0.252012	0.270509
Pd	Pd71	0.499734	0.499709	0.269008
Pd	Pd72	0.499417	0.748571	0.269392
Pd	Pd73	0.165677	0.124330	0.307878
Pd	Pd74	0.165592	0.374151	0.307814
Pd	Pd75	0.165648	0.624330	0.307894
Pd	Pd76	0.165304	0.874584	0.307788
Pd	Pd77	0.666092	0.124371	0.308103
Pd	Pd78	0.666150	0.374890	0.307608
Pd	Pd79	0.665567	0.624887	0.308052
Pd	Pd80	0.665840	0.874892	0.308332
Pd	Pd81	0.830553	0.749568	0.338639
Pd	Pd82	0.330434	0.998819	0.338395
Pd	Pd83	0.330748	0.249250	0.338171
Pd	Pd84	0.330888	0.498960	0.337720
Pd	Pd85	0.330293	0.748740	0.338435
Pd	Pd86	0.830797	0.999614	0.338707
Pd	Pd87	0.830855	0.249792	0.338384
Pd	Pd88	0.830641	0.499779	0.338239
Pd	Pd89	0.997751	0.124526	0.368369
Pd	Pd90	0.997703	0.374590	0.368498
Pd	Pd91	0.997546	0.624670	0.368433
Pd	Pd92	0.997522	0.874455	0.368379
Pd	Pd93	0.497669	0.121264	0.368392
Pd	Pd94	0.499865	0.371059	0.371065
Pd	Pd95	0.498408	0.624277	0.371103
Pd	Pd96	0.497338	0.873940	0.368237
C	C97	0.605946	0.626941	0.479307
C	C98	0.519990	0.555303	0.455472
O	O99	0.529529	0.437590	0.451085
H	H100	0.611926	0.608063	0.525328
H	H101	0.675968	0.599564	0.459014
H	H102	0.594749	0.725335	0.473899
H	H103	0.443558	0.590389	0.464557

M34 CCHOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000

Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166113	0.998565	0.202811
Pd	Pd50	0.165988	0.248673	0.202851
Pd	Pd51	0.165690	0.499140	0.202833
Pd	Pd52	0.166117	0.748954	0.202807
Pd	Pd53	0.666363	0.001409	0.202910
Pd	Pd54	0.665842	0.251639	0.204123
Pd	Pd55	0.665567	0.500215	0.202745
Pd	Pd56	0.666131	0.751231	0.202535
Pd	Pd57	0.331088	0.122531	0.235973
Pd	Pd58	0.330481	0.373701	0.235842
Pd	Pd59	0.331039	0.623377	0.236041
Pd	Pd60	0.331278	0.872643	0.236376
Pd	Pd61	0.831161	0.126253	0.236341
Pd	Pd62	0.830556	0.376417	0.237478
Pd	Pd63	0.831903	0.625278	0.236613
Pd	Pd64	0.831648	0.875803	0.236148
Pd	Pd65	0.000174	0.000181	0.268438
Pd	Pd66	0.999587	0.249890	0.268523
Pd	Pd67	0.997674	0.500247	0.269430

Pd	Pd68	0.000811	0.750352	0.268613
Pd	Pd69	0.499910	0.998795	0.268304
Pd	Pd70	0.498839	0.248994	0.269021
Pd	Pd71	0.498139	0.498263	0.269459
Pd	Pd72	0.499404	0.749054	0.268913
Pd	Pd73	0.166120	0.121951	0.307668
Pd	Pd74	0.164824	0.373308	0.307330
Pd	Pd75	0.166958	0.623436	0.307689
Pd	Pd76	0.166930	0.872738	0.307834
Pd	Pd77	0.666384	0.126127	0.308619
Pd	Pd78	0.663484	0.374803	0.311311
Pd	Pd79	0.666796	0.633263	0.305237
Pd	Pd80	0.667664	0.878908	0.307834
Pd	Pd81	0.834769	0.755021	0.338601
Pd	Pd82	0.331616	0.994690	0.338425
Pd	Pd83	0.329487	0.246040	0.337092
Pd	Pd84	0.330826	0.497112	0.338272
Pd	Pd85	0.335209	0.743708	0.338781
Pd	Pd86	0.832769	0.002286	0.338256
Pd	Pd87	0.832881	0.249654	0.339165
Pd	Pd88	0.830146	0.502904	0.345850
Pd	Pd89	0.000336	0.125983	0.368704
Pd	Pd90	0.998803	0.375846	0.368723
Pd	Pd91	0.000416	0.627023	0.368650
Pd	Pd92	0.001024	0.877518	0.368917
Pd	Pd93	0.497078	0.118766	0.368482
Pd	Pd94	0.491182	0.363149	0.371478
Pd	Pd95	0.504401	0.618485	0.372746
Pd	Pd96	0.500461	0.871208	0.368742
C	C97	0.686873	0.510492	0.365407
C	C98	0.629423	0.539857	0.415448
O	O99	0.598941	0.438853	0.448741
H	H100	0.655764	0.617301	0.441114
H	H101	0.562197	0.469329	0.481618

M35 CHCHOH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723

Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166007	0.000077	0.203020
Pd	Pd50	0.166080	0.250108	0.202971
Pd	Pd51	0.165926	0.500043	0.202969
Pd	Pd52	0.166131	0.750004	0.202969
Pd	Pd53	0.665662	0.000005	0.203103
Pd	Pd54	0.665238	0.249987	0.203344
Pd	Pd55	0.665850	0.499934	0.202947
Pd	Pd56	0.665312	0.749970	0.203260
Pd	Pd57	0.331268	0.125265	0.235912
Pd	Pd58	0.331027	0.375680	0.236703
Pd	Pd59	0.331060	0.624478	0.236614
Pd	Pd60	0.331175	0.874849	0.236085
Pd	Pd61	0.830302	0.124825	0.236309
Pd	Pd62	0.830677	0.374813	0.235940
Pd	Pd63	0.830708	0.625178	0.235953
Pd	Pd64	0.830298	0.875086	0.236308
Pd	Pd65	0.998622	0.999988	0.268462
Pd	Pd66	0.998535	0.249768	0.268389
Pd	Pd67	0.998875	0.500019	0.268479
Pd	Pd68	0.998635	0.750229	0.268405
Pd	Pd69	0.499745	0.000045	0.268811

Pd	Pd70	0.499256	0.250702	0.270070
Pd	Pd71	0.499965	0.499684	0.269536
Pd	Pd72	0.499156	0.749269	0.269698
Pd	Pd73	0.164851	0.124731	0.307792
Pd	Pd74	0.163847	0.374250	0.307494
Pd	Pd75	0.163976	0.625921	0.307560
Pd	Pd76	0.164709	0.875690	0.307751
Pd	Pd77	0.665434	0.124631	0.308488
Pd	Pd78	0.665259	0.374762	0.308267
Pd	Pd79	0.665250	0.624890	0.308064
Pd	Pd80	0.665449	0.874969	0.308439
Pd	Pd81	0.830058	0.749722	0.338418
Pd	Pd82	0.330978	0.000347	0.338019
Pd	Pd83	0.329926	0.249010	0.337684
Pd	Pd84	0.326089	0.500343	0.339846
Pd	Pd85	0.329867	0.751253	0.337853
Pd	Pd86	0.830264	0.999784	0.338725
Pd	Pd87	0.830020	0.249985	0.338393
Pd	Pd88	0.830186	0.499898	0.338131
Pd	Pd89	0.996941	0.125008	0.368433
Pd	Pd90	0.996984	0.375007	0.368592
Pd	Pd91	0.997081	0.624943	0.368613
Pd	Pd92	0.997036	0.874605	0.368544
Pd	Pd93	0.497304	0.125699	0.369158
Pd	Pd94	0.495145	0.374794	0.372719
Pd	Pd95	0.496216	0.624919	0.372125
Pd	Pd96	0.497308	0.874299	0.368835
C	C97	0.441695	0.499595	0.427148
C	C98	0.333424	0.502248	0.428577
O	O99	0.289874	0.604947	0.451913
H	H100	0.485530	0.508537	0.466729
H	H101	0.293036	0.417207	0.437704
H	H102	0.217646	0.598096	0.447621

M36 CH₂CHOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

1_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723

Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166293	0.999973	0.203034
Pd	Pd50	0.166178	0.249888	0.202973
Pd	Pd51	0.165824	0.499976	0.202906
Pd	Pd52	0.166088	0.750111	0.202940
Pd	Pd53	0.665914	0.999929	0.203096
Pd	Pd54	0.665550	0.249571	0.203004
Pd	Pd55	0.665887	0.500041	0.202795
Pd	Pd56	0.665342	0.750202	0.203205
Pd	Pd57	0.331644	0.125208	0.236405
Pd	Pd58	0.330949	0.375211	0.236280
Pd	Pd59	0.330940	0.624809	0.236247
Pd	Pd60	0.331625	0.874547	0.236418
Pd	Pd61	0.830680	0.124915	0.236417
Pd	Pd62	0.831053	0.374821	0.236052
Pd	Pd63	0.830792	0.625072	0.236155
Pd	Pd64	0.830715	0.874980	0.236342
Pd	Pd65	0.999234	0.999963	0.268445
Pd	Pd66	0.999537	0.250051	0.268490
Pd	Pd67	0.999464	0.499978	0.268593
Pd	Pd68	0.999406	0.749909	0.268463
Pd	Pd69	0.499908	0.999704	0.268466
Pd	Pd70	0.499509	0.251175	0.269591

Pd	Pd71	0.499720	0.500151	0.268694
Pd	Pd72	0.499413	0.748120	0.270157
Pd	Pd73	0.165458	0.124730	0.307775
Pd	Pd74	0.165870	0.374993	0.307901
Pd	Pd75	0.165713	0.625172	0.307807
Pd	Pd76	0.165511	0.875087	0.307787
Pd	Pd77	0.666047	0.124686	0.308708
Pd	Pd78	0.666411	0.374569	0.307157
Pd	Pd79	0.665957	0.624997	0.307947
Pd	Pd80	0.666026	0.875222	0.308419
Pd	Pd81	0.830910	0.749892	0.338455
Pd	Pd82	0.330692	0.999977	0.338466
Pd	Pd83	0.330666	0.250395	0.338488
Pd	Pd84	0.330833	0.500069	0.338568
Pd	Pd85	0.330809	0.749564	0.338475
Pd	Pd86	0.831015	0.999958	0.338794
Pd	Pd87	0.830984	0.249956	0.338578
Pd	Pd88	0.830741	0.499823	0.338344
Pd	Pd89	0.997787	0.124947	0.368481
Pd	Pd90	0.997796	0.374828	0.368492
Pd	Pd91	0.997806	0.625060	0.368510
Pd	Pd92	0.997874	0.874922	0.368430
Pd	Pd93	0.497525	0.124477	0.368380
Pd	Pd94	0.499909	0.375673	0.370144
Pd	Pd95	0.499309	0.624287	0.371386
Pd	Pd96	0.497588	0.875536	0.368555
C	C97	0.528715	0.555461	0.453489
C	C98	0.553828	0.428399	0.450905
O	O99	0.653599	0.401631	0.454169
H	H100	0.590783	0.616314	0.464049
H	H101	0.458087	0.575842	0.474638
H	H102	0.503161	0.361113	0.470569
H	H103	0.664375	0.315979	0.444513

M37 CH₃CHOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

1_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723

Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165932	0.999919	0.203014
Pd	Pd50	0.166047	0.249825	0.203026
Pd	Pd51	0.165782	0.499840	0.202975
Pd	Pd52	0.165878	0.749913	0.202997
Pd	Pd53	0.665938	0.999894	0.203007
Pd	Pd54	0.665755	0.249504	0.202863
Pd	Pd55	0.665655	0.499748	0.202809
Pd	Pd56	0.665481	0.750103	0.202990
Pd	Pd57	0.331150	0.124689	0.236286
Pd	Pd58	0.330902	0.375090	0.236055
Pd	Pd59	0.330903	0.624666	0.236311
Pd	Pd60	0.331080	0.874392	0.236338
Pd	Pd61	0.830840	0.124918	0.236337
Pd	Pd62	0.831067	0.374870	0.236235
Pd	Pd63	0.830416	0.624626	0.236375
Pd	Pd64	0.830680	0.874685	0.236315
Pd	Pd65	0.999146	0.999752	0.268465
Pd	Pd66	0.999506	0.249781	0.268532
Pd	Pd67	0.999243	0.499795	0.268598
Pd	Pd68	0.999234	0.749598	0.268516
Pd	Pd69	0.499617	0.999455	0.268311
Pd	Pd70	0.499163	0.250555	0.269105

Pd	Pd71	0.499402	0.499479	0.269099
Pd	Pd72	0.499186	0.748526	0.269428
Pd	Pd73	0.165789	0.124752	0.308031
Pd	Pd74	0.165720	0.374410	0.308017
Pd	Pd75	0.165528	0.624569	0.307969
Pd	Pd76	0.165266	0.875032	0.307802
Pd	Pd77	0.666005	0.124425	0.308240
Pd	Pd78	0.666652	0.373891	0.306886
Pd	Pd79	0.665565	0.624245	0.307669
Pd	Pd80	0.666008	0.874960	0.308159
Pd	Pd81	0.830467	0.749339	0.338565
Pd	Pd82	0.330613	0.999108	0.338432
Pd	Pd83	0.331905	0.250299	0.337980
Pd	Pd84	0.331174	0.499623	0.338289
Pd	Pd85	0.330365	0.748863	0.338732
Pd	Pd86	0.830823	0.999567	0.338657
Pd	Pd87	0.830844	0.249661	0.338768
Pd	Pd88	0.830188	0.499553	0.339116
Pd	Pd89	0.997731	0.124514	0.368434
Pd	Pd90	0.997554	0.374669	0.368487
Pd	Pd91	0.997183	0.624523	0.368509
Pd	Pd92	0.997478	0.874444	0.368436
Pd	Pd93	0.497837	0.122456	0.368316
Pd	Pd94	0.500633	0.371519	0.369919
Pd	Pd95	0.500279	0.624969	0.371144
Pd	Pd96	0.497442	0.873871	0.368303
C	C97	0.640185	0.670254	0.464908
C	C98	0.559859	0.581322	0.448324
O	O99	0.592197	0.458630	0.446613
H	H100	0.611307	0.763832	0.464780
H	H101	0.667206	0.648855	0.508132
H	H102	0.703554	0.666857	0.435240
H	H103	0.492986	0.582893	0.475310
H	H104	0.657812	0.455760	0.427812

M38 CCH₂O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723

Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165733	0.999999	0.202568
Pd	Pd50	0.165866	0.249670	0.202571
Pd	Pd51	0.166304	0.500002	0.202363
Pd	Pd52	0.165868	0.750333	0.202571
Pd	Pd53	0.665993	0.000000	0.203009
Pd	Pd54	0.665624	0.250872	0.203847
Pd	Pd55	0.665113	0.500003	0.203728
Pd	Pd56	0.665625	0.749130	0.203847
Pd	Pd57	0.331029	0.124842	0.235966
Pd	Pd58	0.330957	0.374967	0.235727
Pd	Pd59	0.330958	0.625033	0.235727
Pd	Pd60	0.331029	0.875160	0.235966
Pd	Pd61	0.830698	0.125225	0.236242
Pd	Pd62	0.830585	0.375190	0.236812
Pd	Pd63	0.830585	0.624814	0.236811
Pd	Pd64	0.830698	0.874776	0.236242
Pd	Pd65	0.999164	0.000001	0.268262
Pd	Pd66	0.999464	0.249791	0.268441
Pd	Pd67	0.998709	0.500001	0.268884
Pd	Pd68	0.999467	0.750210	0.268441
Pd	Pd69	0.499591	0.999999	0.268437

Pd	Pd70	0.499130	0.250930	0.269629
Pd	Pd71	0.497688	0.500001	0.269784
Pd	Pd72	0.499129	0.749070	0.269629
Pd	Pd73	0.165673	0.124082	0.307201
Pd	Pd74	0.165345	0.374232	0.306452
Pd	Pd75	0.165347	0.625773	0.306452
Pd	Pd76	0.165675	0.875919	0.307200
Pd	Pd77	0.666447	0.124684	0.308247
Pd	Pd78	0.663892	0.373128	0.311654
Pd	Pd79	0.663892	0.626877	0.311656
Pd	Pd80	0.666447	0.875318	0.308250
Pd	Pd81	0.833764	0.752639	0.338944
Pd	Pd82	0.330457	0.000000	0.338455
Pd	Pd83	0.330264	0.249551	0.337264
Pd	Pd84	0.327447	0.500000	0.338037
Pd	Pd85	0.330268	0.750451	0.337265
Pd	Pd86	0.832011	0.999999	0.338085
Pd	Pd87	0.833760	0.247364	0.338945
Pd	Pd88	0.835666	0.500007	0.342719
Pd	Pd89	0.000448	0.123936	0.368666
Pd	Pd90	0.001264	0.373711	0.368748
Pd	Pd91	0.001269	0.626297	0.368750
Pd	Pd92	0.000449	0.876069	0.368665
Pd	Pd93	0.497678	0.123172	0.368739
Pd	Pd94	0.490677	0.368506	0.372086
Pd	Pd95	0.490679	0.631490	0.372088
Pd	Pd96	0.497677	0.876826	0.368742
C	C97	0.699156	0.500003	0.367501
C	C98	0.659257	0.499993	0.427271
O	O99	0.552696	0.499995	0.426805
H	H100	0.686022	0.418301	0.450013
H	H101	0.686025	0.581665	0.450023

M39 CHCH₂O* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723

Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165759	0.999755	0.202659
Pd	Pd50	0.165956	0.249921	0.202723
Pd	Pd51	0.166013	0.499926	0.202737
Pd	Pd52	0.166042	0.749866	0.202726
Pd	Pd53	0.665675	0.000190	0.202593
Pd	Pd54	0.665176	0.251032	0.203897
Pd	Pd55	0.665401	0.499860	0.204517
Pd	Pd56	0.665853	0.748540	0.204195
Pd	Pd57	0.330747	0.125140	0.236029
Pd	Pd58	0.331646	0.375336	0.236017
Pd	Pd59	0.331495	0.624658	0.235999
Pd	Pd60	0.330753	0.874728	0.236117
Pd	Pd61	0.830367	0.124939	0.236089
Pd	Pd62	0.830144	0.374589	0.236365
Pd	Pd63	0.832258	0.625039	0.235688
Pd	Pd64	0.830548	0.875308	0.236134
Pd	Pd65	0.998575	0.000087	0.268242
Pd	Pd66	0.999114	0.249805	0.268289
Pd	Pd67	0.000224	0.499689	0.268303
Pd	Pd68	0.999853	0.750219	0.268306
Pd	Pd69	0.499156	0.000289	0.268271
Pd	Pd70	0.499692	0.250228	0.269053
Pd	Pd71	0.500257	0.501051	0.270203

Pd	Pd72	0.499392	0.750372	0.268984
Pd	Pd73	0.164188	0.123868	0.307084
Pd	Pd74	0.165595	0.374338	0.307060
Pd	Pd75	0.165128	0.625249	0.307264
Pd	Pd76	0.164907	0.874963	0.307369
Pd	Pd77	0.666077	0.123803	0.308141
Pd	Pd78	0.667527	0.373886	0.313327
Pd	Pd79	0.669557	0.628045	0.309151
Pd	Pd80	0.665519	0.877457	0.308117
Pd	Pd81	0.833450	0.751725	0.337974
Pd	Pd82	0.328996	0.000298	0.337906
Pd	Pd83	0.329429	0.249840	0.337774
Pd	Pd84	0.328544	0.499393	0.338059
Pd	Pd85	0.329493	0.748624	0.337796
Pd	Pd86	0.831356	0.000483	0.338628
Pd	Pd87	0.833525	0.248699	0.338525
Pd	Pd88	0.836621	0.499940	0.337555
Pd	Pd89	0.999189	0.124380	0.368845
Pd	Pd90	0.000116	0.374193	0.368714
Pd	Pd91	0.000163	0.625973	0.368822
Pd	Pd92	0.998609	0.875917	0.368603
Pd	Pd93	0.495554	0.123722	0.368333
Pd	Pd94	0.493681	0.374263	0.371222
Pd	Pd95	0.486874	0.629091	0.372434
Pd	Pd96	0.494948	0.876277	0.368219
C	C97	0.635340	0.390634	0.396706
C	C98	0.664472	0.507540	0.424986
O	O99	0.634437	0.616565	0.397668
H	H100	0.659393	0.310507	0.421458
H	H101	0.635330	0.508826	0.469204
H	H102	0.747819	0.509433	0.428485

M40 CH₂CH₂O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723

Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166032	0.999739	0.202815
Pd	Pd50	0.166097	0.249930	0.202698
Pd	Pd51	0.166055	0.500037	0.202833
Pd	Pd52	0.166219	0.749730	0.202795
Pd	Pd53	0.665880	0.000119	0.203031
Pd	Pd54	0.665385	0.249998	0.203158
Pd	Pd55	0.666312	0.499986	0.202472
Pd	Pd56	0.665536	0.750213	0.203032
Pd	Pd57	0.331396	0.125011	0.235845
Pd	Pd58	0.330893	0.375436	0.236739
Pd	Pd59	0.330925	0.624285	0.237174
Pd	Pd60	0.331459	0.874544	0.235988
Pd	Pd61	0.830547	0.125047	0.236255
Pd	Pd62	0.830967	0.374775	0.235938
Pd	Pd63	0.831189	0.625340	0.235865
Pd	Pd64	0.830655	0.875127	0.236221
Pd	Pd65	0.998949	0.999938	0.268389
Pd	Pd66	0.998971	0.250000	0.268352
Pd	Pd67	0.999168	0.500007	0.268399
Pd	Pd68	0.999190	0.749918	0.268384
Pd	Pd69	0.499738	0.000144	0.268491
Pd	Pd70	0.499532	0.251605	0.270445
Pd	Pd71	0.500025	0.499642	0.268305
Pd	Pd72	0.499567	0.748509	0.270327

Pd	Pd73	0.164908	0.124275	0.307294
Pd	Pd74	0.164383	0.374259	0.307148
Pd	Pd75	0.164673	0.625323	0.307621
Pd	Pd76	0.165180	0.874883	0.307450
Pd	Pd77	0.666209	0.124661	0.308346
Pd	Pd78	0.666690	0.375075	0.307655
Pd	Pd79	0.667479	0.625064	0.307167
Pd	Pd80	0.666237	0.875624	0.308172
Pd	Pd81	0.831073	0.750495	0.338476
Pd	Pd82	0.330292	0.999630	0.337942
Pd	Pd83	0.329053	0.247779	0.337520
Pd	Pd84	0.326475	0.499745	0.341003
Pd	Pd85	0.329284	0.751091	0.338352
Pd	Pd86	0.831232	0.000180	0.338708
Pd	Pd87	0.830893	0.249904	0.338523
Pd	Pd88	0.830760	0.500105	0.338168
Pd	Pd89	0.997989	0.125169	0.368459
Pd	Pd90	0.997549	0.375021	0.368453
Pd	Pd91	0.997642	0.625116	0.368472
Pd	Pd92	0.998051	0.875083	0.368451
Pd	Pd93	0.497563	0.123692	0.368630
Pd	Pd94	0.496292	0.371330	0.368960
Pd	Pd95	0.498181	0.628660	0.367539
Pd	Pd96	0.497640	0.876356	0.368609
C	C97	0.302147	0.479618	0.427076
C	C98	0.392250	0.515934	0.462174
O	O99	0.487173	0.502776	0.434010
H	H100	0.283412	0.382460	0.431334
H	H101	0.236367	0.535704	0.436013
H	H102	0.386320	0.611745	0.475667
H	H103	0.396045	0.459028	0.500975

M41 CH₃CH₂O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723

Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165986	0.999878	0.202868
Pd	Pd50	0.165969	0.249891	0.202897
Pd	Pd51	0.165884	0.499854	0.202902
Pd	Pd52	0.165946	0.749910	0.202895
Pd	Pd53	0.665823	0.999958	0.203063
Pd	Pd54	0.665545	0.249424	0.202935
Pd	Pd55	0.666085	0.499918	0.202492
Pd	Pd56	0.665602	0.750428	0.202884
Pd	Pd57	0.331286	0.125098	0.236211
Pd	Pd58	0.331107	0.374949	0.236109
Pd	Pd59	0.331055	0.624758	0.236108
Pd	Pd60	0.331205	0.874830	0.236214
Pd	Pd61	0.830723	0.124851	0.236344
Pd	Pd62	0.831096	0.374814	0.236110
Pd	Pd63	0.831092	0.624994	0.236100
Pd	Pd64	0.830672	0.874838	0.236354
Pd	Pd65	0.999151	0.999787	0.268488
Pd	Pd66	0.999424	0.249979	0.268570
Pd	Pd67	0.999533	0.499813	0.268664
Pd	Pd68	0.999363	0.749620	0.268579
Pd	Pd69	0.499547	0.000039	0.268582
Pd	Pd70	0.499309	0.251181	0.270153
Pd	Pd71	0.500410	0.499743	0.268548
Pd	Pd72	0.499132	0.748749	0.269810

Pd	Pd73	0.165390	0.124585	0.307522
Pd	Pd74	0.165657	0.374673	0.307874
Pd	Pd75	0.165578	0.624692	0.307851
Pd	Pd76	0.165253	0.874937	0.307509
Pd	Pd77	0.666129	0.124194	0.308393
Pd	Pd78	0.667088	0.374141	0.306825
Pd	Pd79	0.667029	0.625568	0.306774
Pd	Pd80	0.666048	0.875340	0.308359
Pd	Pd81	0.830984	0.749926	0.338695
Pd	Pd82	0.330017	0.999813	0.338521
Pd	Pd83	0.330474	0.249447	0.338307
Pd	Pd84	0.331142	0.499634	0.337668
Pd	Pd85	0.330234	0.750126	0.338227
Pd	Pd86	0.831276	0.999688	0.338696
Pd	Pd87	0.831073	0.249520	0.338627
Pd	Pd88	0.830409	0.499731	0.338600
Pd	Pd89	0.998132	0.124646	0.368466
Pd	Pd90	0.997625	0.374671	0.368572
Pd	Pd91	0.997502	0.624628	0.368603
Pd	Pd92	0.998027	0.874676	0.368489
Pd	Pd93	0.497729	0.122906	0.368837
Pd	Pd94	0.500679	0.369415	0.369413
Pd	Pd95	0.499896	0.630395	0.368564
Pd	Pd96	0.497674	0.876597	0.368688
C	C97	0.642056	0.628282	0.484742
C	C98	0.622865	0.503837	0.458783
O	O99	0.527517	0.501281	0.430843
H	H100	0.713529	0.627912	0.507424
H	H101	0.645959	0.698064	0.451138
H	H102	0.582877	0.653113	0.514755
H	H103	0.682544	0.480152	0.428226
H	H104	0.620375	0.432506	0.491819

M42 CCH₂OH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723

Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165648	0.999685	0.202930
Pd	Pd50	0.166184	0.249856	0.202505
Pd	Pd51	0.165847	0.500041	0.202630
Pd	Pd52	0.165610	0.750238	0.202919
Pd	Pd53	0.666089	0.999694	0.202858
Pd	Pd54	0.665909	0.250083	0.203475
Pd	Pd55	0.665841	0.499332	0.203410
Pd	Pd56	0.666040	0.749649	0.202868
Pd	Pd57	0.330542	0.124784	0.235992
Pd	Pd58	0.331095	0.374988	0.235675
Pd	Pd59	0.330356	0.625042	0.235932
Pd	Pd60	0.330329	0.874957	0.236126
Pd	Pd61	0.830820	0.125132	0.237050
Pd	Pd62	0.831583	0.374763	0.236639
Pd	Pd63	0.830665	0.623613	0.237238
Pd	Pd64	0.830835	0.874339	0.236487
Pd	Pd65	0.999421	0.999433	0.268457
Pd	Pd66	0.999976	0.249553	0.268910
Pd	Pd67	0.998982	0.499433	0.269219
Pd	Pd68	0.999325	0.749502	0.268507
Pd	Pd69	0.498729	0.999695	0.268171
Pd	Pd70	0.498797	0.250197	0.269024
Pd	Pd71	0.498796	0.499250	0.269068

Pd	Pd72	0.498551	0.749876	0.268174
Pd	Pd73	0.166111	0.124464	0.307631
Pd	Pd74	0.167011	0.374789	0.306847
Pd	Pd75	0.165397	0.625044	0.307585
Pd	Pd76	0.165607	0.874768	0.308215
Pd	Pd77	0.664745	0.121427	0.307560
Pd	Pd78	0.663011	0.373870	0.309355
Pd	Pd79	0.664614	0.626962	0.307377
Pd	Pd80	0.665703	0.874199	0.308316
Pd	Pd81	0.830927	0.748554	0.338792
Pd	Pd82	0.330196	0.999668	0.338371
Pd	Pd83	0.331170	0.250146	0.337776
Pd	Pd84	0.330641	0.499967	0.337760
Pd	Pd85	0.330077	0.749765	0.338298
Pd	Pd86	0.831163	0.998913	0.338587
Pd	Pd87	0.833140	0.246723	0.341933
Pd	Pd88	0.830994	0.500445	0.343755
Pd	Pd89	0.000003	0.122578	0.368939
Pd	Pd90	0.003668	0.373974	0.369110
Pd	Pd91	0.999076	0.625134	0.369068
Pd	Pd92	0.997946	0.873901	0.368391
Pd	Pd93	0.496722	0.123285	0.368419
Pd	Pd94	0.494989	0.373493	0.371839
Pd	Pd95	0.496498	0.626512	0.368290
Pd	Pd96	0.497138	0.874895	0.368271
C	C97	0.748913	0.371088	0.376492
C	C98	0.715130	0.359640	0.437039
O	O99	0.617236	0.413261	0.444922
H	H100	0.712908	0.261825	0.447839
H	H101	0.769156	0.405805	0.465075
H	H102	0.593546	0.390027	0.482586

M43 CHCH₂OH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723

Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166294	0.999967	0.202905
Pd	Pd50	0.166096	0.249811	0.202916
Pd	Pd51	0.165835	0.499995	0.202912
Pd	Pd52	0.166088	0.750166	0.202900
Pd	Pd53	0.665826	0.000095	0.203073
Pd	Pd54	0.665374	0.249853	0.203181
Pd	Pd55	0.665729	0.500036	0.203056
Pd	Pd56	0.665423	0.750163	0.203205
Pd	Pd57	0.331498	0.125154	0.236326
Pd	Pd58	0.331112	0.375050	0.236201
Pd	Pd59	0.331088	0.625041	0.236204
Pd	Pd60	0.331557	0.874755	0.236360
Pd	Pd61	0.830632	0.125096	0.236339
Pd	Pd62	0.830610	0.374982	0.236130
Pd	Pd63	0.830734	0.625306	0.235946
Pd	Pd64	0.830698	0.875209	0.236277
Pd	Pd65	0.999275	0.000097	0.268402
Pd	Pd66	0.999037	0.250059	0.268428
Pd	Pd67	0.999281	0.500082	0.268525
Pd	Pd68	0.999231	0.750134	0.268419
Pd	Pd69	0.499861	0.000042	0.268821
Pd	Pd70	0.499295	0.251091	0.269864
Pd	Pd71	0.499861	0.500183	0.269270
Pd	Pd72	0.499359	0.748980	0.269863

Pd	Pd73	0.165371	0.124423	0.307643
Pd	Pd74	0.165197	0.374577	0.307643
Pd	Pd75	0.165316	0.625579	0.307665
Pd	Pd76	0.165598	0.875342	0.307706
Pd	Pd77	0.666027	0.124819	0.308490
Pd	Pd78	0.665810	0.374651	0.308311
Pd	Pd79	0.666051	0.625404	0.308233
Pd	Pd80	0.666041	0.875535	0.308358
Pd	Pd81	0.830959	0.750252	0.338334
Pd	Pd82	0.331505	0.999911	0.338451
Pd	Pd83	0.330345	0.250143	0.338442
Pd	Pd84	0.329058	0.500119	0.337719
Pd	Pd85	0.330785	0.749548	0.338571
Pd	Pd86	0.831034	0.000261	0.338676
Pd	Pd87	0.830870	0.250237	0.338633
Pd	Pd88	0.831360	0.500653	0.337873
Pd	Pd89	0.997843	0.125254	0.368423
Pd	Pd90	0.997787	0.375054	0.368510
Pd	Pd91	0.998067	0.625423	0.368519
Pd	Pd92	0.997942	0.875230	0.368386
Pd	Pd93	0.497947	0.126208	0.368909
Pd	Pd94	0.497627	0.375381	0.371533
Pd	Pd95	0.498609	0.623857	0.371989
Pd	Pd96	0.498115	0.873672	0.368871
C	C97	0.509502	0.498882	0.433880
C	C98	0.599030	0.495934	0.471849
O	O99	0.694005	0.485468	0.446207
H	H100	0.439663	0.499885	0.458785
H	H101	0.600307	0.580341	0.497540
H	H102	0.586522	0.420223	0.502576
H	H103	0.688145	0.430932	0.413031

M44 CH₂CH₂OH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723

Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166070	0.999750	0.202985
Pd	Pd50	0.166132	0.249774	0.202938
Pd	Pd51	0.165995	0.499832	0.202893
Pd	Pd52	0.165972	0.749858	0.202947
Pd	Pd53	0.666064	0.999926	0.202926
Pd	Pd54	0.665764	0.250032	0.202988
Pd	Pd55	0.665460	0.500055	0.203130
Pd	Pd56	0.665650	0.749954	0.203131
Pd	Pd57	0.331297	0.124677	0.236192
Pd	Pd58	0.330954	0.374962	0.236179
Pd	Pd59	0.331067	0.624596	0.236426
Pd	Pd60	0.331141	0.874414	0.236309
Pd	Pd61	0.830840	0.125023	0.236292
Pd	Pd62	0.831311	0.374996	0.236089
Pd	Pd63	0.830506	0.624854	0.236284
Pd	Pd64	0.830938	0.874893	0.236310
Pd	Pd65	0.999456	0.999862	0.268464
Pd	Pd66	0.999597	0.249837	0.268514
Pd	Pd67	0.999543	0.499842	0.268523
Pd	Pd68	0.999378	0.749751	0.268475
Pd	Pd69	0.499734	0.999602	0.268176
Pd	Pd70	0.499292	0.251099	0.269125
Pd	Pd71	0.499423	0.499508	0.269831
Pd	Pd72	0.499345	0.748563	0.269263

Pd	Pd73	0.165527	0.124530	0.307811
Pd	Pd74	0.165994	0.374593	0.307857
Pd	Pd75	0.165630	0.624354	0.307933
Pd	Pd76	0.165575	0.874380	0.307828
Pd	Pd77	0.666048	0.124781	0.308100
Pd	Pd78	0.667278	0.374758	0.307290
Pd	Pd79	0.665853	0.624984	0.308669
Pd	Pd80	0.666204	0.875055	0.308029
Pd	Pd81	0.830861	0.749946	0.338592
Pd	Pd82	0.330378	0.999060	0.338391
Pd	Pd83	0.330856	0.249040	0.338177
Pd	Pd84	0.330996	0.498968	0.338492
Pd	Pd85	0.329861	0.749381	0.338849
Pd	Pd86	0.831065	1.000000	0.338620
Pd	Pd87	0.831188	0.249902	0.338634
Pd	Pd88	0.830983	0.499997	0.338663
Pd	Pd89	0.997906	0.124857	0.368461
Pd	Pd90	0.998217	0.374885	0.368423
Pd	Pd91	0.997708	0.624938	0.368500
Pd	Pd92	0.997916	0.874897	0.368394
Pd	Pd93	0.497728	0.122153	0.368004
Pd	Pd94	0.500793	0.371426	0.369020
Pd	Pd95	0.496877	0.626108	0.370549
Pd	Pd96	0.497570	0.874189	0.367920
C	C97	0.501084	0.615121	0.457296
C	C98	0.570128	0.517220	0.478205
O	O99	0.529538	0.398071	0.463134
H	H100	0.424043	0.600576	0.471375
H	H101	0.527469	0.705098	0.471336
H	H102	0.645206	0.527120	0.459998
H	H103	0.575828	0.520705	0.525209
H	H104	0.576523	0.335426	0.474893

M45 CH₃CH₂OH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723

Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165833	0.999987	0.203056
Pd	Pd50	0.165838	0.249986	0.203006
Pd	Pd51	0.165845	0.499951	0.202999
Pd	Pd52	0.165876	0.750012	0.203051
Pd	Pd53	0.665847	0.000003	0.203047
Pd	Pd54	0.665790	0.249653	0.202712
Pd	Pd55	0.665857	0.500392	0.202641
Pd	Pd56	0.665870	0.750260	0.202993
Pd	Pd57	0.330884	0.125178	0.236234
Pd	Pd58	0.330809	0.374986	0.235974
Pd	Pd59	0.330882	0.624714	0.236239
Pd	Pd60	0.330828	0.874958	0.236223
Pd	Pd61	0.830588	0.125182	0.236373
Pd	Pd62	0.831200	0.375032	0.236049
Pd	Pd63	0.830900	0.624979	0.236229
Pd	Pd64	0.830665	0.875101	0.236410
Pd	Pd65	0.999032	0.000048	0.268481
Pd	Pd66	0.999374	0.250072	0.268610
Pd	Pd67	0.999580	0.499974	0.268590
Pd	Pd68	0.999204	0.750043	0.268487
Pd	Pd69	0.499384	0.000035	0.268382
Pd	Pd70	0.499126	0.250695	0.268985
Pd	Pd71	0.499130	0.499269	0.269040

Pd	Pd72	0.499297	0.749779	0.268450
Pd	Pd73	0.165259	0.125134	0.308117
Pd	Pd74	0.165823	0.374906	0.308205
Pd	Pd75	0.165535	0.624748	0.308135
Pd	Pd76	0.165116	0.874999	0.308084
Pd	Pd77	0.665497	0.125254	0.308330
Pd	Pd78	0.665624	0.375328	0.305849
Pd	Pd79	0.665644	0.625276	0.307709
Pd	Pd80	0.665311	0.875230	0.308361
Pd	Pd81	0.830217	0.750090	0.338559
Pd	Pd82	0.329890	0.000051	0.338288
Pd	Pd83	0.331424	0.250708	0.338105
Pd	Pd84	0.331775	0.498978	0.338059
Pd	Pd85	0.330022	0.749954	0.338272
Pd	Pd86	0.830171	0.000338	0.338649
Pd	Pd87	0.830069	0.250489	0.338822
Pd	Pd88	0.830354	0.500123	0.338464
Pd	Pd89	0.996840	0.125150	0.368482
Pd	Pd90	0.997049	0.375142	0.368529
Pd	Pd91	0.997083	0.625239	0.368477
Pd	Pd92	0.996955	0.875129	0.368431
Pd	Pd93	0.496703	0.123637	0.368095
Pd	Pd94	0.500024	0.374737	0.371460
Pd	Pd95	0.497108	0.626904	0.368230
Pd	Pd96	0.496880	0.875308	0.368439
C	C97	0.585016	0.542337	0.490935
C	C98	0.665800	0.463851	0.465770
O	O99	0.620999	0.355141	0.441299
H	H100	0.616970	0.624196	0.510495
H	H101	0.532785	0.573060	0.456926
H	H102	0.541263	0.492823	0.522859
H	H103	0.706852	0.513266	0.432182
H	H104	0.718901	0.434326	0.498674
H	H105	0.671549	0.314344	0.417665

M46 CCOO* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.166667      0.000000      0.000000
Pd Pd2      0.166667      0.250000      0.000000
Pd Pd3      0.166667      0.500000      0.000000
Pd Pd4      0.166667      0.750000      0.000000
Pd Pd5      0.666667      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.666667      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.666667      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.666667      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.333333      0.125000      0.033723

```

Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165676	0.000009	0.202686
Pd	Pd50	0.165747	0.249640	0.202571
Pd	Pd51	0.166112	0.500008	0.202321
Pd	Pd52	0.165747	0.750376	0.202574
Pd	Pd53	0.665945	0.000004	0.202890
Pd	Pd54	0.665523	0.250803	0.203773
Pd	Pd55	0.665138	0.500009	0.203627
Pd	Pd56	0.665523	0.749215	0.203782
Pd	Pd57	0.330887	0.124839	0.235904
Pd	Pd58	0.330618	0.374972	0.235651
Pd	Pd59	0.330608	0.625048	0.235650
Pd	Pd60	0.330884	0.875180	0.235903
Pd	Pd61	0.830716	0.125191	0.236191
Pd	Pd62	0.830586	0.375164	0.236741
Pd	Pd63	0.830582	0.624850	0.236745
Pd	Pd64	0.830723	0.874824	0.236190
Pd	Pd65	0.999189	0.000002	0.268355
Pd	Pd66	0.999400	0.249750	0.268505
Pd	Pd67	0.998657	0.500006	0.268820
Pd	Pd68	0.999400	0.750263	0.268505
Pd	Pd69	0.499286	0.000007	0.268300

Pd	Pd70	0.498711	0.250739	0.269423
Pd	Pd71	0.497320	0.500006	0.269650
Pd	Pd72	0.498709	0.749268	0.269424
Pd	Pd73	0.165493	0.124291	0.307375
Pd	Pd74	0.165118	0.374381	0.306528
Pd	Pd75	0.165114	0.625616	0.306528
Pd	Pd76	0.165487	0.875717	0.307375
Pd	Pd77	0.666012	0.124207	0.308127
Pd	Pd78	0.663285	0.371745	0.310941
Pd	Pd79	0.663294	0.628264	0.310962
Pd	Pd80	0.666001	0.875801	0.308137
Pd	Pd81	0.833514	0.752806	0.338769
Pd	Pd82	0.330066	0.000007	0.338275
Pd	Pd83	0.330104	0.249910	0.337243
Pd	Pd84	0.327475	0.500005	0.337885
Pd	Pd85	0.330092	0.750096	0.337241
Pd	Pd86	0.831744	0.000005	0.338030
Pd	Pd87	0.833514	0.247196	0.338769
Pd	Pd88	0.835216	0.499999	0.342621
Pd	Pd89	0.000030	0.123897	0.368797
Pd	Pd90	0.000962	0.373793	0.368726
Pd	Pd91	0.000953	0.626221	0.368726
Pd	Pd92	0.000025	0.876118	0.368799
Pd	Pd93	0.497205	0.123054	0.368533
Pd	Pd94	0.490875	0.369449	0.371991
Pd	Pd95	0.490861	0.630571	0.371992
Pd	Pd96	0.497185	0.876951	0.368528
C	C97	0.697595	0.499989	0.365835
C	C98	0.659084	0.500006	0.425653
O	O99	0.559370	0.500004	0.429452
O	O100	0.714810	0.500107	0.466716

M47 CHCOO* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723

Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166022	0.999664	0.202833
Pd	Pd50	0.166059	0.249787	0.202820
Pd	Pd51	0.165282	0.499853	0.202742
Pd	Pd52	0.165839	0.750131	0.202789
Pd	Pd53	0.665961	0.000601	0.202624
Pd	Pd54	0.665744	0.250733	0.203591
Pd	Pd55	0.665453	0.498934	0.203169
Pd	Pd56	0.665661	0.750564	0.202101
Pd	Pd57	0.331139	0.125123	0.236054
Pd	Pd58	0.331316	0.375379	0.236093
Pd	Pd59	0.330594	0.624479	0.235891
Pd	Pd60	0.331214	0.874518	0.236271
Pd	Pd61	0.830923	0.125266	0.236095
Pd	Pd62	0.830780	0.376040	0.237369
Pd	Pd63	0.831062	0.624499	0.236537
Pd	Pd64	0.830852	0.874862	0.235940
Pd	Pd65	0.999287	0.999783	0.268347
Pd	Pd66	0.999747	0.249764	0.268360
Pd	Pd67	0.998446	0.499832	0.269283
Pd	Pd68	0.999756	0.750103	0.268416
Pd	Pd69	0.499587	0.999921	0.268185
Pd	Pd70	0.499901	0.250060	0.268949
Pd	Pd71	0.499131	0.500797	0.269547
Pd	Pd72	0.498652	0.749150	0.269272

Pd	Pd73	0.165089	0.123776	0.307228
Pd	Pd74	0.166772	0.374760	0.307210
Pd	Pd75	0.166122	0.625303	0.307141
Pd	Pd76	0.166194	0.874560	0.307793
Pd	Pd77	0.666331	0.123215	0.307792
Pd	Pd78	0.668212	0.374265	0.311116
Pd	Pd79	0.665516	0.628490	0.304507
Pd	Pd80	0.666360	0.875889	0.307572
Pd	Pd81	0.832328	0.751679	0.337890
Pd	Pd82	0.330384	0.999985	0.338193
Pd	Pd83	0.330573	0.250233	0.337789
Pd	Pd84	0.331338	0.500413	0.338375
Pd	Pd85	0.332357	0.748406	0.338060
Pd	Pd86	0.831921	0.999880	0.338295
Pd	Pd87	0.833977	0.247853	0.338493
Pd	Pd88	0.833312	0.501420	0.342018
Pd	Pd89	0.999783	0.124031	0.368762
Pd	Pd90	0.001614	0.373847	0.368562
Pd	Pd91	0.001452	0.626294	0.368640
Pd	Pd92	0.999277	0.875582	0.368542
Pd	Pd93	0.496785	0.123778	0.368316
Pd	Pd94	0.495851	0.374041	0.370960
Pd	Pd95	0.499063	0.629443	0.372792
Pd	Pd96	0.498006	0.877183	0.368101
C	C97	0.637810	0.391212	0.394487
C	C98	0.670691	0.509774	0.419370
O	O99	0.606105	0.587180	0.436847
O	O100	0.764478	0.528251	0.424325
H	H101	0.663159	0.312195	0.419600

M48 CH₂COO* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723

Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166133	0.000004	0.203068
Pd	Pd50	0.166060	0.250001	0.203058
Pd	Pd51	0.165570	0.499998	0.202925
Pd	Pd52	0.166061	0.750002	0.203059
Pd	Pd53	0.665960	1.000000	0.202694
Pd	Pd54	0.666067	0.249632	0.202334
Pd	Pd55	0.665559	0.500000	0.202258
Pd	Pd56	0.666068	0.750368	0.202335
Pd	Pd57	0.331261	0.125411	0.236306
Pd	Pd58	0.331016	0.375539	0.236037
Pd	Pd59	0.331014	0.624458	0.236037
Pd	Pd60	0.331261	0.874592	0.236306
Pd	Pd61	0.830981	0.125542	0.236018
Pd	Pd62	0.830819	0.376468	0.237428
Pd	Pd63	0.830818	0.623532	0.237426
Pd	Pd64	0.830981	0.874463	0.236017
Pd	Pd65	0.999585	0.999998	0.268241
Pd	Pd66	0.999745	0.250038	0.268397
Pd	Pd67	0.998205	0.499998	0.269233
Pd	Pd68	0.999746	0.749960	0.268396
Pd	Pd69	0.499337	0.999998	0.268167
Pd	Pd70	0.499242	0.250751	0.268912
Pd	Pd71	0.499010	0.499999	0.269973
Pd	Pd72	0.499240	0.749247	0.268913
Pd	Pd73	0.166193	0.125119	0.307974
Pd	Pd74	0.166277	0.375217	0.308033

Pd	Pd75	0.166276	0.624777	0.308033
Pd	Pd76	0.166193	0.874874	0.307974
Pd	Pd77	0.665948	0.123961	0.307599
Pd	Pd78	0.665509	0.373044	0.304934
Pd	Pd79	0.665504	0.626954	0.304935
Pd	Pd80	0.665947	0.876036	0.307600
Pd	Pd81	0.830900	0.750754	0.338123
Pd	Pd82	0.330582	0.999997	0.338343
Pd	Pd83	0.332623	0.251810	0.337894
Pd	Pd84	0.332836	0.499996	0.338531
Pd	Pd85	0.332628	0.748184	0.337891
Pd	Pd86	0.831454	0.999999	0.337920
Pd	Pd87	0.830897	0.249241	0.338127
Pd	Pd88	0.824510	0.499999	0.346176
Pd	Pd89	0.998277	0.125040	0.368222
Pd	Pd90	0.997421	0.375278	0.368111
Pd	Pd91	0.997423	0.624718	0.368110
Pd	Pd92	0.998277	0.874957	0.368222
Pd	Pd93	0.497883	0.123469	0.368164
Pd	Pd94	0.498853	0.370302	0.372572
Pd	Pd95	0.498852	0.629685	0.372573
Pd	Pd96	0.497887	0.876527	0.368165
C	C97	0.774462	0.500003	0.430577
C	C98	0.664065	0.499982	0.428673
O	O99	0.619090	0.396437	0.428067
O	O100	0.619067	0.603508	0.428084
H	H101	0.804954	0.416588	0.449220
H	H102	0.804930	0.583424	0.449220

M49 CH₃COO* on Pd(211)

data

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165846	0.000003	0.202911
Pd	Pd50	0.165845	0.249926	0.202877
Pd	Pd51	0.165798	0.500001	0.202848
Pd	Pd52	0.165852	0.750078	0.202878
Pd	Pd53	0.665793	0.000003	0.202926
Pd	Pd54	0.665203	0.249984	0.203096
Pd	Pd55	0.665317	0.499998	0.202976
Pd	Pd56	0.665203	0.750024	0.203096
Pd	Pd57	0.331068	0.125083	0.236156
Pd	Pd58	0.330637	0.374983	0.236132
Pd	Pd59	0.330638	0.625016	0.236131
Pd	Pd60	0.331071	0.874916	0.236158
Pd	Pd61	0.830464	0.124992	0.236197
Pd	Pd62	0.830636	0.374925	0.235936
Pd	Pd63	0.830636	0.625074	0.235936
Pd	Pd64	0.830467	0.875009	0.236198
Pd	Pd65	0.998987	0.000005	0.268462
Pd	Pd66	0.998910	0.250118	0.268416
Pd	Pd67	0.998911	0.500002	0.268413
Pd	Pd68	0.998910	0.749887	0.268415
Pd	Pd69	0.499115	0.000005	0.268178
Pd	Pd70	0.498674	0.252230	0.269928
Pd	Pd71	0.499313	0.500001	0.269436
Pd	Pd72	0.498675	0.747777	0.269927
Pd	Pd73	0.164640	0.125221	0.307546
Pd	Pd74	0.165007	0.375431	0.307854
Pd	Pd75	0.165007	0.624573	0.307852

Pd	Pd76	0.164639	0.874780	0.307544
Pd	Pd77	0.665403	0.124708	0.307927
Pd	Pd78	0.666158	0.374909	0.307688
Pd	Pd79	0.666157	0.625096	0.307682
Pd	Pd80	0.665406	0.875287	0.307928
Pd	Pd81	0.830228	0.750224	0.338389
Pd	Pd82	0.328777	0.000001	0.338194
Pd	Pd83	0.328662	0.249220	0.338230
Pd	Pd84	0.330716	0.500000	0.337703
Pd	Pd85	0.328662	0.750787	0.338231
Pd	Pd86	0.830393	0.000001	0.338465
Pd	Pd87	0.830226	0.249771	0.338390
Pd	Pd88	0.830119	0.499994	0.338279
Pd	Pd89	0.997112	0.125136	0.368391
Pd	Pd90	0.997020	0.375024	0.368387
Pd	Pd91	0.997016	0.624967	0.368386
Pd	Pd92	0.997117	0.874868	0.368391
Pd	Pd93	0.496491	0.122896	0.368080
Pd	Pd94	0.498007	0.370520	0.369279
Pd	Pd95	0.498008	0.629492	0.369284
Pd	Pd96	0.496492	0.877124	0.368079
C	C97	0.498643	0.500038	0.545695
C	C98	0.494910	0.500015	0.481436
O	O99	0.494510	0.603856	0.457065
O	O100	0.494519	0.396154	0.457073
H	H101	0.577064	0.500127	0.558867
H	H102	0.463410	0.417876	0.562687
H	H103	0.463311	0.582152	0.562668

M50 CCOOH* on Pd(211)

data

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165619	0.999827	0.202890
Pd	Pd50	0.165614	0.250017	0.202714
Pd	Pd51	0.165609	0.499983	0.202715
Pd	Pd52	0.165618	0.750171	0.202890
Pd	Pd53	0.666017	0.999848	0.202815
Pd	Pd54	0.665717	0.249956	0.203047
Pd	Pd55	0.665717	0.500043	0.203047
Pd	Pd56	0.666016	0.750153	0.202815
Pd	Pd57	0.330270	0.125058	0.235983
Pd	Pd58	0.330641	0.375004	0.235638
Pd	Pd59	0.330270	0.624943	0.235984
Pd	Pd60	0.330249	0.875000	0.236101
Pd	Pd61	0.830560	0.125559	0.237121
Pd	Pd62	0.831514	0.375000	0.236478
Pd	Pd63	0.830557	0.624437	0.237121
Pd	Pd64	0.830863	0.874996	0.236536
Pd	Pd65	0.999252	0.999994	0.268456
Pd	Pd66	0.998872	0.250109	0.269404
Pd	Pd67	0.998868	0.499890	0.269407
Pd	Pd68	0.999251	0.749998	0.268456
Pd	Pd69	0.498552	0.999831	0.268099
Pd	Pd70	0.498142	0.250479	0.269104
Pd	Pd71	0.498142	0.499521	0.269104
Pd	Pd72	0.498551	0.750169	0.268100
Pd	Pd73	0.165566	0.124894	0.307606
Pd	Pd74	0.166794	0.375005	0.307178
Pd	Pd75	0.165566	0.625109	0.307608

Pd	Pd76	0.165557	0.875001	0.308012
Pd	Pd77	0.664599	0.122025	0.307248
Pd	Pd78	0.662398	0.374998	0.307246
Pd	Pd79	0.664596	0.627966	0.307249
Pd	Pd80	0.665682	0.874994	0.308367
Pd	Pd81	0.831064	0.750155	0.338746
Pd	Pd82	0.329832	0.000035	0.338296
Pd	Pd83	0.331207	0.250700	0.337890
Pd	Pd84	0.331208	0.499306	0.337892
Pd	Pd85	0.329831	0.749969	0.338297
Pd	Pd86	0.831068	0.999830	0.338745
Pd	Pd87	0.831838	0.247378	0.343110
Pd	Pd88	0.831828	0.502606	0.343119
Pd	Pd89	0.999628	0.123320	0.369129
Pd	Pd90	0.003015	0.374997	0.369451
Pd	Pd91	0.999620	0.626665	0.369132
Pd	Pd92	0.998364	0.874990	0.368322
Pd	Pd93	0.496380	0.123148	0.368024
Pd	Pd94	0.497695	0.375008	0.372895
Pd	Pd95	0.496381	0.626859	0.368026
Pd	Pd96	0.496887	0.875004	0.368196
C	C97	0.746874	0.374983	0.374928
C	C98	0.703912	0.374921	0.432405
O	O99	0.612873	0.374914	0.442712
O	O100	0.770660	0.374871	0.475077
H	H101	0.733188	0.374773	0.510897

M51 CHCOOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166077	0.000013	0.202867
Pd	Pd50	0.166174	0.249859	0.202753
Pd	Pd51	0.165848	0.500008	0.202699
Pd	Pd52	0.166182	0.750157	0.202751
Pd	Pd53	0.665800	0.000003	0.203102
Pd	Pd54	0.665435	0.249903	0.203234
Pd	Pd55	0.665971	0.500004	0.202751
Pd	Pd56	0.665455	0.750108	0.203226
Pd	Pd57	0.331515	0.125291	0.236047
Pd	Pd58	0.331075	0.375987	0.236995
Pd	Pd59	0.331076	0.624023	0.236999
Pd	Pd60	0.331515	0.874724	0.236048
Pd	Pd61	0.830654	0.124948	0.236322
Pd	Pd62	0.830871	0.374801	0.236014
Pd	Pd63	0.830874	0.625208	0.236015
Pd	Pd64	0.830664	0.875069	0.236321
Pd	Pd65	0.999141	0.000014	0.268370
Pd	Pd66	0.998984	0.249810	0.268374
Pd	Pd67	0.999065	0.499998	0.268398
Pd	Pd68	0.998992	0.750204	0.268372
Pd	Pd69	0.499977	0.000023	0.268847
Pd	Pd70	0.499554	0.250892	0.270039
Pd	Pd71	0.500144	0.500015	0.268998
Pd	Pd72	0.499561	0.749123	0.270051
Pd	Pd73	0.165505	0.124440	0.307528
Pd	Pd74	0.164665	0.373792	0.306967
Pd	Pd75	0.164656	0.626227	0.306959
Pd	Pd76	0.165504	0.875591	0.307527
Pd	Pd77	0.666328	0.124642	0.308401

Pd	Pd78	0.667165	0.374907	0.307908
Pd	Pd79	0.667147	0.625124	0.307906
Pd	Pd80	0.666336	0.875376	0.308395
Pd	Pd81	0.831178	0.750165	0.338636
Pd	Pd82	0.331545	0.000018	0.338223
Pd	Pd83	0.330610	0.248492	0.338222
Pd	Pd84	0.326748	0.500018	0.339611
Pd	Pd85	0.330617	0.751556	0.338216
Pd	Pd86	0.831313	0.000002	0.338715
Pd	Pd87	0.831175	0.249844	0.338637
Pd	Pd88	0.831232	0.500006	0.338290
Pd	Pd89	0.998189	0.125059	0.368404
Pd	Pd90	0.998140	0.374985	0.368378
Pd	Pd91	0.998143	0.625027	0.368373
Pd	Pd92	0.998198	0.874945	0.368400
Pd	Pd93	0.498502	0.125542	0.369025
Pd	Pd94	0.498765	0.373813	0.370310
Pd	Pd95	0.498744	0.626215	0.370314
Pd	Pd96	0.498501	0.874513	0.369018
C	C97	0.485658	0.499949	0.432296
C	C98	0.387664	0.500153	0.458597
O	O99	0.305394	0.500021	0.432975
O	O100	0.387391	0.500418	0.516105
H	H101	0.548455	0.500061	0.462176
H	H102	0.317587	0.500624	0.528187

M52 CH₂COOH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166001	0.999734	0.202955
Pd	Pd50	0.166120	0.249723	0.202947
Pd	Pd51	0.165950	0.499803	0.202897
Pd	Pd52	0.165982	0.749826	0.202936
Pd	Pd53	0.666019	0.999952	0.202945
Pd	Pd54	0.665729	0.249763	0.202884
Pd	Pd55	0.665581	0.499956	0.202850
Pd	Pd56	0.665643	0.750246	0.202906
Pd	Pd57	0.331294	0.124659	0.236216
Pd	Pd58	0.331051	0.375049	0.236153
Pd	Pd59	0.331061	0.624579	0.236330
Pd	Pd60	0.331139	0.874447	0.236311
Pd	Pd61	0.830912	0.125015	0.236309
Pd	Pd62	0.831377	0.374962	0.236077
Pd	Pd63	0.831027	0.624872	0.236071
Pd	Pd64	0.830949	0.874890	0.236302
Pd	Pd65	0.999483	0.999848	0.268467
Pd	Pd66	0.999644	0.249851	0.268516
Pd	Pd67	0.999714	0.499857	0.268555
Pd	Pd68	0.999570	0.749760	0.268513
Pd	Pd69	0.499802	0.999631	0.268286
Pd	Pd70	0.499217	0.251110	0.269401
Pd	Pd71	0.499468	0.499663	0.269812
Pd	Pd72	0.499249	0.748556	0.269275
Pd	Pd73	0.165644	0.124508	0.307814
Pd	Pd74	0.166027	0.374585	0.307884
Pd	Pd75	0.165953	0.624477	0.307911
Pd	Pd76	0.165687	0.874536	0.307847
Pd	Pd77	0.666319	0.124583	0.308062
Pd	Pd78	0.667327	0.374434	0.306765

Pd	Pd79	0.666950	0.625020	0.307276
Pd	Pd80	0.666485	0.875109	0.308062
Pd	Pd81	0.831154	0.749759	0.338560
Pd	Pd82	0.330611	0.999056	0.338394
Pd	Pd83	0.331049	0.249413	0.338037
Pd	Pd84	0.331570	0.499319	0.338230
Pd	Pd85	0.330608	0.749256	0.338690
Pd	Pd86	0.831298	0.999908	0.338630
Pd	Pd87	0.831160	0.249850	0.338722
Pd	Pd88	0.831037	0.499858	0.338586
Pd	Pd89	0.998021	0.124834	0.368498
Pd	Pd90	0.998061	0.374805	0.368491
Pd	Pd91	0.997954	0.624712	0.368534
Pd	Pd92	0.998093	0.874773	0.368450
Pd	Pd93	0.497964	0.122160	0.368135
Pd	Pd94	0.501376	0.371383	0.369887
Pd	Pd95	0.500698	0.627328	0.370216
Pd	Pd96	0.498060	0.874326	0.368078
C	C97	0.519312	0.614847	0.458195
C	C98	0.583950	0.509107	0.458958
O	O99	0.555133	0.399369	0.454420
O	O100	0.681946	0.532377	0.465238
H	H101	0.444475	0.596475	0.474227
H	H102	0.553147	0.698922	0.473811
H	H103	0.717644	0.455869	0.458172

M53 CH₃COOH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165803	0.999907	0.202982
Pd	Pd50	0.165884	0.249930	0.202918
Pd	Pd51	0.165884	0.500051	0.202917
Pd	Pd52	0.165796	0.750076	0.202983
Pd	Pd53	0.665860	0.999999	0.203013
Pd	Pd54	0.665567	0.249780	0.202971
Pd	Pd55	0.665573	0.500201	0.202971
Pd	Pd56	0.665863	0.749993	0.203011
Pd	Pd57	0.330804	0.125061	0.236178
Pd	Pd58	0.330685	0.374993	0.236012
Pd	Pd59	0.330795	0.624932	0.236174
Pd	Pd60	0.330815	0.875001	0.236224
Pd	Pd61	0.830752	0.124987	0.236157
Pd	Pd62	0.831026	0.374996	0.235918
Pd	Pd63	0.830752	0.624999	0.236157
Pd	Pd64	0.830643	0.874996	0.236312
Pd	Pd65	0.999063	0.999998	0.268449
Pd	Pd66	0.999494	0.250056	0.268491
Pd	Pd67	0.999494	0.499919	0.268491
Pd	Pd68	0.999063	0.749963	0.268450
Pd	Pd69	0.499336	0.000189	0.268329
Pd	Pd70	0.499053	0.251336	0.269355
Pd	Pd71	0.499056	0.498666	0.269345
Pd	Pd72	0.499335	0.749802	0.268325
Pd	Pd73	0.165091	0.124830	0.307906
Pd	Pd74	0.165788	0.374987	0.307924
Pd	Pd75	0.165085	0.625118	0.307909
Pd	Pd76	0.165101	0.874972	0.308017
Pd	Pd77	0.665801	0.124975	0.308079
Pd	Pd78	0.666535	0.374983	0.307280

Pd	Pd79	0.665807	0.625004	0.308073
Pd	Pd80	0.665344	0.874980	0.308206
Pd	Pd81	0.830478	0.750013	0.338487
Pd	Pd82	0.329920	0.999954	0.338335
Pd	Pd83	0.330660	0.249966	0.337987
Pd	Pd84	0.330675	0.500002	0.337984
Pd	Pd85	0.329919	0.750012	0.338334
Pd	Pd86	0.830478	0.999960	0.338484
Pd	Pd87	0.831147	0.249781	0.338216
Pd	Pd88	0.831148	0.500197	0.338221
Pd	Pd89	0.997374	0.124783	0.368453
Pd	Pd90	0.997821	0.374987	0.368449
Pd	Pd91	0.997376	0.625190	0.368457
Pd	Pd92	0.997145	0.874991	0.368446
Pd	Pd93	0.497112	0.123070	0.367961
Pd	Pd94	0.501055	0.374903	0.370097
Pd	Pd95	0.497116	0.626891	0.367952
Pd	Pd96	0.496990	0.874981	0.368301
C	C97	0.632754	0.376731	0.543390
C	C98	0.614818	0.375728	0.480566
O	O99	0.529098	0.375528	0.460319
O	O100	0.697417	0.375190	0.449955
H	H101	0.677203	0.296745	0.555257
H	H102	0.676458	0.457672	0.554703
H	H103	0.562067	0.376658	0.566284
H	H104	0.682263	0.374772	0.407792

M54 CCOHOH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165772	0.999801	0.202800
Pd	Pd50	0.166083	0.249951	0.202599
Pd	Pd51	0.166098	0.500046	0.202589
Pd	Pd52	0.165779	0.750203	0.202791
Pd	Pd53	0.666105	0.999951	0.203119
Pd	Pd54	0.665934	0.249924	0.203244
Pd	Pd55	0.665932	0.500139	0.203240
Pd	Pd56	0.666103	0.750106	0.203113
Pd	Pd57	0.330407	0.124579	0.235950
Pd	Pd58	0.330838	0.374984	0.235940
Pd	Pd59	0.330419	0.625410	0.235940
Pd	Pd60	0.330647	0.874996	0.236092
Pd	Pd61	0.830614	0.125176	0.237343
Pd	Pd62	0.831851	0.375036	0.236296
Pd	Pd63	0.830637	0.624938	0.237317
Pd	Pd64	0.830895	0.875062	0.236755
Pd	Pd65	0.999578	0.999822	0.268500
Pd	Pd66	0.999443	0.249813	0.268964
Pd	Pd67	0.999495	0.500261	0.268958
Pd	Pd68	0.999598	0.750233	0.268506
Pd	Pd69	0.499138	0.999741	0.268454
Pd	Pd70	0.498321	0.249164	0.268457
Pd	Pd71	0.498321	0.500853	0.268457
Pd	Pd72	0.499153	0.750263	0.268452
Pd	Pd73	0.165674	0.124417	0.307566
Pd	Pd74	0.166341	0.374992	0.306950
Pd	Pd75	0.165733	0.625580	0.307551
Pd	Pd76	0.165984	0.874993	0.307966
Pd	Pd77	0.664836	0.122013	0.308593

Pd	Pd78	0.661966	0.375059	0.307015
Pd	Pd79	0.664857	0.628119	0.308577
Pd	Pd80	0.665956	0.875057	0.308743
Pd	Pd81	0.831458	0.750838	0.339307
Pd	Pd82	0.330432	0.999749	0.338308
Pd	Pd83	0.329748	0.249440	0.338048
Pd	Pd84	0.329760	0.500534	0.338039
Pd	Pd85	0.330460	0.750231	0.338300
Pd	Pd86	0.831427	0.999375	0.339309
Pd	Pd87	0.832767	0.246310	0.342309
Pd	Pd88	0.832896	0.503973	0.342183
Pd	Pd89	0.000175	0.123411	0.369038
Pd	Pd90	0.002800	0.375072	0.368811
Pd	Pd91	0.000275	0.626745	0.369050
Pd	Pd92	0.999047	0.875091	0.368469
Pd	Pd93	0.496403	0.124376	0.368701
Pd	Pd94	0.493619	0.375010	0.368601
Pd	Pd95	0.496432	0.625637	0.368705
Pd	Pd96	0.497540	0.874998	0.368680
C	C97	0.749511	0.375278	0.374704
C	C98	0.700379	0.375738	0.428556
O	O99	0.679739	0.476315	0.456927
O	O100	0.679071	0.275500	0.457064
H	H101	0.693756	0.205849	0.431438
H	H102	0.695150	0.545711	0.431261

M55 CHCOHOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165949	0.999986	0.202981
Pd	Pd50	0.166400	0.250089	0.202893
Pd	Pd51	0.166078	0.500002	0.202874
Pd	Pd52	0.166418	0.749915	0.202902
Pd	Pd53	0.665651	0.000029	0.203130
Pd	Pd54	0.665350	0.250014	0.203273
Pd	Pd55	0.665743	0.500007	0.202977
Pd	Pd56	0.665329	0.750006	0.203279
Pd	Pd57	0.331299	0.125034	0.235854
Pd	Pd58	0.331245	0.376012	0.237013
Pd	Pd59	0.331250	0.623982	0.237007
Pd	Pd60	0.331300	0.874984	0.235858
Pd	Pd61	0.830337	0.124893	0.236284
Pd	Pd62	0.830862	0.374916	0.235891
Pd	Pd63	0.830845	0.625109	0.235891
Pd	Pd64	0.830326	0.875141	0.236281
Pd	Pd65	0.998770	0.000020	0.268395
Pd	Pd66	0.998824	0.249901	0.268308
Pd	Pd67	0.999192	0.500044	0.268447
Pd	Pd68	0.998823	0.750159	0.268318
Pd	Pd69	0.499813	0.000001	0.268905
Pd	Pd70	0.499487	0.250549	0.269873
Pd	Pd71	0.499617	0.499998	0.269731
Pd	Pd72	0.499481	0.749440	0.269872
Pd	Pd73	0.165055	0.124706	0.307712
Pd	Pd74	0.164660	0.374361	0.307334
Pd	Pd75	0.164685	0.625620	0.307346
Pd	Pd76	0.165067	0.875282	0.307702
Pd	Pd77	0.665567	0.124883	0.308566
Pd	Pd78	0.665507	0.375098	0.308057

Pd	Pd79	0.665517	0.624971	0.308062
Pd	Pd80	0.665573	0.875185	0.308554
Pd	Pd81	0.830326	0.749856	0.338317
Pd	Pd82	0.330736	0.000024	0.338161
Pd	Pd83	0.330232	0.248367	0.337577
Pd	Pd84	0.325334	0.500029	0.342343
Pd	Pd85	0.330249	0.751642	0.337575
Pd	Pd86	0.830298	0.000052	0.338686
Pd	Pd87	0.830330	0.250209	0.338311
Pd	Pd88	0.830523	0.500022	0.338048
Pd	Pd89	0.997144	0.125030	0.368342
Pd	Pd90	0.997599	0.374824	0.368452
Pd	Pd91	0.997616	0.625256	0.368448
Pd	Pd92	0.997142	0.875108	0.368356
Pd	Pd93	0.497008	0.125199	0.369209
Pd	Pd94	0.495710	0.373205	0.372116
Pd	Pd95	0.495729	0.626741	0.372131
Pd	Pd96	0.496989	0.874763	0.369208
C	C97	0.442740	0.500005	0.425728
C	C98	0.334132	0.500003	0.435414
O	O99	0.286949	0.599984	0.455448
O	O100	0.286769	0.400110	0.455382
H	H101	0.488243	0.499886	0.465091
H	H102	0.319721	0.328356	0.438180
H	H103	0.320186	0.671648	0.438364

M56 CH₂COHOH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166191	0.999858	0.203018
Pd	Pd50	0.166059	0.249803	0.202986
Pd	Pd51	0.165859	0.499855	0.202913
Pd	Pd52	0.166053	0.749944	0.202950
Pd	Pd53	0.665924	0.999724	0.203012
Pd	Pd54	0.665484	0.249555	0.202899
Pd	Pd55	0.665827	0.500126	0.202707
Pd	Pd56	0.665471	0.750107	0.203174
Pd	Pd57	0.331470	0.124997	0.236390
Pd	Pd58	0.330960	0.375005	0.236306
Pd	Pd59	0.331060	0.624438	0.236234
Pd	Pd60	0.331516	0.874259	0.236400
Pd	Pd61	0.830649	0.124900	0.236303
Pd	Pd62	0.830852	0.374874	0.236133
Pd	Pd63	0.830698	0.624984	0.236248
Pd	Pd64	0.830725	0.874840	0.236362
Pd	Pd65	0.999116	0.999909	0.268407
Pd	Pd66	0.999392	0.250017	0.268481
Pd	Pd67	0.999345	0.499880	0.268625
Pd	Pd68	0.999326	0.749756	0.268472
Pd	Pd69	0.499659	0.999302	0.268335
Pd	Pd70	0.499381	0.250936	0.269647
Pd	Pd71	0.499707	0.499446	0.269084
Pd	Pd72	0.499471	0.747742	0.269899
Pd	Pd73	0.165311	0.124448	0.307750
Pd	Pd74	0.165776	0.374685	0.307904
Pd	Pd75	0.165644	0.624951	0.307768
Pd	Pd76	0.165453	0.874956	0.307755
Pd	Pd77	0.665849	0.124429	0.308272
Pd	Pd78	0.666197	0.374632	0.306962

Pd	Pd79	0.666238	0.624859	0.307986
Pd	Pd80	0.665940	0.875060	0.308404
Pd	Pd81	0.830854	0.749734	0.338609
Pd	Pd82	0.330615	0.999643	0.338459
Pd	Pd83	0.330787	0.250236	0.338458
Pd	Pd84	0.330710	0.499574	0.338767
Pd	Pd85	0.331041	0.748733	0.338365
Pd	Pd86	0.830797	0.999939	0.338630
Pd	Pd87	0.830750	0.249877	0.338521
Pd	Pd88	0.830574	0.499758	0.338835
Pd	Pd89	0.997568	0.124923	0.368455
Pd	Pd90	0.997530	0.374751	0.368525
Pd	Pd91	0.997641	0.624879	0.368560
Pd	Pd92	0.997724	0.874889	0.368398
Pd	Pd93	0.497388	0.123615	0.368281
Pd	Pd94	0.500217	0.374413	0.371474
Pd	Pd95	0.500336	0.623774	0.370887
Pd	Pd96	0.497498	0.875149	0.368498
C	C97	0.550896	0.542081	0.446452
C	C98	0.568659	0.411385	0.451192
O	O99	0.510148	0.349833	0.488876
O	O100	0.661348	0.361214	0.448124
H	H101	0.491723	0.572293	0.475261
H	H102	0.620175	0.594749	0.448997
H	H103	0.530722	0.264178	0.488244
H	H104	0.696996	0.390398	0.413525

M57 CH₃COHOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165718	0.999977	0.203040
Pd	Pd50	0.165734	0.250047	0.203007
Pd	Pd51	0.165731	0.499973	0.203006
Pd	Pd52	0.165726	0.750032	0.203041
Pd	Pd53	0.665773	0.999910	0.202911
Pd	Pd54	0.665378	0.249771	0.202842
Pd	Pd55	0.665396	0.500200	0.202822
Pd	Pd56	0.665770	0.750124	0.202884
Pd	Pd57	0.330537	0.125284	0.236183
Pd	Pd58	0.330568	0.375018	0.236346
Pd	Pd59	0.330522	0.624757	0.236175
Pd	Pd60	0.330443	0.875028	0.236185
Pd	Pd61	0.830436	0.125178	0.236330
Pd	Pd62	0.829964	0.374997	0.236455
Pd	Pd63	0.830452	0.624802	0.236324
Pd	Pd64	0.830414	0.874985	0.236316
Pd	Pd65	0.998665	0.999969	0.268426
Pd	Pd66	0.998572	0.250122	0.268491
Pd	Pd67	0.998569	0.499876	0.268498
Pd	Pd68	0.998683	0.750024	0.268435
Pd	Pd69	0.498729	0.000190	0.268358
Pd	Pd70	0.498688	0.250268	0.269137
Pd	Pd71	0.498702	0.499837	0.269110
Pd	Pd72	0.498707	0.749873	0.268362
Pd	Pd73	0.164440	0.124757	0.307877
Pd	Pd74	0.164785	0.375004	0.308043
Pd	Pd75	0.164454	0.625243	0.307894
Pd	Pd76	0.164909	0.875000	0.308130
Pd	Pd77	0.665204	0.124428	0.307601

Pd	Pd78	0.664639	0.375018	0.307327
Pd	Pd79	0.665229	0.625637	0.307485
Pd	Pd80	0.664870	0.875022	0.308088
Pd	Pd81	0.829546	0.749870	0.338584
Pd	Pd82	0.329981	0.000551	0.338189
Pd	Pd83	0.329766	0.250332	0.338563
Pd	Pd84	0.329785	0.499738	0.338541
Pd	Pd85	0.330020	0.749509	0.338168
Pd	Pd86	0.829552	0.000113	0.338582
Pd	Pd87	0.828999	0.250266	0.339145
Pd	Pd88	0.828960	0.499728	0.339177
Pd	Pd89	0.996049	0.125160	0.368305
Pd	Pd90	0.995887	0.374995	0.368355
Pd	Pd91	0.996046	0.624820	0.368312
Pd	Pd92	0.996264	0.874996	0.368269
Pd	Pd93	0.496959	0.123751	0.368591
Pd	Pd94	0.499288	0.375128	0.371114
Pd	Pd95	0.497006	0.626545	0.368610
Pd	Pd96	0.496478	0.875120	0.368268
C	C97	0.501008	0.377793	0.492191
C	C98	0.579638	0.377803	0.446426
O	O99	0.634171	0.271477	0.446791
O	O100	0.632692	0.485382	0.446037
H	H101	0.537891	0.379167	0.534085
H	H102	0.455223	0.295537	0.489166
H	H103	0.453831	0.458729	0.488406
H	H104	0.683967	0.271954	0.415503
H	H105	0.682925	0.484626	0.414968

M58 CCHOO* on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165573	0.000002	0.202625
Pd	Pd50	0.165883	0.249990	0.202709
Pd	Pd51	0.166114	0.499999	0.202464
Pd	Pd52	0.165883	0.750010	0.202711
Pd	Pd53	0.665934	0.000000	0.202709
Pd	Pd54	0.665706	0.250994	0.203558
Pd	Pd55	0.664791	0.500002	0.203720
Pd	Pd56	0.665706	0.749007	0.203556
Pd	Pd57	0.330762	0.125054	0.235919
Pd	Pd58	0.331077	0.375469	0.235833
Pd	Pd59	0.331076	0.624536	0.235833
Pd	Pd60	0.330763	0.874950	0.235919
Pd	Pd61	0.830604	0.125286	0.236023
Pd	Pd62	0.830350	0.375386	0.236900
Pd	Pd63	0.830349	0.624621	0.236899
Pd	Pd64	0.830603	0.874719	0.236023
Pd	Pd65	0.998620	0.000005	0.268185
Pd	Pd66	0.999307	0.249847	0.268379
Pd	Pd67	0.998157	0.500002	0.268893
Pd	Pd68	0.999302	0.750154	0.268379
Pd	Pd69	0.498987	0.000003	0.268031
Pd	Pd70	0.499205	0.250929	0.269271
Pd	Pd71	0.497640	0.500004	0.270727
Pd	Pd72	0.499206	0.749077	0.269272
Pd	Pd73	0.164797	0.124724	0.307131
Pd	Pd74	0.165807	0.375492	0.306950
Pd	Pd75	0.165807	0.624510	0.306950

Pd	Pd76	0.164798	0.875276	0.307130
Pd	Pd77	0.665992	0.124513	0.307570
Pd	Pd78	0.663565	0.373357	0.310982
Pd	Pd79	0.663566	0.626664	0.310981
Pd	Pd80	0.665992	0.875494	0.307571
Pd	Pd81	0.833059	0.752749	0.338739
Pd	Pd82	0.328855	0.000002	0.337853
Pd	Pd83	0.330153	0.250341	0.336951
Pd	Pd84	0.331003	0.500005	0.339088
Pd	Pd85	0.330155	0.749666	0.336953
Pd	Pd86	0.831344	0.000006	0.337834
Pd	Pd87	0.833057	0.247262	0.338736
Pd	Pd88	0.833181	0.500004	0.343697
Pd	Pd89	0.999622	0.123991	0.368619
Pd	Pd90	0.000218	0.373813	0.368525
Pd	Pd91	0.000224	0.626202	0.368525
Pd	Pd92	0.999624	0.876022	0.368620
Pd	Pd93	0.496572	0.121912	0.368182
Pd	Pd94	0.490178	0.365234	0.373590
Pd	Pd95	0.490183	0.634774	0.373592
Pd	Pd96	0.496572	0.878092	0.368180
C	C97	0.695936	0.500013	0.367580
C	C98	0.647350	0.499997	0.427901
O	O99	0.592476	0.393940	0.433693
O	O100	0.592467	0.606040	0.433701
H	H101	0.706543	0.499990	0.460910

M59 CHCHOO* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166229	0.000038	0.202718
Pd	Pd50	0.166205	0.250072	0.202701
Pd	Pd51	0.165249	0.499875	0.203023
Pd	Pd52	0.166140	0.750050	0.202697
Pd	Pd53	0.666003	0.999256	0.202314
Pd	Pd54	0.665597	0.249825	0.202362
Pd	Pd55	0.665396	0.499652	0.203566
Pd	Pd56	0.665913	0.748306	0.204386
Pd	Pd57	0.331476	0.125785	0.236109
Pd	Pd58	0.331868	0.375529	0.236023
Pd	Pd59	0.331270	0.624245	0.235955
Pd	Pd60	0.331460	0.874812	0.236084
Pd	Pd61	0.831295	0.125914	0.236122
Pd	Pd62	0.832221	0.375456	0.236288
Pd	Pd63	0.832030	0.624980	0.235913
Pd	Pd64	0.831341	0.876066	0.235860
Pd	Pd65	0.000011	0.000612	0.268390
Pd	Pd66	0.000351	0.250500	0.268595
Pd	Pd67	0.997921	0.500391	0.270192
Pd	Pd68	0.001011	0.750749	0.268328
Pd	Pd69	0.499576	0.000313	0.268015
Pd	Pd70	0.499901	0.251265	0.269977
Pd	Pd71	0.500670	0.500500	0.270486
Pd	Pd72	0.498955	0.749760	0.269163
Pd	Pd73	0.166259	0.125091	0.307300
Pd	Pd74	0.167576	0.374892	0.307278
Pd	Pd75	0.166837	0.625398	0.307102
Pd	Pd76	0.166816	0.875791	0.307307
Pd	Pd77	0.667085	0.122534	0.306524

Pd	Pd78	0.670288	0.371257	0.306446
Pd	Pd79	0.667599	0.631187	0.308343
Pd	Pd80	0.667018	0.878402	0.308377
Pd	Pd81	0.836228	0.755432	0.337056
Pd	Pd82	0.330775	0.000762	0.338290
Pd	Pd83	0.332467	0.250989	0.338117
Pd	Pd84	0.332578	0.498933	0.338189
Pd	Pd85	0.331596	0.749907	0.337696
Pd	Pd86	0.833663	0.002278	0.338391
Pd	Pd87	0.834682	0.250220	0.339169
Pd	Pd88	0.835536	0.503910	0.341709
Pd	Pd89	0.000946	0.126245	0.368855
Pd	Pd90	0.002841	0.376060	0.369171
Pd	Pd91	0.003662	0.628371	0.369288
Pd	Pd92	0.001658	0.877706	0.368836
Pd	Pd93	0.497815	0.121661	0.368241
Pd	Pd94	0.502507	0.368158	0.375118
Pd	Pd95	0.495003	0.633527	0.371193
Pd	Pd96	0.498306	0.877221	0.368332
C	C97	0.651283	0.359587	0.390137
C	C98	0.661358	0.478276	0.422487
O	O99	0.559540	0.515549	0.429417
O	O100	0.719058	0.566766	0.395520
H	H101	0.673464	0.275939	0.412592
H	H102	0.691881	0.465160	0.465900

M60 CH₂CHOO* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165607	0.000003	0.202859
Pd	Pd50	0.165972	0.249902	0.202803
Pd	Pd51	0.166051	0.499999	0.202578
Pd	Pd52	0.165972	0.750098	0.202802
Pd	Pd53	0.665494	0.999995	0.202606
Pd	Pd54	0.665903	0.251747	0.204175
Pd	Pd55	0.665613	0.499998	0.203967
Pd	Pd56	0.665903	0.748249	0.204178
Pd	Pd57	0.330501	0.125267	0.236088
Pd	Pd58	0.331410	0.375363	0.235905
Pd	Pd59	0.331409	0.624638	0.235906
Pd	Pd60	0.330503	0.874735	0.236086
Pd	Pd61	0.830187	0.124989	0.236000
Pd	Pd62	0.831799	0.375590	0.236704
Pd	Pd63	0.831798	0.624409	0.236705
Pd	Pd64	0.830188	0.875007	0.236002
Pd	Pd65	0.998313	0.999998	0.268116
Pd	Pd66	0.999352	0.249526	0.268210
Pd	Pd67	0.999146	0.499999	0.268782
Pd	Pd68	0.999351	0.750470	0.268209
Pd	Pd69	0.498327	0.999994	0.268206
Pd	Pd70	0.498882	0.250016	0.268972
Pd	Pd71	0.499612	0.499998	0.270351
Pd	Pd72	0.498883	0.749979	0.268973
Pd	Pd73	0.164208	0.124466	0.307574
Pd	Pd74	0.164461	0.374419	0.307049
Pd	Pd75	0.164461	0.625584	0.307050
Pd	Pd76	0.164208	0.875534	0.307574
Pd	Pd77	0.664734	0.122572	0.308185
Pd	Pd78	0.668143	0.371314	0.308465

Pd	Pd79	0.668140	0.628676	0.308471
Pd	Pd80	0.664734	0.877422	0.308189
Pd	Pd81	0.832606	0.751809	0.337887
Pd	Pd82	0.328079	1.000000	0.337941
Pd	Pd83	0.328554	0.251155	0.337730
Pd	Pd84	0.326439	0.499999	0.337946
Pd	Pd85	0.328556	0.748846	0.337730
Pd	Pd86	0.831046	0.999996	0.338213
Pd	Pd87	0.832607	0.248186	0.337883
Pd	Pd88	0.833124	0.500003	0.342164
Pd	Pd89	0.997993	0.124385	0.368663
Pd	Pd90	0.999583	0.374281	0.368503
Pd	Pd91	0.999581	0.625717	0.368503
Pd	Pd92	0.997993	0.875609	0.368665
Pd	Pd93	0.493981	0.124051	0.368127
Pd	Pd94	0.485059	0.371913	0.372198
Pd	Pd95	0.485060	0.628080	0.372201
Pd	Pd96	0.493983	0.875948	0.368128
C	C97	0.779194	0.499983	0.424126
C	C98	0.666327	0.499972	0.422445
O	O99	0.632406	0.391333	0.396476
O	O100	0.632395	0.608594	0.396488
H	H101	0.807472	0.417496	0.445049
H	H102	0.807470	0.582451	0.445065
H	H103	0.634932	0.499949	0.466232

M61 CH₃CHOO* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165711	0.999965	0.202651
Pd	Pd50	0.165933	0.249906	0.202646
Pd	Pd51	0.165259	0.500020	0.202808
Pd	Pd52	0.165952	0.750086	0.202632
Pd	Pd53	0.665605	0.000123	0.202983
Pd	Pd54	0.665565	0.250897	0.204185
Pd	Pd55	0.666091	0.500120	0.202542
Pd	Pd56	0.665545	0.749288	0.204233
Pd	Pd57	0.330721	0.124976	0.235998
Pd	Pd58	0.330865	0.375429	0.235986
Pd	Pd59	0.330912	0.624656	0.235982
Pd	Pd60	0.330757	0.874956	0.236028
Pd	Pd61	0.830681	0.125084	0.236245
Pd	Pd62	0.832168	0.375401	0.235798
Pd	Pd63	0.832161	0.624834	0.235835
Pd	Pd64	0.830713	0.875116	0.236273
Pd	Pd65	0.999053	0.000060	0.268364
Pd	Pd66	0.000320	0.250174	0.268565
Pd	Pd67	0.999548	0.500069	0.270284
Pd	Pd68	0.000377	0.749913	0.268568
Pd	Pd69	0.498987	0.000075	0.268317
Pd	Pd70	0.497739	0.249559	0.269197
Pd	Pd71	0.499348	0.500049	0.269272
Pd	Pd72	0.497688	0.750565	0.269252
Pd	Pd73	0.166039	0.124027	0.307319
Pd	Pd74	0.166852	0.374152	0.306950
Pd	Pd75	0.166972	0.625899	0.306946
Pd	Pd76	0.166114	0.875809	0.307329
Pd	Pd77	0.666339	0.122329	0.308818
Pd	Pd78	0.665672	0.368190	0.306018

Pd	Pd79	0.665665	0.632611	0.306114
Pd	Pd80	0.666424	0.878413	0.308778
Pd	Pd81	0.834736	0.751580	0.338001
Pd	Pd82	0.330590	0.999922	0.338484
Pd	Pd83	0.330501	0.249291	0.337800
Pd	Pd84	0.328977	0.500185	0.338371
Pd	Pd85	0.330802	0.750549	0.337946
Pd	Pd86	0.832965	0.000313	0.338706
Pd	Pd87	0.834740	0.248978	0.337930
Pd	Pd88	0.843452	0.500290	0.339635
Pd	Pd89	0.000730	0.124285	0.368765
Pd	Pd90	0.005762	0.372845	0.370054
Pd	Pd91	0.005855	0.627564	0.370043
Pd	Pd92	0.000775	0.876099	0.368744
Pd	Pd93	0.497873	0.123189	0.368830
Pd	Pd94	0.492235	0.368406	0.370389
Pd	Pd95	0.493512	0.631250	0.370509
Pd	Pd96	0.497915	0.877015	0.368795
C	C97	0.694886	0.384763	0.461170
C	C98	0.658026	0.497502	0.430321
O	O99	0.554275	0.499454	0.426379
O	O100	0.699766	0.501002	0.373687
H	H101	0.671382	0.303178	0.437457
H	H102	0.663578	0.381395	0.504244
H	H103	0.776394	0.385985	0.463669
H	H104	0.682662	0.582250	0.451462

M62 CCHOOH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165657	0.000012	0.202636
Pd	Pd50	0.165809	0.249685	0.202599
Pd	Pd51	0.166285	0.499963	0.202343
Pd	Pd52	0.165706	0.750304	0.202606
Pd	Pd53	0.665967	0.000026	0.202978
Pd	Pd54	0.665606	0.250883	0.203900
Pd	Pd55	0.665151	0.499880	0.203689
Pd	Pd56	0.665559	0.749186	0.203709
Pd	Pd57	0.330894	0.124841	0.235939
Pd	Pd58	0.330862	0.374969	0.235697
Pd	Pd59	0.330757	0.625008	0.235688
Pd	Pd60	0.330844	0.875162	0.235929
Pd	Pd61	0.830732	0.125096	0.236218
Pd	Pd62	0.830602	0.375053	0.236785
Pd	Pd63	0.830616	0.624882	0.236714
Pd	Pd64	0.830685	0.874659	0.236293
Pd	Pd65	0.999155	0.999928	0.268311
Pd	Pd66	0.999478	0.249664	0.268486
Pd	Pd67	0.998862	0.499905	0.268762
Pd	Pd68	0.999208	0.750164	0.268521
Pd	Pd69	0.499350	0.999981	0.268369
Pd	Pd70	0.498906	0.250644	0.269462
Pd	Pd71	0.497560	0.499955	0.269694
Pd	Pd72	0.498773	0.749281	0.269471
Pd	Pd73	0.165538	0.124223	0.307334
Pd	Pd74	0.165443	0.374393	0.306604
Pd	Pd75	0.165190	0.625639	0.306562
Pd	Pd76	0.165446	0.875803	0.307305
Pd	Pd77	0.666300	0.124314	0.308250

Pd	Pd78	0.663532	0.372343	0.311803
Pd	Pd79	0.663413	0.627589	0.310886
Pd	Pd80	0.666149	0.875413	0.308095
Pd	Pd81	0.833133	0.752303	0.339181
Pd	Pd82	0.330218	0.000025	0.338353
Pd	Pd83	0.330374	0.249759	0.337279
Pd	Pd84	0.327946	0.500002	0.337911
Pd	Pd85	0.330113	0.750388	0.337195
Pd	Pd86	0.831885	0.999794	0.338061
Pd	Pd87	0.833688	0.247047	0.338916
Pd	Pd88	0.835558	0.499778	0.342325
Pd	Pd89	0.000232	0.123698	0.368756
Pd	Pd90	0.001104	0.373586	0.368674
Pd	Pd91	0.000998	0.625948	0.368699
Pd	Pd92	0.000107	0.875794	0.368681
Pd	Pd93	0.497532	0.122826	0.368647
Pd	Pd94	0.491816	0.367982	0.371943
Pd	Pd95	0.490675	0.631806	0.372036
Pd	Pd96	0.497490	0.876998	0.368685
C	C97	0.698550	0.500493	0.366371
C	C98	0.659913	0.503365	0.427052
O	O99	0.554336	0.499401	0.426587
O	O100	0.694008	0.612124	0.452576
H	H101	0.686882	0.422395	0.450489
H	H102	0.682144	0.606164	0.493394

M63 CHCHOOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166171	0.999150	0.202792
Pd	Pd50	0.166073	0.249473	0.202856
Pd	Pd51	0.165353	0.499464	0.202890
Pd	Pd52	0.166255	0.749552	0.202753
Pd	Pd53	0.666034	0.000624	0.202548
Pd	Pd54	0.665740	0.251241	0.203719
Pd	Pd55	0.665532	0.499228	0.203440
Pd	Pd56	0.665842	0.750587	0.202281
Pd	Pd57	0.331167	0.124436	0.236081
Pd	Pd58	0.331441	0.374590	0.236179
Pd	Pd59	0.331242	0.623697	0.235962
Pd	Pd60	0.331599	0.873681	0.236439
Pd	Pd61	0.831035	0.125717	0.236127
Pd	Pd62	0.830492	0.376300	0.237393
Pd	Pd63	0.831473	0.625279	0.236183
Pd	Pd64	0.831237	0.875619	0.235792
Pd	Pd65	0.999590	0.000159	0.268404
Pd	Pd66	0.999740	0.250189	0.268395
Pd	Pd67	0.998439	0.500197	0.269316
Pd	Pd68	0.000630	0.750432	0.268398
Pd	Pd69	0.499730	0.999347	0.268135
Pd	Pd70	0.500219	0.249301	0.269083
Pd	Pd71	0.500383	0.499565	0.269565
Pd	Pd72	0.499524	0.748165	0.269385
Pd	Pd73	0.165104	0.123251	0.307205
Pd	Pd74	0.166783	0.374516	0.307366
Pd	Pd75	0.166926	0.624875	0.307280
Pd	Pd76	0.166722	0.873885	0.307732
Pd	Pd77	0.666588	0.123693	0.307355
Pd	Pd78	0.667735	0.376840	0.312910

Pd	Pd79	0.667586	0.629176	0.305213
Pd	Pd80	0.667189	0.876442	0.307661
Pd	Pd81	0.833743	0.753202	0.337579
Pd	Pd82	0.330687	0.998442	0.338295
Pd	Pd83	0.329999	0.248407	0.338003
Pd	Pd84	0.332399	0.499125	0.338306
Pd	Pd85	0.334044	0.746790	0.338236
Pd	Pd86	0.832382	0.000996	0.338415
Pd	Pd87	0.833607	0.249591	0.338560
Pd	Pd88	0.833031	0.503562	0.341208
Pd	Pd89	0.999644	0.125413	0.368690
Pd	Pd90	0.000848	0.375101	0.368544
Pd	Pd91	0.001892	0.627175	0.368706
Pd	Pd92	0.000037	0.876669	0.368634
Pd	Pd93	0.496705	0.121658	0.368414
Pd	Pd94	0.494785	0.369426	0.371224
Pd	Pd95	0.504668	0.627530	0.371165
Pd	Pd96	0.499126	0.875947	0.368123
C	C97	0.636797	0.370918	0.396517
C	C98	0.655156	0.476336	0.437372
O	O99	0.586799	0.567382	0.438209
O	O100	0.757238	0.526102	0.426921
H	H101	0.661195	0.282920	0.414288
H	H102	0.660379	0.438439	0.481117
H	H103	0.748283	0.614522	0.430423

M64 CH₂CHOOH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165899	0.999910	0.202877
Pd	Pd50	0.166062	0.250363	0.202897
Pd	Pd51	0.166025	0.499902	0.202915
Pd	Pd52	0.166039	0.749585	0.202822
Pd	Pd53	0.665964	0.999894	0.202862
Pd	Pd54	0.665721	0.250057	0.203017
Pd	Pd55	0.665596	0.499918	0.202921
Pd	Pd56	0.665339	0.749888	0.203142
Pd	Pd57	0.330911	0.125187	0.235799
Pd	Pd58	0.330663	0.375919	0.237217
Pd	Pd59	0.330667	0.623809	0.237245
Pd	Pd60	0.330930	0.874503	0.235872
Pd	Pd61	0.830596	0.124942	0.236230
Pd	Pd62	0.830885	0.374908	0.235978
Pd	Pd63	0.830440	0.625124	0.235977
Pd	Pd64	0.830606	0.874972	0.236206
Pd	Pd65	0.998913	0.000013	0.268417
Pd	Pd66	0.999008	0.250099	0.268410
Pd	Pd67	0.998973	0.499969	0.268340
Pd	Pd68	0.998810	0.749885	0.268354
Pd	Pd69	0.499401	0.999840	0.267957
Pd	Pd70	0.499241	0.250781	0.268901
Pd	Pd71	0.499150	0.499700	0.269744
Pd	Pd72	0.498784	0.748607	0.269556
Pd	Pd73	0.164585	0.125040	0.307513
Pd	Pd74	0.164848	0.375168	0.307893
Pd	Pd75	0.164507	0.624929	0.307662
Pd	Pd76	0.164707	0.874703	0.307506
Pd	Pd77	0.665720	0.124532	0.307914
Pd	Pd78	0.665784	0.374715	0.307623

Pd	Pd79	0.665020	0.624798	0.307927
Pd	Pd80	0.665716	0.875090	0.307884
Pd	Pd81	0.830100	0.749857	0.338363
Pd	Pd82	0.329339	0.999878	0.337573
Pd	Pd83	0.328997	0.248479	0.337613
Pd	Pd84	0.328111	0.499944	0.342584
Pd	Pd85	0.328812	0.751336	0.337746
Pd	Pd86	0.830596	0.999914	0.338526
Pd	Pd87	0.830309	0.249863	0.338385
Pd	Pd88	0.830071	0.499912	0.338144
Pd	Pd89	0.997234	0.125002	0.368481
Pd	Pd90	0.997110	0.374977	0.368359
Pd	Pd91	0.996919	0.624882	0.368384
Pd	Pd92	0.997221	0.874742	0.368391
Pd	Pd93	0.497057	0.122777	0.367730
Pd	Pd94	0.497461	0.369754	0.368265
Pd	Pd95	0.496862	0.630905	0.369448
Pd	Pd96	0.496986	0.877382	0.367935
C	C97	0.303298	0.504529	0.428943
C	C98	0.397435	0.516838	0.464027
O	O99	0.458287	0.612057	0.452109
O	O100	0.452344	0.397120	0.458290
H	H101	0.261694	0.421263	0.439065
H	H102	0.256365	0.585313	0.435220
H	H103	0.377735	0.520926	0.510001
H	H104	0.513287	0.408146	0.480332

M65 CH₃CHOOH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165830	0.999977	0.202838
Pd	Pd50	0.166013	0.249820	0.202779
Pd	Pd51	0.165810	0.499924	0.202764
Pd	Pd52	0.166036	0.750099	0.202770
Pd	Pd53	0.665828	0.999965	0.203056
Pd	Pd54	0.665479	0.249859	0.203107
Pd	Pd55	0.666002	0.499950	0.202594
Pd	Pd56	0.665451	0.750102	0.203074
Pd	Pd57	0.331157	0.124736	0.235887
Pd	Pd58	0.330879	0.375262	0.236276
Pd	Pd59	0.330880	0.624397	0.236447
Pd	Pd60	0.331258	0.874871	0.236024
Pd	Pd61	0.830618	0.124968	0.236212
Pd	Pd62	0.830962	0.374795	0.235927
Pd	Pd63	0.830949	0.625182	0.235922
Pd	Pd64	0.830634	0.874973	0.236221
Pd	Pd65	0.998980	0.000012	0.268427
Pd	Pd66	0.999014	0.249904	0.268414
Pd	Pd67	0.998831	0.499935	0.268432
Pd	Pd68	0.998935	0.750019	0.268402
Pd	Pd69	0.499478	0.999995	0.268622
Pd	Pd70	0.499388	0.251000	0.270239
Pd	Pd71	0.500146	0.499633	0.268359
Pd	Pd72	0.499411	0.748713	0.270107
Pd	Pd73	0.164924	0.124683	0.307580
Pd	Pd74	0.164396	0.374486	0.307355
Pd	Pd75	0.164134	0.625704	0.307323
Pd	Pd76	0.164836	0.875421	0.307483
Pd	Pd77	0.665902	0.124458	0.308260

Pd	Pd78	0.666729	0.374839	0.307437
Pd	Pd79	0.666832	0.624954	0.307348
Pd	Pd80	0.665926	0.875247	0.308226
Pd	Pd81	0.830730	0.750194	0.338510
Pd	Pd82	0.329694	0.000039	0.338376
Pd	Pd83	0.329106	0.247846	0.337848
Pd	Pd84	0.327972	0.500915	0.337827
Pd	Pd85	0.328886	0.751966	0.338022
Pd	Pd86	0.830936	0.999918	0.338569
Pd	Pd87	0.830709	0.249653	0.338467
Pd	Pd88	0.830368	0.499948	0.338239
Pd	Pd89	0.997708	0.125009	0.368478
Pd	Pd90	0.997271	0.374918	0.368434
Pd	Pd91	0.997182	0.624895	0.368468
Pd	Pd92	0.997709	0.874864	0.368464
Pd	Pd93	0.497287	0.123040	0.368853
Pd	Pd94	0.497247	0.369502	0.368516
Pd	Pd95	0.497397	0.629202	0.367901
Pd	Pd96	0.497174	0.876346	0.368677
C	C97	0.388290	0.628208	0.495686
C	C98	0.403949	0.502826	0.470225
O	O99	0.488441	0.500272	0.434877
O	O100	0.312876	0.471912	0.440495
H	H101	0.456513	0.658922	0.516736
H	H102	0.369683	0.692574	0.461306
H	H103	0.326950	0.626467	0.526402
H	H104	0.415926	0.432932	0.503379
H	H105	0.310977	0.383305	0.434918

M66 H* on Pd(211)

data

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165879	0.000000	0.202949
Pd	Pd50	0.165780	0.250481	0.203268
Pd	Pd51	0.165414	0.500000	0.203436
Pd	Pd52	0.165780	0.749519	0.203268
Pd	Pd53	0.665663	0.000000	0.202835
Pd	Pd54	0.665698	0.249925	0.202794
Pd	Pd55	0.665879	0.500000	0.202669
Pd	Pd56	0.665698	0.750075	0.202794
Pd	Pd57	0.330531	0.125154	0.236132
Pd	Pd58	0.330219	0.375260	0.236718
Pd	Pd59	0.330219	0.624740	0.236718
Pd	Pd60	0.330531	0.874846	0.236132
Pd	Pd61	0.830480	0.124797	0.236008
Pd	Pd62	0.830384	0.374785	0.236013
Pd	Pd63	0.830384	0.625215	0.236013
Pd	Pd64	0.830480	0.875203	0.236008
Pd	Pd65	0.999060	0.000000	0.268416
Pd	Pd66	0.998723	0.249905	0.268456
Pd	Pd67	0.998186	0.500000	0.268691
Pd	Pd68	0.998723	0.750095	0.268456
Pd	Pd69	0.499002	0.000000	0.268359
Pd	Pd70	0.499026	0.249925	0.268410
Pd	Pd71	0.498682	0.500000	0.268481
Pd	Pd72	0.499026	0.750075	0.268410
Pd	Pd73	0.165284	0.124744	0.308088
Pd	Pd74	0.163723	0.372741	0.309360
Pd	Pd75	0.163723	0.627259	0.309360

Pd	Pd76	0.165284	0.875256	0.308088
Pd	Pd77	0.665145	0.124819	0.307784
Pd	Pd78	0.664913	0.374854	0.307436
Pd	Pd79	0.664913	0.625146	0.307436
Pd	Pd80	0.665145	0.875181	0.307784
Pd	Pd81	0.829445	0.750315	0.338133
Pd	Pd82	0.330616	0.000000	0.338142
Pd	Pd83	0.331429	0.248731	0.338619
Pd	Pd84	0.333029	0.500000	0.340477
Pd	Pd85	0.331429	0.751269	0.338619
Pd	Pd86	0.830046	0.000000	0.338209
Pd	Pd87	0.829445	0.249685	0.338133
Pd	Pd88	0.828653	0.500000	0.338044
Pd	Pd89	0.996746	0.124921	0.368332
Pd	Pd90	0.993844	0.374680	0.368914
Pd	Pd91	0.993844	0.625320	0.368914
Pd	Pd92	0.996746	0.875079	0.368332
Pd	Pd93	0.498033	0.124484	0.368496
Pd	Pd94	0.498876	0.374424	0.368517
Pd	Pd95	0.498876	0.625576	0.368517
Pd	Pd96	0.498033	0.875516	0.368496
H	H97	0.202721	0.500000	0.353212

M67 O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166036	0.999719	0.203020
Pd	Pd50	0.166036	0.250281	0.203020
Pd	Pd51	0.165761	0.499994	0.202855
Pd	Pd52	0.165761	0.750006	0.202855
Pd	Pd53	0.665594	0.999909	0.202882
Pd	Pd54	0.665594	0.250091	0.202882
Pd	Pd55	0.665575	0.500124	0.203046
Pd	Pd56	0.665575	0.749876	0.203046
Pd	Pd57	0.330620	0.125000	0.236124
Pd	Pd58	0.330354	0.376938	0.237881
Pd	Pd59	0.330818	0.625000	0.236467
Pd	Pd60	0.330354	0.873062	0.237881
Pd	Pd61	0.830041	0.125000	0.236184
Pd	Pd62	0.830160	0.374908	0.236018
Pd	Pd63	0.830457	0.625000	0.235932
Pd	Pd64	0.830160	0.875092	0.236018
Pd	Pd65	0.998360	0.000335	0.268140
Pd	Pd66	0.998360	0.249665	0.268140
Pd	Pd67	0.997937	0.499677	0.268167
Pd	Pd68	0.997937	0.750323	0.268167
Pd	Pd69	0.498998	0.000087	0.268388
Pd	Pd70	0.498998	0.249913	0.268388
Pd	Pd71	0.499446	0.499932	0.268883
Pd	Pd72	0.499446	0.750068	0.268883
Pd	Pd73	0.164611	0.125000	0.307966
Pd	Pd74	0.163275	0.373715	0.307838
Pd	Pd75	0.162584	0.625000	0.306434
Pd	Pd76	0.163275	0.876285	0.307838
Pd	Pd77	0.665362	0.125000	0.307875
Pd	Pd78	0.665125	0.374832	0.307780
Pd	Pd79	0.664183	0.625000	0.308408
Pd	Pd80	0.665125	0.875168	0.307780
Pd	Pd81	0.828841	0.749726	0.338083

Pd	Pd82	0.330234	0.000829	0.338313
Pd	Pd83	0.330234	0.249171	0.338313
Pd	Pd84	0.327490	0.495726	0.340395
Pd	Pd85	0.327490	0.754274	0.340395
Pd	Pd86	0.829714	0.999816	0.338247
Pd	Pd87	0.829714	0.250184	0.338247
Pd	Pd88	0.828841	0.500274	0.338083
Pd	Pd89	0.996358	0.125000	0.368153
Pd	Pd90	0.995829	0.375117	0.368186
Pd	Pd91	0.995621	0.625000	0.368032
Pd	Pd92	0.995829	0.874883	0.368186
Pd	Pd93	0.498337	0.125000	0.368447
Pd	Pd94	0.498775	0.371172	0.368747
Pd	Pd95	0.503472	0.625000	0.370421
Pd	Pd96	0.498775	0.878828	0.368747
O	O97	0.361270	0.625000	0.396473

M68 OH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170

Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165857	0.000000	0.202744
Pd	Pd50	0.165925	0.250024	0.202797
Pd	Pd51	0.165903	0.500000	0.202845
Pd	Pd52	0.165925	0.749976	0.202797
Pd	Pd53	0.665708	0.000000	0.202945
Pd	Pd54	0.665332	0.249752	0.202982
Pd	Pd55	0.665886	0.500000	0.202669
Pd	Pd56	0.665332	0.750248	0.202982
Pd	Pd57	0.330986	0.125119	0.236171
Pd	Pd58	0.331021	0.374995	0.236100
Pd	Pd59	0.331021	0.625005	0.236100
Pd	Pd60	0.330986	0.874881	0.236171
Pd	Pd61	0.830392	0.125023	0.236215
Pd	Pd62	0.830705	0.374870	0.236032
Pd	Pd63	0.830705	0.625130	0.236032
Pd	Pd64	0.830392	0.874977	0.236215
Pd	Pd65	0.998799	0.000000	0.268351
Pd	Pd66	0.998986	0.250151	0.268361
Pd	Pd67	0.999079	0.500000	0.268452
Pd	Pd68	0.998986	0.749849	0.268361
Pd	Pd69	0.498947	0.000000	0.268463
Pd	Pd70	0.498781	0.251495	0.269953
Pd	Pd71	0.500056	0.500000	0.268708
Pd	Pd72	0.498781	0.748505	0.269953
Pd	Pd73	0.164873	0.124794	0.307376
Pd	Pd74	0.165351	0.374959	0.307690
Pd	Pd75	0.165351	0.625041	0.307690
Pd	Pd76	0.164873	0.875206	0.307376
Pd	Pd77	0.665700	0.124434	0.308140
Pd	Pd78	0.666695	0.374539	0.307413
Pd	Pd79	0.666695	0.625461	0.307413
Pd	Pd80	0.665700	0.875566	0.308140
Pd	Pd81	0.830769	0.750230	0.338434
Pd	Pd82	0.329685	0.000000	0.338488
Pd	Pd83	0.329733	0.249390	0.338319
Pd	Pd84	0.330548	0.500000	0.337577
Pd	Pd85	0.329733	0.750610	0.338319
Pd	Pd86	0.830858	0.000000	0.338524
Pd	Pd87	0.830769	0.249770	0.338434

Pd	Pd88	0.830441	0.500000	0.338386
Pd	Pd89	0.997709	0.125075	0.368312
Pd	Pd90	0.997509	0.374997	0.368324
Pd	Pd91	0.997509	0.625003	0.368324
Pd	Pd92	0.997709	0.874925	0.368312
Pd	Pd93	0.497377	0.123108	0.368626
Pd	Pd94	0.499626	0.369404	0.369311
Pd	Pd95	0.499626	0.630596	0.369311
Pd	Pd96	0.497377	0.876892	0.368626
O	O97	0.521316	0.500000	0.432319
H	H98	0.592122	0.500000	0.441855

M69 H₂O* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170

Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165523	0.999968	0.202989
Pd	Pd50	0.165553	0.249974	0.202986
Pd	Pd51	0.165553	0.500019	0.202986
Pd	Pd52	0.165523	0.750024	0.202989
Pd	Pd53	0.665656	0.000053	0.202915
Pd	Pd54	0.665234	0.250022	0.203077
Pd	Pd55	0.665233	0.499976	0.203080
Pd	Pd56	0.665654	0.749944	0.202914
Pd	Pd57	0.330281	0.124884	0.236031
Pd	Pd58	0.330128	0.374997	0.236001
Pd	Pd59	0.330278	0.625109	0.236033
Pd	Pd60	0.330180	0.874994	0.236245
Pd	Pd61	0.830177	0.125003	0.236112
Pd	Pd62	0.830104	0.375002	0.235960
Pd	Pd63	0.830180	0.624991	0.236112
Pd	Pd64	0.830216	0.875004	0.236173
Pd	Pd65	0.998448	0.000020	0.268399
Pd	Pd66	0.998402	0.250053	0.268384
Pd	Pd67	0.998402	0.499942	0.268385
Pd	Pd68	0.998447	0.749979	0.268401
Pd	Pd69	0.498436	0.000032	0.268166
Pd	Pd70	0.498344	0.250909	0.269003
Pd	Pd71	0.498349	0.499076	0.269012
Pd	Pd72	0.498441	0.749948	0.268169
Pd	Pd73	0.164156	0.124993	0.308007
Pd	Pd74	0.164178	0.374992	0.308098
Pd	Pd75	0.164154	0.624988	0.308006
Pd	Pd76	0.164128	0.874990	0.308004
Pd	Pd77	0.664477	0.124884	0.307842
Pd	Pd78	0.663747	0.374993	0.307962
Pd	Pd79	0.664475	0.625107	0.307845
Pd	Pd80	0.664199	0.874998	0.307913
Pd	Pd81	0.829073	0.749999	0.338269
Pd	Pd82	0.328787	0.000019	0.338349
Pd	Pd83	0.328756	0.249662	0.337808
Pd	Pd84	0.328756	0.500323	0.337813
Pd	Pd85	0.328787	0.749960	0.338346
Pd	Pd86	0.829074	1.000000	0.338269
Pd	Pd87	0.828875	0.250179	0.338141
Pd	Pd88	0.828873	0.499818	0.338141
Pd	Pd89	0.995714	0.125067	0.368284
Pd	Pd90	0.995759	0.375002	0.368265
Pd	Pd91	0.995710	0.624932	0.368285
Pd	Pd92	0.995816	0.874998	0.368260

Pd	Pd93	0.495748	0.123540	0.367751
Pd	Pd94	0.496764	0.374991	0.370307
Pd	Pd95	0.495751	0.626436	0.367764
Pd	Pd96	0.495730	0.874997	0.368129
O	O97	0.434848	0.374688	0.462534
H	H98	0.390903	0.303950	0.459502
H	H99	0.390342	0.444921	0.459494

M1 CO₂* on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165142	0.000065	0.196892
Pd	Pd34	0.165107	0.249951	0.196705
Pd	Pd35	0.168089	0.500068	0.198805
Pd	Pd36	0.165241	0.750208	0.197028

Pd	Pd37	0.415448	0.124690	0.196655
Pd	Pd38	0.416446	0.374805	0.197693
Pd	Pd39	0.415086	0.624818	0.197404
Pd	Pd40	0.415554	0.874892	0.196814
Pd	Pd41	0.665401	0.000278	0.196809
Pd	Pd42	0.664682	0.251003	0.197788
Pd	Pd43	0.665197	0.499495	0.197603
Pd	Pd44	0.665640	0.750050	0.196567
Pd	Pd45	0.914660	0.125524	0.196934
Pd	Pd46	0.915730	0.375216	0.196777
Pd	Pd47	0.915923	0.624715	0.196718
Pd	Pd48	0.915142	0.875306	0.196928
Pd	Pd49	0.079164	0.124250	0.296819
Pd	Pd50	0.078102	0.374118	0.297013
Pd	Pd51	0.079210	0.626147	0.297175
Pd	Pd52	0.080208	0.875284	0.297053
Pd	Pd53	0.330547	0.999601	0.296830
Pd	Pd54	0.328365	0.246923	0.295891
Pd	Pd55	0.328165	0.499299	0.299497
Pd	Pd56	0.330536	0.751372	0.296814
Pd	Pd57	0.580652	0.124369	0.296758
Pd	Pd58	0.579304	0.375295	0.301515
Pd	Pd59	0.582102	0.627950	0.295764
Pd	Pd60	0.581130	0.875706	0.296916
Pd	Pd61	0.830404	0.000198	0.297130
Pd	Pd62	0.829679	0.250094	0.297086
Pd	Pd63	0.830830	0.500824	0.296753
Pd	Pd64	0.830895	0.750705	0.296781
C	C65	0.514510	0.410145	0.387305
O	O66	0.400516	0.468044	0.389166
O	O67	0.600666	0.367105	0.420626

M2 HCOO* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000

Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166314	0.999942	0.196837
Pd	Pd34	0.166503	0.249838	0.196766
Pd	Pd35	0.166641	0.499944	0.196452
Pd	Pd36	0.166542	0.750035	0.196781
Pd	Pd37	0.416860	0.124641	0.196836
Pd	Pd38	0.417148	0.374617	0.197678
Pd	Pd39	0.417189	0.625234	0.197695
Pd	Pd40	0.416878	0.875200	0.196845
Pd	Pd41	0.666611	0.999895	0.196932
Pd	Pd42	0.665528	0.251319	0.198399
Pd	Pd43	0.665925	0.499907	0.197885
Pd	Pd44	0.665537	0.748461	0.198457
Pd	Pd45	0.915908	0.125078	0.196769
Pd	Pd46	0.916363	0.374869	0.196692
Pd	Pd47	0.916394	0.625002	0.196690
Pd	Pd48	0.915901	0.874760	0.196777
Pd	Pd49	0.083261	0.124592	0.296918
Pd	Pd50	0.083026	0.374751	0.296687
Pd	Pd51	0.083087	0.624965	0.296703
Pd	Pd52	0.083262	0.875078	0.296930
Pd	Pd53	0.332296	0.999804	0.296936
Pd	Pd54	0.331535	0.248942	0.296722
Pd	Pd55	0.330554	0.499811	0.295889
Pd	Pd56	0.331625	0.750701	0.296734
Pd	Pd57	0.583180	0.122878	0.297129
Pd	Pd58	0.583413	0.372128	0.299489
Pd	Pd59	0.583434	0.627320	0.299646
Pd	Pd60	0.583254	0.876769	0.297155
Pd	Pd61	0.834078	0.999860	0.297185
Pd	Pd62	0.835070	0.248543	0.296905
Pd	Pd63	0.834906	0.499871	0.295722
Pd	Pd64	0.835058	0.751139	0.296943
C	C65	0.583686	0.498769	0.415436
O	O66	0.582834	0.603484	0.391876
O	O67	0.583061	0.394219	0.391680
H	H68	0.585226	0.498555	0.464096

M3 H₂COO* on Pd(111)
data_

_cell_length_a	9.514851		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.165637	0.001109	0.196733
Pd Pd34	0.166359	0.251174	0.196960
Pd Pd35	0.169101	0.500792	0.198947
Pd Pd36	0.164896	0.750798	0.196482
Pd Pd37	0.416370	0.125923	0.196784
Pd Pd38	0.417120	0.375649	0.198276
Pd Pd39	0.415969	0.626078	0.196485
Pd Pd40	0.416333	0.876828	0.196546
Pd Pd41	0.666586	0.000531	0.196725
Pd Pd42	0.666266	0.251106	0.197330
Pd Pd43	0.666120	0.500706	0.197745
Pd Pd44	0.664828	0.749066	0.198817
Pd Pd45	0.916272	0.125638	0.196539
Pd Pd46	0.917205	0.376760	0.197189
Pd Pd47	0.915953	0.625174	0.197144

Pd	Pd48	0.914866	0.874912	0.196739
Pd	Pd49	0.082773	0.127558	0.297080
Pd	Pd50	0.081452	0.377312	0.297661
Pd	Pd51	0.077916	0.628588	0.297288
Pd	Pd52	0.080643	0.878327	0.296591
Pd	Pd53	0.330910	0.003953	0.297049
Pd	Pd54	0.331919	0.252428	0.296983
Pd	Pd55	0.326950	0.505857	0.298375
Pd	Pd56	0.327760	0.757566	0.295272
Pd	Pd57	0.582941	0.124191	0.296867
Pd	Pd58	0.588685	0.368566	0.296821
Pd	Pd59	0.580825	0.633957	0.297927
Pd	Pd60	0.581966	0.880696	0.297361
Pd	Pd61	0.833709	0.001908	0.297211
Pd	Pd62	0.836528	0.249017	0.296384
Pd	Pd63	0.831365	0.502569	0.298071
Pd	Pd64	0.832151	0.753917	0.297553
C	C65	0.518845	0.480208	0.406184
O	O66	0.625423	0.412834	0.381648
O	O67	0.455288	0.567746	0.367897
H	H68	0.563341	0.532017	0.443733
H	H69	0.431489	0.421676	0.422012

M4 COOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515

Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166593	0.999476	0.196894
Pd	Pd34	0.166905	0.249385	0.196819
Pd	Pd35	0.169121	0.499694	0.198072
Pd	Pd36	0.166129	0.749693	0.196615
Pd	Pd37	0.417166	0.124463	0.196899
Pd	Pd38	0.416628	0.374919	0.197645
Pd	Pd39	0.417113	0.624482	0.197812
Pd	Pd40	0.417362	0.875099	0.196563
Pd	Pd41	0.666953	0.999285	0.196999
Pd	Pd42	0.665892	0.251107	0.198755
Pd	Pd43	0.667024	0.499890	0.197559
Pd	Pd44	0.665920	0.747892	0.198049
Pd	Pd45	0.916214	0.124410	0.196859
Pd	Pd46	0.917772	0.374616	0.196961
Pd	Pd47	0.917628	0.624071	0.196934
Pd	Pd48	0.915802	0.873884	0.196918
Pd	Pd49	0.084483	0.123734	0.296850
Pd	Pd50	0.085771	0.374329	0.297022
Pd	Pd51	0.083582	0.624935	0.297281
Pd	Pd52	0.082664	0.874410	0.297001
Pd	Pd53	0.333395	0.999041	0.297028
Pd	Pd54	0.333608	0.247637	0.296544
Pd	Pd55	0.334233	0.501390	0.300994
Pd	Pd56	0.330449	0.753203	0.295925
Pd	Pd57	0.584485	0.120167	0.297513
Pd	Pd58	0.588652	0.366997	0.298103
Pd	Pd59	0.581424	0.625053	0.300763
Pd	Pd60	0.583012	0.873755	0.297326
Pd	Pd61	0.834505	0.997880	0.297243
Pd	Pd62	0.837439	0.246714	0.297245
Pd	Pd63	0.835926	0.498756	0.296543
Pd	Pd64	0.832949	0.748503	0.297096
C	C65	0.478942	0.531710	0.370205
O	O66	0.543167	0.435834	0.385508
O	O67	0.431006	0.603874	0.414061
H	H68	0.384083	0.674106	0.395210

M5 HCOOH* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol

```

_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166429	0.000068	0.196966
Pd Pd34	0.166928	0.249905	0.197012
Pd Pd35	0.166234	0.499626	0.196896
Pd Pd36	0.167384	0.749787	0.197927
Pd Pd37	0.416677	0.124621	0.196964
Pd Pd38	0.416908	0.374940	0.196909
Pd Pd39	0.415759	0.625907	0.197975
Pd Pd40	0.415875	0.873947	0.197961
Pd Pd41	0.666184	0.999762	0.197007
Pd Pd42	0.666469	0.249837	0.197106
Pd Pd43	0.666259	0.499875	0.196898
Pd Pd44	0.666498	0.750069	0.196961
Pd Pd45	0.916354	0.124907	0.197022
Pd Pd46	0.916417	0.374806	0.197044
Pd Pd47	0.916393	0.624853	0.196853
Pd Pd48	0.916446	0.874861	0.196824
Pd Pd49	0.833143	0.000035	0.296963
Pd Pd50	0.832976	0.749632	0.296920
Pd Pd51	0.833126	0.499308	0.297036
Pd Pd52	0.833216	0.249668	0.297206
Pd Pd53	0.583714	0.124980	0.297262
Pd Pd54	0.584438	0.875295	0.296857
Pd Pd55	0.584646	0.623903	0.296535
Pd Pd56	0.583735	0.374440	0.297368

Pd	Pd57	0.333342	0.001320	0.296660
Pd	Pd58	0.333115	0.749481	0.300772
Pd	Pd59	0.333088	0.497779	0.296477
Pd	Pd60	0.333360	0.249769	0.297085
Pd	Pd61	0.082865	0.124981	0.296980
Pd	Pd62	0.081795	0.875449	0.296566
Pd	Pd63	0.081805	0.623887	0.296675
Pd	Pd64	0.082890	0.374467	0.297075
C	C65	0.370639	0.693148	0.434871
O	O66	0.322081	0.765520	0.398533
O	O67	0.439116	0.591313	0.424489
H	H68	0.358935	0.710373	0.482325
H	H69	0.448589	0.577252	0.380233

M6 H₂COOH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515

Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166250	0.999754	0.197058
Pd	Pd34	0.165884	0.249569	0.196801
Pd	Pd35	0.165259	0.499741	0.196533
Pd	Pd36	0.169112	0.750158	0.199098
Pd	Pd37	0.416563	0.124876	0.196745
Pd	Pd38	0.416542	0.374022	0.196568
Pd	Pd39	0.416017	0.624893	0.196785
Pd	Pd40	0.416828	0.875007	0.197701
Pd	Pd41	0.666283	0.998975	0.196911
Pd	Pd42	0.666617	0.250109	0.196830
Pd	Pd43	0.664881	0.502119	0.198950
Pd	Pd44	0.666072	0.749783	0.197621
Pd	Pd45	0.916042	0.124999	0.196728
Pd	Pd46	0.915000	0.375400	0.196911
Pd	Pd47	0.916642	0.624810	0.196668
Pd	Pd48	0.917570	0.874416	0.196903
Pd	Pd49	0.834981	0.000688	0.296619
Pd	Pd50	0.833325	0.749237	0.296412
Pd	Pd51	0.833227	0.497734	0.297648
Pd	Pd52	0.833454	0.248940	0.297321
Pd	Pd53	0.582804	0.126367	0.296751
Pd	Pd54	0.585254	0.880640	0.296375
Pd	Pd55	0.583106	0.618893	0.298814
Pd	Pd56	0.582541	0.371195	0.297363
Pd	Pd57	0.331217	0.000347	0.296860
Pd	Pd58	0.326781	0.747595	0.298723
Pd	Pd59	0.328732	0.494660	0.295117
Pd	Pd60	0.331281	0.247965	0.297010
Pd	Pd61	0.082213	0.124037	0.297165
Pd	Pd62	0.080751	0.874714	0.298011
Pd	Pd63	0.078812	0.622974	0.297360
Pd	Pd64	0.080979	0.373044	0.296714
C	C65	0.503235	0.756502	0.415757
O	O66	0.454349	0.684415	0.369562
O	O67	0.604905	0.846854	0.398630
H	H68	0.551167	0.696237	0.449009
H	H69	0.415280	0.808622	0.434507
H	H70	0.696868	0.806943	0.393974

M7 HOCOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000

Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166206	0.000205	0.196947
Pd	Pd34	0.166591	0.250233	0.197227
Pd	Pd35	0.169528	0.500634	0.199020
Pd	Pd36	0.165026	0.750257	0.196132
Pd	Pd37	0.416854	0.125911	0.196960
Pd	Pd38	0.415392	0.375659	0.197531
Pd	Pd39	0.417074	0.624018	0.198400
Pd	Pd40	0.416818	0.876426	0.196182
Pd	Pd41	0.666561	0.999162	0.197189
Pd	Pd42	0.668004	0.249014	0.195899
Pd	Pd43	0.667093	0.501227	0.197472
Pd	Pd44	0.664141	0.747824	0.198996
Pd	Pd45	0.916857	0.124385	0.197118
Pd	Pd46	0.917917	0.375649	0.197050
Pd	Pd47	0.916935	0.624856	0.197125
Pd	Pd48	0.914766	0.874067	0.197106
Pd	Pd49	0.083524	0.125790	0.297206
Pd	Pd50	0.084994	0.376081	0.297518
Pd	Pd51	0.081829	0.626367	0.297256
Pd	Pd52	0.081380	0.876156	0.296701
Pd	Pd53	0.333210	0.001500	0.296936
Pd	Pd54	0.333762	0.250463	0.297522
Pd	Pd55	0.335047	0.502736	0.305256
Pd	Pd56	0.329421	0.755371	0.293762
Pd	Pd57	0.583613	0.125046	0.297155
Pd	Pd58	0.586292	0.371080	0.293162
Pd	Pd59	0.579255	0.624185	0.305239
Pd	Pd60	0.581932	0.875875	0.297489
Pd	Pd61	0.832888	0.999817	0.297370
Pd	Pd62	0.834451	0.249781	0.296851
Pd	Pd63	0.833442	0.499768	0.297296

Pd	Pd64	0.830354	0.749479	0.297461
C	C65	0.458726	0.560780	0.376684
O	O66	0.403078	0.645592	0.412140
O	O67	0.514842	0.475617	0.411764
H	H68	0.360721	0.709782	0.386669
H	H69	0.556869	0.411421	0.386144

M8 HOCHOH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166753	0.000191	0.197145
Pd	Pd34	0.166857	0.250012	0.197106
Pd	Pd35	0.166756	0.500132	0.196848
Pd	Pd36	0.166886	0.750062	0.196888
Pd	Pd37	0.417079	0.125058	0.197171

Pd	Pd38	0.416870	0.374913	0.196954
Pd	Pd39	0.417871	0.625120	0.198146
Pd	Pd40	0.416881	0.875236	0.197054
Pd	Pd41	0.666990	0.000101	0.196973
Pd	Pd42	0.667108	0.250088	0.197074
Pd	Pd43	0.665966	0.500829	0.198276
Pd	Pd44	0.666072	0.749160	0.198295
Pd	Pd45	0.916840	0.125134	0.197171
Pd	Pd46	0.916545	0.375154	0.196945
Pd	Pd47	0.916562	0.625186	0.196914
Pd	Pd48	0.916423	0.874874	0.196976
Pd	Pd49	0.084004	0.125176	0.297268
Pd	Pd50	0.083999	0.374782	0.297079
Pd	Pd51	0.084016	0.625275	0.296896
Pd	Pd52	0.083956	0.875519	0.297060
Pd	Pd53	0.334035	0.000252	0.297334
Pd	Pd54	0.334001	0.250071	0.297135
Pd	Pd55	0.333077	0.499656	0.296557
Pd	Pd56	0.332984	0.750882	0.296880
Pd	Pd57	0.584055	0.125249	0.297414
Pd	Pd58	0.583877	0.373986	0.297042
Pd	Pd59	0.583685	0.625146	0.304433
Pd	Pd60	0.583850	0.876004	0.296731
Pd	Pd61	0.833779	0.000271	0.297119
Pd	Pd62	0.833745	0.250250	0.297411
Pd	Pd63	0.834651	0.499903	0.296627
Pd	Pd64	0.834209	0.750465	0.297013
C	C65	0.572161	0.617930	0.396675
O	O66	0.574522	0.731282	0.420566
O	O67	0.680564	0.552597	0.419441
H	H68	0.497548	0.778503	0.402737
H	H69	0.680163	0.471836	0.400500
H	H70	0.468223	0.571682	0.396499

M9 CO* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000

Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166362	0.000013	0.196982
Pd	Pd34	0.167030	0.249761	0.196868
Pd	Pd35	0.169230	0.500013	0.197884
Pd	Pd36	0.167021	0.750265	0.196869
Pd	Pd37	0.416973	0.124874	0.196808
Pd	Pd38	0.417262	0.375056	0.197970
Pd	Pd39	0.417257	0.624970	0.197979
Pd	Pd40	0.416950	0.875160	0.196807
Pd	Pd41	0.666683	0.000010	0.197042
Pd	Pd42	0.666228	0.251249	0.197833
Pd	Pd43	0.667159	0.500031	0.197865
Pd	Pd44	0.666199	0.748779	0.197841
Pd	Pd45	0.916054	0.125319	0.196921
Pd	Pd46	0.917904	0.375327	0.196861
Pd	Pd47	0.917898	0.624712	0.196860
Pd	Pd48	0.916048	0.874704	0.196924
Pd	Pd49	0.083428	0.124215	0.296946
Pd	Pd50	0.084827	0.374101	0.297038
Pd	Pd51	0.084810	0.625964	0.297037
Pd	Pd52	0.083432	0.875859	0.296948
Pd	Pd53	0.334548	0.000025	0.296867
Pd	Pd54	0.332462	0.247001	0.296934
Pd	Pd55	0.332272	0.500023	0.300911
Pd	Pd56	0.332455	0.753043	0.296933
Pd	Pd57	0.584199	0.124955	0.297184
Pd	Pd58	0.585254	0.373404	0.300623
Pd	Pd59	0.585243	0.626643	0.300658
Pd	Pd60	0.584181	0.875103	0.297189
Pd	Pd61	0.833631	0.000027	0.297125
Pd	Pd62	0.834429	0.249834	0.296980
Pd	Pd63	0.838324	0.500042	0.296853
Pd	Pd64	0.834426	0.750236	0.296982
C	C65	0.501639	0.499977	0.357617
O	O66	0.501976	0.499927	0.410014

M10 HCO* on Pd(111)
data_

_cell_length_a	9.514851		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166368	0.999660	0.196873
Pd Pd34	0.166755	0.249586	0.196811
Pd Pd35	0.168742	0.499932	0.198090
Pd Pd36	0.166326	0.749853	0.196671
Pd Pd37	0.417080	0.124659	0.196817
Pd Pd38	0.416412	0.375308	0.197771
Pd Pd39	0.417012	0.624520	0.197871
Pd Pd40	0.417029	0.874998	0.196621
Pd Pd41	0.666781	0.999626	0.196921
Pd Pd42	0.665786	0.251576	0.198715
Pd Pd43	0.666666	0.500276	0.197647
Pd Pd44	0.665804	0.748278	0.198083
Pd Pd45	0.916068	0.124589	0.196862
Pd Pd46	0.917648	0.374803	0.196885
Pd Pd47	0.917249	0.624417	0.196810

Pd	Pd48	0.915667	0.874078	0.196897
Pd	Pd49	0.084379	0.124189	0.296878
Pd	Pd50	0.085832	0.374869	0.297089
Pd	Pd51	0.082732	0.625490	0.297120
Pd	Pd52	0.082245	0.875033	0.296953
Pd	Pd53	0.333112	0.999630	0.296879
Pd	Pd54	0.333475	0.248257	0.296329
Pd	Pd55	0.334235	0.502175	0.301744
Pd	Pd56	0.330338	0.753239	0.296056
Pd	Pd57	0.584367	0.120671	0.297441
Pd	Pd58	0.589030	0.366844	0.298519
Pd	Pd59	0.580726	0.625156	0.301493
Pd	Pd60	0.582866	0.874282	0.297195
Pd	Pd61	0.834110	0.998304	0.297283
Pd	Pd62	0.837465	0.247078	0.297232
Pd	Pd63	0.835711	0.499178	0.296279
Pd	Pd64	0.832222	0.748855	0.297169
C	C65	0.478738	0.532005	0.367753
O	O66	0.541995	0.437223	0.385413
H	H67	0.436880	0.595444	0.401517

M11 H₂CO* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515

Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165541	0.001062	0.196865
Pd	Pd34	0.165973	0.251016	0.196898
Pd	Pd35	0.168807	0.500972	0.198979
Pd	Pd36	0.165130	0.751106	0.196640
Pd	Pd37	0.416330	0.125951	0.196676
Pd	Pd38	0.416604	0.375741	0.197606
Pd	Pd39	0.415788	0.625897	0.196972
Pd	Pd40	0.416299	0.876562	0.196685
Pd	Pd41	0.666252	0.000768	0.196960
Pd	Pd42	0.665955	0.251705	0.197655
Pd	Pd43	0.665616	0.500544	0.197586
Pd	Pd44	0.664342	0.748879	0.198963
Pd	Pd45	0.915717	0.126069	0.196893
Pd	Pd46	0.917034	0.376257	0.196788
Pd	Pd47	0.916063	0.625688	0.196751
Pd	Pd48	0.914691	0.875514	0.196972
Pd	Pd49	0.080914	0.127460	0.297224
Pd	Pd50	0.080030	0.376872	0.297601
Pd	Pd51	0.079092	0.629389	0.297365
Pd	Pd52	0.080700	0.878654	0.296999
Pd	Pd53	0.331173	0.003749	0.296968
Pd	Pd54	0.330042	0.251340	0.296277
Pd	Pd55	0.326914	0.504582	0.298874
Pd	Pd56	0.329170	0.756390	0.295640
Pd	Pd57	0.581986	0.126930	0.297087
Pd	Pd58	0.583923	0.373622	0.299827
Pd	Pd59	0.581382	0.632325	0.298681
Pd	Pd60	0.581674	0.880621	0.297590
Pd	Pd61	0.832268	0.003030	0.297461
Pd	Pd62	0.832520	0.251800	0.297020
Pd	Pd63	0.832648	0.502931	0.296083
Pd	Pd64	0.832334	0.754022	0.297526
C	C65	0.542043	0.437794	0.383898
O	O66	0.471885	0.541715	0.372792
H	H67	0.478056	0.364397	0.403373
H	H68	0.647830	0.450219	0.402867

M12 H₃CO* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x

```

_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166915	0.000017	0.196916
Pd	Pd34	0.166294	0.249959	0.196857
Pd	Pd35	0.167551	0.500009	0.198618
Pd	Pd36	0.166278	0.750076	0.196856
Pd	Pd37	0.417364	0.124682	0.196857
Pd	Pd38	0.415969	0.374925	0.196780
Pd	Pd39	0.415961	0.625091	0.196776
Pd	Pd40	0.417355	0.875338	0.196853
Pd	Pd41	0.667329	0.000017	0.197116
Pd	Pd42	0.665783	0.251238	0.198568
Pd	Pd43	0.665738	0.500008	0.196580
Pd	Pd44	0.665780	0.748782	0.198563
Pd	Pd45	0.916346	0.125080	0.196958
Pd	Pd46	0.916522	0.374967	0.196798
Pd	Pd47	0.916509	0.625056	0.196797
Pd	Pd48	0.916335	0.874954	0.196958
Pd	Pd49	0.083632	0.124224	0.297149
Pd	Pd50	0.079695	0.373367	0.297494
Pd	Pd51	0.079691	0.626677	0.297491
Pd	Pd52	0.083626	0.875821	0.297143
Pd	Pd53	0.333271	0.000026	0.297226
Pd	Pd54	0.331753	0.247930	0.296270
Pd	Pd55	0.322991	0.500021	0.297045
Pd	Pd56	0.331738	0.752125	0.296264
Pd	Pd57	0.584069	0.122171	0.297677
Pd	Pd58	0.587569	0.367601	0.296741

Pd	Pd59	0.587557	0.632448	0.296727
Pd	Pd60	0.584058	0.877886	0.297671
Pd	Pd61	0.835244	0.000027	0.297728
Pd	Pd62	0.835729	0.247376	0.297555
Pd	Pd63	0.833718	0.500022	0.295955
Pd	Pd64	0.835728	0.752674	0.297558
C	C65	0.506805	0.500123	0.418746
O	O66	0.501279	0.500048	0.355746
H	H67	0.453614	0.582028	0.435343
H	H68	0.453641	0.418227	0.435393
H	H69	0.617290	0.500154	0.432925

M13 COH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515

Pd	Pd33	0.165770	0.999917	0.196794
Pd	Pd34	0.166724	0.249777	0.196880
Pd	Pd35	0.168796	0.499933	0.198028
Pd	Pd36	0.166621	0.750071	0.196912
Pd	Pd37	0.416446	0.124917	0.196827
Pd	Pd38	0.417099	0.374989	0.197993
Pd	Pd39	0.417077	0.624985	0.197949
Pd	Pd40	0.416469	0.874946	0.196808
Pd	Pd41	0.665923	0.999964	0.196970
Pd	Pd42	0.665874	0.251195	0.198186
Pd	Pd43	0.667149	0.499930	0.197864
Pd	Pd44	0.666097	0.748826	0.197941
Pd	Pd45	0.915557	0.125306	0.196874
Pd	Pd46	0.917634	0.375185	0.196955
Pd	Pd47	0.917739	0.624587	0.196950
Pd	Pd48	0.915625	0.874637	0.196865
Pd	Pd49	0.082703	0.123854	0.296796
Pd	Pd50	0.084209	0.373752	0.297117
Pd	Pd51	0.084068	0.626112	0.297262
Pd	Pd52	0.082560	0.875835	0.296885
Pd	Pd53	0.333653	0.999843	0.296727
Pd	Pd54	0.331621	0.246627	0.297111
Pd	Pd55	0.330481	0.500296	0.301114
Pd	Pd56	0.331311	0.753411	0.297203
Pd	Pd57	0.583380	0.124351	0.297310
Pd	Pd58	0.585530	0.371880	0.301491
Pd	Pd59	0.584789	0.627399	0.300956
Pd	Pd60	0.583266	0.874932	0.297252
Pd	Pd61	0.832796	0.999747	0.297080
Pd	Pd62	0.834010	0.249243	0.297183
Pd	Pd63	0.837977	0.499797	0.297096
Pd	Pd64	0.833610	0.750190	0.297053
C	C65	0.501203	0.498799	0.350592
O	O66	0.502058	0.497849	0.409085
H	H67	0.453743	0.570088	0.424499

M14 HCOH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166295	0.000017	0.196987
Pd	Pd34	0.166906	0.249972	0.197231
Pd	Pd35	0.168832	0.500225	0.198660
Pd	Pd36	0.165894	0.749897	0.196518
Pd	Pd37	0.417022	0.125463	0.196933
Pd	Pd38	0.415916	0.375524	0.197669
Pd	Pd39	0.417028	0.624266	0.198146
Pd	Pd40	0.416599	0.875611	0.196552
Pd	Pd41	0.666548	0.999225	0.197087
Pd	Pd42	0.667952	0.249007	0.196104
Pd	Pd43	0.666996	0.500905	0.197595
Pd	Pd44	0.664962	0.748333	0.198662
Pd	Pd45	0.916933	0.124332	0.197089
Pd	Pd46	0.917864	0.375312	0.197086
Pd	Pd47	0.916890	0.624677	0.197119
Pd	Pd48	0.915247	0.873928	0.197066
Pd	Pd49	0.083699	0.125363	0.297204
Pd	Pd50	0.085427	0.375420	0.297619
Pd	Pd51	0.081927	0.625755	0.297155
Pd	Pd52	0.081692	0.875882	0.296632
Pd	Pd53	0.333426	0.001090	0.296866
Pd	Pd54	0.334023	0.249589	0.297482
Pd	Pd55	0.334803	0.501897	0.303707
Pd	Pd56	0.330061	0.754437	0.295235
Pd	Pd57	0.583902	0.124635	0.297227
Pd	Pd58	0.586641	0.370680	0.294154
Pd	Pd59	0.580355	0.624474	0.303682
Pd	Pd60	0.582712	0.875778	0.297287
Pd	Pd61	0.833190	0.999666	0.297221
Pd	Pd62	0.834677	0.249378	0.296949
Pd	Pd63	0.834224	0.499182	0.297365
Pd	Pd64	0.830998	0.749203	0.297551
C	C65	0.456336	0.564903	0.370645
O	O66	0.507515	0.487397	0.411264
H	H67	0.406358	0.641143	0.394417
H	H68	0.553250	0.417485	0.390892

M15 CH₂OH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167298	0.999772	0.197087
Pd	Pd34	0.166610	0.249647	0.196844
Pd	Pd35	0.168064	0.499830	0.198283
Pd	Pd36	0.167170	0.749916	0.197098
Pd	Pd37	0.417417	0.124639	0.196907
Pd	Pd38	0.416346	0.375706	0.197836
Pd	Pd39	0.416547	0.624173	0.198134
Pd	Pd40	0.417356	0.874553	0.197033
Pd	Pd41	0.667139	0.999871	0.197098
Pd	Pd42	0.666533	0.250186	0.197107
Pd	Pd43	0.666965	0.499746	0.196956

Pd	Pd44	0.667181	0.749689	0.196905
Pd	Pd45	0.916907	0.124727	0.197057
Pd	Pd46	0.917131	0.374909	0.196906
Pd	Pd47	0.917642	0.624792	0.196935
Pd	Pd48	0.917216	0.874983	0.197056
Pd	Pd49	0.083993	0.124307	0.297120
Pd	Pd50	0.083926	0.374202	0.296869
Pd	Pd51	0.084609	0.624554	0.297180
Pd	Pd52	0.084650	0.874607	0.297167
Pd	Pd53	0.334483	0.999358	0.297174
Pd	Pd54	0.333417	0.247806	0.296071
Pd	Pd55	0.335328	0.499242	0.303754
Pd	Pd56	0.334566	0.750130	0.296987
Pd	Pd57	0.584118	0.124478	0.297308
Pd	Pd58	0.584602	0.374705	0.297092
Pd	Pd59	0.585154	0.625753	0.296631
Pd	Pd60	0.584653	0.874937	0.297090
Pd	Pd61	0.834412	0.999744	0.297271
Pd	Pd62	0.834104	0.249501	0.296835
Pd	Pd63	0.834673	0.499886	0.296672
Pd	Pd64	0.834807	0.749954	0.296891
C	C65	0.353619	0.485578	0.393683
O	O66	0.458857	0.405257	0.410596
H	H67	0.247019	0.456812	0.406349
H	H68	0.382277	0.577206	0.408426
H	H69	0.427554	0.321601	0.402511

M16 CH₃OH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166514	0.000106	0.197126
Pd	Pd34	0.166309	0.250152	0.196915
Pd	Pd35	0.166159	0.500137	0.196847
Pd	Pd36	0.166448	0.750187	0.197110
Pd	Pd37	0.416442	0.124821	0.197023
Pd	Pd38	0.417059	0.375068	0.197503
Pd	Pd39	0.416399	0.625475	0.196879
Pd	Pd40	0.416861	0.875180	0.197057
Pd	Pd41	0.666899	0.000210	0.196974
Pd	Pd42	0.666086	0.250687	0.197705
Pd	Pd43	0.665931	0.499293	0.197791
Pd	Pd44	0.666846	0.750118	0.196950
Pd	Pd45	0.916365	0.125246	0.197018
Pd	Pd46	0.916354	0.375127	0.197181
Pd	Pd47	0.916185	0.625050	0.197051
Pd	Pd48	0.916661	0.875152	0.197079
Pd	Pd49	0.083460	0.125172	0.297191
Pd	Pd50	0.083585	0.375244	0.297176
Pd	Pd51	0.083475	0.625484	0.297195
Pd	Pd52	0.083378	0.875325	0.297298
Pd	Pd53	0.332954	0.000166	0.297277
Pd	Pd54	0.332346	0.249556	0.296711
Pd	Pd55	0.332173	0.500979	0.296312
Pd	Pd56	0.332991	0.750558	0.297123
Pd	Pd57	0.583132	0.123741	0.296820
Pd	Pd58	0.583705	0.375460	0.299243
Pd	Pd59	0.583418	0.626964	0.296571
Pd	Pd60	0.583250	0.875360	0.297170
Pd	Pd61	0.833639	0.000129	0.297184
Pd	Pd62	0.834301	0.249731	0.296998
Pd	Pd63	0.834400	0.501009	0.297057
Pd	Pd64	0.833725	0.750552	0.297248
C	C65	0.503984	0.463207	0.431731
O	O66	0.572017	0.363487	0.401365
H	H67	0.398516	0.481280	0.413544
H	H68	0.570412	0.543326	0.424578
H	H69	0.496956	0.443232	0.479010
H	H70	0.513463	0.290685	0.404853

M17 C* on Pd(111)

data_	
_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721


```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.166709      0.000088      0.196815
Pd Pd34     0.166697      0.250009      0.196811
Pd Pd35     0.167171      0.499656      0.198737
Pd Pd36     0.167190      0.750444      0.198739
Pd Pd37     0.416329      0.125052      0.196583
Pd Pd38     0.416088      0.375652      0.198657
Pd Pd39     0.416618      0.625050      0.197101
Pd Pd40     0.416074      0.874450      0.198669
Pd Pd41     0.665722      0.999742      0.196826
Pd Pd42     0.665723      0.250329      0.196827
Pd Pd43     0.666852      0.500568      0.198561
Pd Pd44     0.666832      0.749516      0.198566
Pd Pd45     0.915597      0.125033      0.196766
Pd Pd46     0.916644      0.374385      0.196606
Pd Pd47     0.917359      0.625049      0.196925
Pd Pd48     0.916641      0.875690      0.196607
Pd Pd49     0.081982      0.125113      0.296612
Pd Pd50     0.080522      0.371151      0.297347

```

Pd	Pd51	0.080104	0.625125	0.297594
Pd	Pd52	0.080530	0.879055	0.297345
Pd	Pd53	0.333079	0.003203	0.297114
Pd	Pd54	0.333105	0.247022	0.297111
Pd	Pd55	0.324825	0.487149	0.310129
Pd	Pd56	0.324832	0.763094	0.310173
Pd	Pd57	0.582641	0.125127	0.297280
Pd	Pd58	0.585378	0.371856	0.297647
Pd	Pd59	0.602088	0.625115	0.309873
Pd	Pd60	0.585359	0.878423	0.297651
Pd	Pd61	0.832289	0.001753	0.297383
Pd	Pd62	0.832301	0.248440	0.297379
Pd	Pd63	0.837365	0.496808	0.296824
Pd	Pd64	0.837347	0.753423	0.296813
C	C65	0.417617	0.625112	0.280600

M18 CH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515

Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165712	0.000000	0.196923
Pd	Pd34	0.166599	0.249866	0.196939
Pd	Pd35	0.168511	0.500000	0.198087
Pd	Pd36	0.166599	0.750134	0.196939
Pd	Pd37	0.416409	0.124954	0.196834
Pd	Pd38	0.417083	0.375054	0.198055
Pd	Pd39	0.417083	0.624946	0.198055
Pd	Pd40	0.416409	0.875046	0.196834
Pd	Pd41	0.665969	0.000000	0.197006
Pd	Pd42	0.666072	0.250846	0.197992
Pd	Pd43	0.667037	0.500000	0.197942
Pd	Pd44	0.666072	0.749154	0.197992
Pd	Pd45	0.915575	0.125360	0.196931
Pd	Pd46	0.917580	0.375218	0.197030
Pd	Pd47	0.917580	0.624782	0.197030
Pd	Pd48	0.915575	0.874640	0.196931
Pd	Pd49	0.082365	0.123982	0.296941
Pd	Pd50	0.084214	0.373823	0.297410
Pd	Pd51	0.084214	0.626177	0.297410
Pd	Pd52	0.082365	0.876018	0.296941
Pd	Pd53	0.333540	0.000000	0.296863
Pd	Pd54	0.331269	0.246493	0.297067
Pd	Pd55	0.330146	0.500000	0.301554
Pd	Pd56	0.331269	0.753507	0.297067
Pd	Pd57	0.583116	0.124919	0.297337
Pd	Pd58	0.585247	0.372280	0.301382
Pd	Pd59	0.585247	0.627720	0.301382
Pd	Pd60	0.583116	0.875081	0.297337
Pd	Pd61	0.832466	0.000000	0.297067
Pd	Pd62	0.833579	0.249738	0.297289
Pd	Pd63	0.838164	0.500000	0.297104
Pd	Pd64	0.833579	0.750262	0.297289
C	C65	0.500561	0.500000	0.348831
H	H66	0.500795	0.500000	0.397337

M19 CH₂* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
 Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
 Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
 Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
 Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000

Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166473	0.999031	0.196879
Pd	Pd34	0.167041	0.249166	0.196989
Pd	Pd35	0.168953	0.499211	0.198357
Pd	Pd36	0.166993	0.749067	0.196878
Pd	Pd37	0.416939	0.124026	0.196806
Pd	Pd38	0.417210	0.374084	0.197621
Pd	Pd39	0.417445	0.624013	0.197796
Pd	Pd40	0.417097	0.874289	0.196858
Pd	Pd41	0.666850	0.999154	0.196892
Pd	Pd42	0.666930	0.250205	0.197412
Pd	Pd43	0.667643	0.499291	0.197575
Pd	Pd44	0.666273	0.748174	0.198212
Pd	Pd45	0.916283	0.124255	0.196804
Pd	Pd46	0.918320	0.374415	0.197088
Pd	Pd47	0.917648	0.624094	0.197109
Pd	Pd48	0.916009	0.873610	0.196955
Pd	Pd49	0.083637	0.122875	0.296919
Pd	Pd50	0.085532	0.373017	0.297755
Pd	Pd51	0.084155	0.624257	0.297496
Pd	Pd52	0.082959	0.873918	0.296851
Pd	Pd53	0.333878	0.998085	0.296919
Pd	Pd54	0.333060	0.245498	0.296898
Pd	Pd55	0.333543	0.497184	0.300856
Pd	Pd56	0.332506	0.750974	0.296469
Pd	Pd57	0.584216	0.122407	0.296984
Pd	Pd58	0.586505	0.370033	0.297671
Pd	Pd59	0.585675	0.623596	0.300897
Pd	Pd60	0.584162	0.873887	0.297400
Pd	Pd61	0.833855	0.998269	0.296970
Pd	Pd62	0.835678	0.247845	0.297004
Pd	Pd63	0.837698	0.497999	0.297015
Pd	Pd64	0.833560	0.748369	0.297493
C	C65	0.487378	0.518712	0.360537

H	H66	0.540899	0.439844	0.382443
H	H67	0.446152	0.579552	0.395164

M20 CH₃* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166505	0.000004	0.196990
Pd	Pd34	0.166580	0.249907	0.196937
Pd	Pd35	0.167683	0.499998	0.198110
Pd	Pd36	0.166572	0.750088	0.196931
Pd	Pd37	0.416465	0.125163	0.196998
Pd	Pd38	0.416148	0.375754	0.198085
Pd	Pd39	0.416133	0.624238	0.198085
Pd	Pd40	0.416460	0.874834	0.196993
Pd	Pd41	0.666236	0.000003	0.196983

Pd	Pd42	0.666424	0.250243	0.196999
Pd	Pd43	0.666758	0.500001	0.196935
Pd	Pd44	0.666408	0.749757	0.196995
Pd	Pd45	0.916290	0.125020	0.197018
Pd	Pd46	0.916948	0.375073	0.196927
Pd	Pd47	0.916938	0.624923	0.196922
Pd	Pd48	0.916282	0.874987	0.197016
Pd	Pd49	0.083075	0.124974	0.296970
Pd	Pd50	0.082761	0.375006	0.296780
Pd	Pd51	0.082757	0.624994	0.296769
Pd	Pd52	0.083072	0.875021	0.296965
Pd	Pd53	0.333132	0.999998	0.297013
Pd	Pd54	0.333415	0.249420	0.296825
Pd	Pd55	0.333265	0.499991	0.303456
Pd	Pd56	0.333410	0.750579	0.296819
Pd	Pd57	0.583393	0.124790	0.297085
Pd	Pd58	0.583340	0.374512	0.296842
Pd	Pd59	0.583330	0.625490	0.296837
Pd	Pd60	0.583386	0.875216	0.297080
Pd	Pd61	0.833245	0.999997	0.296978
Pd	Pd62	0.833235	0.250025	0.296975
Pd	Pd63	0.832887	0.500004	0.296980
Pd	Pd64	0.833223	0.749976	0.296968
C	C65	0.333116	0.499990	0.393344
H	H66	0.277892	0.417314	0.407474
H	H67	0.443318	0.499976	0.407541
H	H68	0.277922	0.582678	0.407473

M21 CH₄* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'				
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166590	0.000004	0.197132
Pd	Pd34	0.166472	0.249975	0.197111
Pd	Pd35	0.166262	0.500009	0.197056
Pd	Pd36	0.166476	0.750019	0.197109
Pd	Pd37	0.416561	0.124976	0.197113
Pd	Pd38	0.416372	0.374954	0.196930
Pd	Pd39	0.416346	0.625049	0.196928
Pd	Pd40	0.416569	0.875022	0.197112
Pd	Pd41	0.666665	0.999993	0.197125
Pd	Pd42	0.666558	0.249907	0.197063
Pd	Pd43	0.666499	0.499997	0.196983
Pd	Pd44	0.666551	0.750096	0.197062
Pd	Pd45	0.916604	0.124968	0.197128
Pd	Pd46	0.916347	0.374949	0.197094
Pd	Pd47	0.916347	0.625064	0.197096
Pd	Pd48	0.916586	0.875029	0.197128
Pd	Pd49	0.083375	0.124948	0.297188
Pd	Pd50	0.083142	0.374922	0.297132
Pd	Pd51	0.083140	0.625083	0.297132
Pd	Pd52	0.083377	0.875048	0.297183
Pd	Pd53	0.333358	0.000004	0.297133
Pd	Pd54	0.333184	0.250033	0.297026
Pd	Pd55	0.332778	0.500006	0.296701
Pd	Pd56	0.333182	0.749972	0.297030
Pd	Pd57	0.583317	0.124958	0.297157
Pd	Pd58	0.583332	0.374792	0.296734
Pd	Pd59	0.583328	0.625208	0.296725
Pd	Pd60	0.583313	0.875054	0.297156
Pd	Pd61	0.833343	0.000001	0.297163
Pd	Pd62	0.833322	0.249920	0.297121
Pd	Pd63	0.833278	0.499994	0.297032
Pd	Pd64	0.833316	0.750085	0.297121
C	C65	0.494769	0.500108	0.437589
H	H66	0.440433	0.418539	0.421392
H	H67	0.440423	0.581658	0.421407
H	H68	0.603524	0.500123	0.421430
H	H69	0.494667	0.500091	0.485786

M22 CCO* on Pd(111)

data_	
_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.166132      0.000000      0.196739
Pd Pd34     0.166635      0.250096      0.196986
Pd Pd35     0.167960      0.500000      0.198306
Pd Pd36     0.166635      0.749904      0.196986
Pd Pd37     0.416700      0.124902      0.196915
Pd Pd38     0.416734      0.374880      0.197498
Pd Pd39     0.416734      0.625120      0.197498
Pd Pd40     0.416700      0.875098      0.196915
Pd Pd41     0.666370      0.000000      0.196965
Pd Pd42     0.666128      0.250878      0.198291
Pd Pd43     0.666843      0.500000      0.197363
Pd Pd44     0.666128      0.749122      0.198291
Pd Pd45     0.915923      0.125301      0.196851
Pd Pd46     0.917107      0.375131      0.197036
Pd Pd47     0.917107      0.624869      0.197036
Pd Pd48     0.915923      0.874699      0.196851
Pd Pd49     0.083197      0.124053      0.296853
Pd Pd50     0.081566      0.373502      0.297451

```


Pd	Pd51	0.081566	0.626498	0.297451
Pd	Pd52	0.083197	0.875947	0.296853
Pd	Pd53	0.333303	0.000000	0.296877
Pd	Pd54	0.331711	0.247153	0.297129
Pd	Pd55	0.325517	0.500000	0.299104
Pd	Pd56	0.331711	0.752847	0.297129
Pd	Pd57	0.583792	0.123294	0.297479
Pd	Pd58	0.586979	0.369338	0.299044
Pd	Pd59	0.586979	0.630662	0.299044
Pd	Pd60	0.583792	0.876706	0.297479
Pd	Pd61	0.833992	0.000000	0.297194
Pd	Pd62	0.834939	0.248255	0.297439
Pd	Pd63	0.835844	0.500000	0.297129
Pd	Pd64	0.834939	0.751745	0.297439
C	C65	0.499832	0.500000	0.348383
C	C66	0.499695	0.500000	0.407169
O	O67	0.499521	0.500000	0.458704

M23 CHCO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515

Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165778	0.999924	0.196778
Pd	Pd34	0.166472	0.249879	0.196765
Pd	Pd35	0.169083	0.499806	0.198616
Pd	Pd36	0.166822	0.749770	0.197008
Pd	Pd37	0.416582	0.124602	0.196764
Pd	Pd38	0.417232	0.375327	0.197713
Pd	Pd39	0.417561	0.625285	0.198030
Pd	Pd40	0.416597	0.874862	0.196830
Pd	Pd41	0.666308	0.000007	0.196806
Pd	Pd42	0.665688	0.251191	0.198627
Pd	Pd43	0.667235	0.500330	0.197921
Pd	Pd44	0.666753	0.749098	0.197593
Pd	Pd45	0.915332	0.125513	0.196954
Pd	Pd46	0.917058	0.375004	0.196912
Pd	Pd47	0.918244	0.624419	0.197019
Pd	Pd48	0.916100	0.874826	0.196723
Pd	Pd49	0.082144	0.123531	0.296762
Pd	Pd50	0.081726	0.372723	0.297277
Pd	Pd51	0.083991	0.624488	0.297681
Pd	Pd52	0.082839	0.874789	0.296968
Pd	Pd53	0.332884	0.998893	0.296714
Pd	Pd54	0.331161	0.245923	0.296388
Pd	Pd55	0.330873	0.498189	0.300568
Pd	Pd56	0.332042	0.751124	0.297083
Pd	Pd57	0.583209	0.122470	0.297526
Pd	Pd58	0.583231	0.371705	0.300372
Pd	Pd59	0.586114	0.628338	0.300644
Pd	Pd60	0.583633	0.874913	0.296979
Pd	Pd61	0.833129	0.999197	0.297096
Pd	Pd62	0.832550	0.248933	0.297569
Pd	Pd63	0.835683	0.499317	0.297090
Pd	Pd64	0.834734	0.749947	0.296776
C	C65	0.545057	0.563952	0.381607
C	C66	0.471175	0.455816	0.364464
O	O67	0.582425	0.616577	0.425264
H	H68	0.431477	0.396449	0.399728

M24 CH₂CO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851

_cell_length_b 10.986804

_cell_length_c 22.764721

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000

Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166325	0.000174	0.196961
Pd	Pd34	0.167018	0.250248	0.196916
Pd	Pd35	0.167102	0.500320	0.196528
Pd	Pd36	0.166994	0.750378	0.196910
Pd	Pd37	0.416926	0.125255	0.196978
Pd	Pd38	0.417946	0.375035	0.197998
Pd	Pd39	0.417529	0.625502	0.197796
Pd	Pd40	0.416866	0.875479	0.197001
Pd	Pd41	0.666343	0.000238	0.197126
Pd	Pd42	0.665960	0.251452	0.198445
Pd	Pd43	0.666308	0.499867	0.198099
Pd	Pd44	0.665469	0.748933	0.198675
Pd	Pd45	0.916008	0.125385	0.196873
Pd	Pd46	0.916795	0.375143	0.196721
Pd	Pd47	0.916527	0.625372	0.196655
Pd	Pd48	0.915882	0.874967	0.196946
Pd	Pd49	0.083549	0.124863	0.296958
Pd	Pd50	0.083540	0.375255	0.296769
Pd	Pd51	0.083173	0.626529	0.296799
Pd	Pd52	0.083430	0.875788	0.296999
Pd	Pd53	0.333710	0.000630	0.296844
Pd	Pd54	0.332522	0.249978	0.297097
Pd	Pd55	0.330164	0.501019	0.295939
Pd	Pd56	0.333128	0.751163	0.297090
Pd	Pd57	0.583650	0.125952	0.297397
Pd	Pd58	0.583587	0.375690	0.303465
Pd	Pd59	0.583639	0.624969	0.302013
Pd	Pd60	0.583741	0.876199	0.297568
Pd	Pd61	0.833317	0.000753	0.297131

Pd	Pd62	0.834685	0.249950	0.297074
Pd	Pd63	0.836283	0.500547	0.295943
Pd	Pd64	0.833660	0.751246	0.297118
C	C65	0.582464	0.560930	0.386773
C	C66	0.582769	0.426134	0.387255
O	O67	0.582259	0.350787	0.425549
H	H68	0.486384	0.595942	0.407736
H	H69	0.678230	0.596562	0.407711

M25 CH₃CO* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166306	0.999416	0.196918
Pd	Pd34	0.166668	0.249367	0.196824
Pd	Pd35	0.168915	0.499700	0.198151

Pd	Pd36	0.166058	0.749645	0.196546
Pd	Pd37	0.416992	0.124507	0.196807
Pd	Pd38	0.416315	0.375067	0.197670
Pd	Pd39	0.417104	0.624244	0.197798
Pd	Pd40	0.417111	0.875022	0.196484
Pd	Pd41	0.666797	0.999381	0.196912
Pd	Pd42	0.665693	0.251381	0.198773
Pd	Pd43	0.666836	0.500071	0.197581
Pd	Pd44	0.665794	0.747951	0.198144
Pd	Pd45	0.916020	0.124390	0.196855
Pd	Pd46	0.917675	0.374611	0.196933
Pd	Pd47	0.917369	0.624126	0.196884
Pd	Pd48	0.915581	0.873804	0.196937
Pd	Pd49	0.084204	0.123818	0.296886
Pd	Pd50	0.085756	0.374505	0.297155
Pd	Pd51	0.083018	0.624819	0.297176
Pd	Pd52	0.082071	0.874528	0.296990
Pd	Pd53	0.333025	0.999376	0.296913
Pd	Pd54	0.333340	0.247933	0.296387
Pd	Pd55	0.334674	0.501824	0.301805
Pd	Pd56	0.330160	0.753133	0.295414
Pd	Pd57	0.584199	0.120310	0.297425
Pd	Pd58	0.588470	0.367131	0.298180
Pd	Pd59	0.580461	0.624736	0.301589
Pd	Pd60	0.582827	0.873762	0.297167
Pd	Pd61	0.833973	0.997849	0.297283
Pd	Pd62	0.837184	0.246740	0.297236
Pd	Pd63	0.835696	0.498744	0.296435
Pd	Pd64	0.832290	0.748312	0.297269
C	C65	0.477371	0.533989	0.370020
C	C66	0.423701	0.614009	0.419412
O	O67	0.542512	0.437033	0.383931
H	H68	0.369139	0.694848	0.402501
H	H69	0.351026	0.560498	0.446771
H	H70	0.513414	0.642683	0.446603

M26 CCOH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167227	0.999000	0.196828
Pd	Pd34	0.166143	0.248999	0.196695
Pd	Pd35	0.164744	0.498540	0.196713
Pd	Pd36	0.169918	0.748682	0.198819
Pd	Pd37	0.415924	0.123331	0.197034
Pd	Pd38	0.416640	0.373956	0.197962
Pd	Pd39	0.417116	0.624666	0.197571
Pd	Pd40	0.417160	0.872441	0.198758
Pd	Pd41	0.666638	0.001494	0.196791
Pd	Pd42	0.663511	0.252566	0.199337
Pd	Pd43	0.666235	0.499572	0.197742
Pd	Pd44	0.669657	0.751551	0.196704
Pd	Pd45	0.915203	0.126081	0.196781
Pd	Pd46	0.915337	0.374582	0.196617
Pd	Pd47	0.917101	0.625205	0.196788
Pd	Pd48	0.919274	0.875698	0.197026
Pd	Pd49	0.083629	0.120899	0.296490
Pd	Pd50	0.077094	0.368500	0.296902
Pd	Pd51	0.078695	0.624953	0.297187
Pd	Pd52	0.089361	0.873435	0.297805
Pd	Pd53	0.335454	0.995288	0.297668
Pd	Pd54	0.330290	0.243641	0.297123
Pd	Pd55	0.315716	0.492522	0.295932
Pd	Pd56	0.339779	0.741817	0.306290
Pd	Pd57	0.581661	0.125994	0.297749
Pd	Pd58	0.581013	0.376286	0.306132
Pd	Pd59	0.599047	0.634912	0.295827
Pd	Pd60	0.588378	0.879787	0.297089
Pd	Pd61	0.835036	0.001848	0.297040
Pd	Pd62	0.830080	0.248529	0.297458
Pd	Pd63	0.836686	0.498117	0.296999
Pd	Pd64	0.840601	0.754871	0.297417
C	C65	0.488142	0.517658	0.343424
C	C66	0.420056	0.620308	0.366803
O	O67	0.403251	0.645915	0.423919
H	H68	0.351872	0.722872	0.427432

M27 CHCOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165894	0.999154	0.196957
Pd	Pd34	0.166137	0.249030	0.196970
Pd	Pd35	0.168027	0.498525	0.198296
Pd	Pd36	0.167161	0.749244	0.197656
Pd	Pd37	0.415802	0.123751	0.197075
Pd	Pd38	0.416126	0.374113	0.198119
Pd	Pd39	0.416886	0.623898	0.197317
Pd	Pd40	0.415744	0.873455	0.198260
Pd	Pd41	0.665786	0.998984	0.196860
Pd	Pd42	0.665655	0.249777	0.196904
Pd	Pd43	0.666728	0.499669	0.197749

Pd	Pd44	0.666500	0.748722	0.198101
Pd	Pd45	0.915429	0.124300	0.196681
Pd	Pd46	0.916901	0.374526	0.197030
Pd	Pd47	0.916641	0.624246	0.196739
Pd	Pd48	0.916062	0.873845	0.196973
Pd	Pd49	0.082457	0.123296	0.296851
Pd	Pd50	0.081563	0.371801	0.297659
Pd	Pd51	0.078061	0.624033	0.296338
Pd	Pd52	0.081814	0.874899	0.297460
Pd	Pd53	0.332667	0.998774	0.297581
Pd	Pd54	0.332171	0.246999	0.297492
Pd	Pd55	0.329781	0.495899	0.300082
Pd	Pd56	0.332820	0.750562	0.299808
Pd	Pd57	0.582292	0.123756	0.297088
Pd	Pd58	0.584449	0.371372	0.297265
Pd	Pd59	0.587590	0.624937	0.299426
Pd	Pd60	0.584445	0.876007	0.297361
Pd	Pd61	0.832923	0.999527	0.297023
Pd	Pd62	0.832608	0.247853	0.296878
Pd	Pd63	0.834706	0.497336	0.297462
Pd	Pd64	0.833616	0.750142	0.297617
C	C65	0.467044	0.565714	0.365237
C	C66	0.346227	0.638492	0.368067
O	O67	0.271071	0.654605	0.417586
H	H68	0.510589	0.515107	0.402506
H	H69	0.185873	0.700852	0.407808

M28 CH₂COH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165576	0.000332	0.196866
Pd	Pd34	0.166678	0.250341	0.196901
Pd	Pd35	0.169095	0.500468	0.198389
Pd	Pd36	0.165415	0.750388	0.196571
Pd	Pd37	0.416421	0.125493	0.196828
Pd	Pd38	0.416771	0.375510	0.198077
Pd	Pd39	0.416746	0.625289	0.197796
Pd	Pd40	0.416514	0.876075	0.196520
Pd	Pd41	0.666030	0.000195	0.197027
Pd	Pd42	0.665958	0.251386	0.198269
Pd	Pd43	0.666792	0.500285	0.197972
Pd	Pd44	0.665119	0.748643	0.198436
Pd	Pd45	0.915619	0.125344	0.196901
Pd	Pd46	0.917772	0.375497	0.196972
Pd	Pd47	0.916881	0.624832	0.196969
Pd	Pd48	0.914829	0.874664	0.196982
Pd	Pd49	0.082816	0.125832	0.296827
Pd	Pd50	0.084793	0.376045	0.297337
Pd	Pd51	0.082502	0.626730	0.297265
Pd	Pd52	0.081235	0.876554	0.296893
Pd	Pd53	0.332577	0.001441	0.296886
Pd	Pd54	0.332509	0.249735	0.296817
Pd	Pd55	0.333820	0.503185	0.301994
Pd	Pd56	0.329015	0.755776	0.295782
Pd	Pd57	0.583267	0.124122	0.297397
Pd	Pd58	0.586135	0.371150	0.300371
Pd	Pd59	0.580004	0.625856	0.301908
Pd	Pd60	0.581691	0.875726	0.297354
Pd	Pd61	0.832471	0.000045	0.297202
Pd	Pd62	0.834664	0.249593	0.297169
Pd	Pd63	0.834934	0.500509	0.296786
Pd	Pd64	0.831160	0.750040	0.297329
C	C65	0.545629	0.431113	0.384346
C	C66	0.470900	0.543272	0.368504
O	O67	0.423950	0.614267	0.412748
H	H68	0.646870	0.445629	0.406625
H	H69	0.480555	0.362465	0.406662
H	H70	0.376272	0.685815	0.394939

M29 CH₃COH* on Pd(111)

data_	
_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.165565      0.000143      0.196931
Pd Pd34     0.166124      0.250370      0.197133
Pd Pd35     0.169568      0.500732      0.199086
Pd Pd36     0.164956      0.750246      0.196170
Pd Pd37     0.416147      0.125717      0.196841
Pd Pd38     0.415785      0.375671      0.197617
Pd Pd39     0.417360      0.624153      0.198451
Pd Pd40     0.416721      0.876413      0.196168
Pd Pd41     0.666183      0.999497      0.197029
Pd Pd42     0.667024      0.249929      0.196256
Pd Pd43     0.667156      0.500902      0.197633
Pd Pd44     0.664403      0.747977      0.198984
Pd Pd45     0.915953      0.124661      0.196910
Pd Pd46     0.917967      0.375777      0.197144
Pd Pd47     0.916948      0.624914      0.197230
Pd Pd48     0.914580      0.874082      0.197126
Pd Pd49     0.082769      0.125765      0.297006
Pd Pd50     0.085448      0.376409      0.297806

```

Pd	Pd51	0.082282	0.626577	0.297553
Pd	Pd52	0.080858	0.876179	0.296788
Pd	Pd53	0.332345	0.001381	0.296891
Pd	Pd54	0.332781	0.250018	0.297108
Pd	Pd55	0.335872	0.502562	0.305214
Pd	Pd56	0.329225	0.755549	0.293703
Pd	Pd57	0.582770	0.124632	0.296846
Pd	Pd58	0.585958	0.371573	0.294357
Pd	Pd59	0.579544	0.624113	0.305221
Pd	Pd60	0.581647	0.875848	0.297497
Pd	Pd61	0.832260	0.999961	0.297135
Pd	Pd62	0.834609	0.249862	0.296704
Pd	Pd63	0.834503	0.500057	0.297333
Pd	Pd64	0.830198	0.749484	0.297706
C	C65	0.525404	0.460864	0.413233
C	C66	0.461361	0.557645	0.374499
O	O67	0.404812	0.643083	0.410239
H	H68	0.575016	0.385596	0.388288
H	H69	0.443033	0.421568	0.441424
H	H70	0.606346	0.502458	0.441379
H	H71	0.361133	0.708401	0.385599

M30 CCHO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515

Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165708	0.999926	0.196835
Pd	Pd34	0.166679	0.249869	0.196948
Pd	Pd35	0.168585	0.499919	0.198195
Pd	Pd36	0.166902	0.749958	0.196963
Pd	Pd37	0.416314	0.124818	0.196818
Pd	Pd38	0.417236	0.374666	0.197807
Pd	Pd39	0.417247	0.624859	0.197874
Pd	Pd40	0.416444	0.874909	0.196843
Pd	Pd41	0.665988	0.999987	0.196981
Pd	Pd42	0.666120	0.250765	0.197911
Pd	Pd43	0.667400	0.499795	0.197705
Pd	Pd44	0.666220	0.749185	0.198125
Pd	Pd45	0.915636	0.125353	0.196871
Pd	Pd46	0.917730	0.375209	0.197062
Pd	Pd47	0.917694	0.624766	0.197076
Pd	Pd48	0.915722	0.874557	0.196886
Pd	Pd49	0.082479	0.123998	0.296828
Pd	Pd50	0.083838	0.373621	0.297546
Pd	Pd51	0.084139	0.626146	0.297498
Pd	Pd52	0.082745	0.875920	0.296823
Pd	Pd53	0.333629	0.999768	0.296747
Pd	Pd54	0.331446	0.246438	0.297146
Pd	Pd55	0.329462	0.499490	0.300506
Pd	Pd56	0.331734	0.752965	0.297195
Pd	Pd57	0.583101	0.124935	0.297258
Pd	Pd58	0.585152	0.372501	0.300760
Pd	Pd59	0.586178	0.628086	0.300402
Pd	Pd60	0.583273	0.875344	0.297381
Pd	Pd61	0.832727	0.000025	0.296923
Pd	Pd62	0.833387	0.249704	0.297209
Pd	Pd63	0.838064	0.499948	0.297186
Pd	Pd64	0.834139	0.750526	0.297414
C	C65	0.499985	0.500875	0.348831
C	C66	0.497122	0.505250	0.414061
O	O67	0.550666	0.426261	0.444716
H	H68	0.442273	0.586005	0.432867

M31 CHCHO* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label

```

_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166129	0.999814	0.196681	
Pd	Pd34	0.166963	0.249878	0.196931	
Pd	Pd35	0.168620	0.499724	0.198354	
Pd	Pd36	0.165903	0.749694	0.196544	
Pd	Pd37	0.417102	0.124763	0.196822	
Pd	Pd38	0.417120	0.375071	0.198251	
Pd	Pd39	0.417027	0.624552	0.197579	
Pd	Pd40	0.416992	0.875285	0.196536	
Pd	Pd41	0.666931	0.999463	0.196773	
Pd	Pd42	0.666600	0.250847	0.197713	
Pd	Pd43	0.666450	0.499676	0.198216	
Pd	Pd44	0.665996	0.748126	0.198474	
Pd	Pd45	0.916332	0.124386	0.196726	
Pd	Pd46	0.917882	0.374774	0.197034	
Pd	Pd47	0.916691	0.624268	0.196893	
Pd	Pd48	0.915513	0.873840	0.196953	
Pd	Pd49	0.084010	0.124988	0.296918	
Pd	Pd50	0.084521	0.375371	0.297625	
Pd	Pd51	0.080870	0.625654	0.297180	
Pd	Pd52	0.081915	0.875490	0.296816	
Pd	Pd53	0.332275	0.000534	0.296818	
Pd	Pd54	0.333044	0.249032	0.296680	
Pd	Pd55	0.331542	0.502821	0.300835	
Pd	Pd56	0.329709	0.754345	0.295470	
Pd	Pd57	0.584167	0.121341	0.296964	

Pd	Pd58	0.588184	0.367653	0.298046
Pd	Pd59	0.581310	0.628035	0.300725
Pd	Pd60	0.583422	0.876280	0.297225
Pd	Pd61	0.834411	0.999154	0.297312
Pd	Pd62	0.837315	0.247594	0.296810
Pd	Pd63	0.834209	0.499416	0.296779
Pd	Pd64	0.832514	0.749718	0.297689
C	C65	0.451659	0.572789	0.367801
C	C66	0.511324	0.482858	0.406011
O	O67	0.575607	0.387133	0.390436
H	H68	0.401321	0.648259	0.391705
H	H69	0.501286	0.496597	0.454057

M32 CH₂CHO* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515

Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167039	0.000440	0.196889
Pd	Pd34	0.167118	0.250091	0.196914
Pd	Pd35	0.168042	0.500138	0.197372
Pd	Pd36	0.167135	0.750478	0.197407
Pd	Pd37	0.417325	0.125274	0.196903
Pd	Pd38	0.416580	0.376298	0.197766
Pd	Pd39	0.416632	0.625395	0.197820
Pd	Pd40	0.416050	0.874161	0.198404
Pd	Pd41	0.666665	0.999479	0.196808
Pd	Pd42	0.667056	0.250272	0.196813
Pd	Pd43	0.666715	0.500385	0.197422
Pd	Pd44	0.665445	0.748306	0.198665
Pd	Pd45	0.916746	0.125093	0.196929
Pd	Pd46	0.917412	0.375295	0.196781
Pd	Pd47	0.916981	0.625268	0.196534
Pd	Pd48	0.916498	0.874978	0.196731
Pd	Pd49	0.834944	0.001324	0.297094
Pd	Pd50	0.835743	0.752234	0.296847
Pd	Pd51	0.835880	0.499121	0.296389
Pd	Pd52	0.835380	0.249733	0.297099
Pd	Pd53	0.584305	0.125583	0.297101
Pd	Pd54	0.585113	0.878206	0.296931
Pd	Pd55	0.588895	0.625916	0.299621
Pd	Pd56	0.585709	0.372814	0.296456
Pd	Pd57	0.334070	0.001904	0.297065
Pd	Pd58	0.331642	0.751935	0.300667
Pd	Pd59	0.333950	0.501760	0.299947
Pd	Pd60	0.333986	0.250637	0.296858
Pd	Pd61	0.084502	0.125729	0.297076
Pd	Pd62	0.083684	0.876594	0.296820
Pd	Pd63	0.081372	0.625434	0.295919
Pd	Pd64	0.084485	0.375081	0.297081
C	C65	0.333785	0.708679	0.390389
C	C66	0.404552	0.591667	0.390261
O	O67	0.540454	0.582800	0.387960
H	H68	0.398525	0.784363	0.406493
H	H69	0.225465	0.707932	0.406615
H	H70	0.344164	0.508592	0.402986

M33 CH₃CHO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000

Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165166	0.001126	0.196863
Pd	Pd34	0.165238	0.251109	0.196764
Pd	Pd35	0.168112	0.501038	0.198679
Pd	Pd36	0.164829	0.751199	0.196649
Pd	Pd37	0.415939	0.125890	0.196611
Pd	Pd38	0.416359	0.375873	0.197484
Pd	Pd39	0.415400	0.625864	0.196958
Pd	Pd40	0.415965	0.876572	0.196733
Pd	Pd41	0.665884	0.000743	0.196912
Pd	Pd42	0.665339	0.251846	0.197759
Pd	Pd43	0.665172	0.500585	0.197654
Pd	Pd44	0.664017	0.748906	0.198970
Pd	Pd45	0.915188	0.126120	0.196916
Pd	Pd46	0.916363	0.376273	0.196820
Pd	Pd47	0.915711	0.625764	0.196717
Pd	Pd48	0.914361	0.875543	0.196968
Pd	Pd49	0.080028	0.127326	0.297191
Pd	Pd50	0.079191	0.376960	0.297546
Pd	Pd51	0.078467	0.629415	0.297283
Pd	Pd52	0.080118	0.878719	0.296924
Pd	Pd53	0.330513	0.003531	0.296945
Pd	Pd54	0.328891	0.251090	0.295783
Pd	Pd55	0.325907	0.504548	0.298414
Pd	Pd56	0.328680	0.756261	0.295718
Pd	Pd57	0.581425	0.126969	0.296911
Pd	Pd58	0.582609	0.373678	0.300291
Pd	Pd59	0.580952	0.632344	0.298528
Pd	Pd60	0.581289	0.880774	0.297656
Pd	Pd61	0.831542	0.003095	0.297488
Pd	Pd62	0.831631	0.251968	0.297136
Pd	Pd63	0.831995	0.502979	0.296143
Pd	Pd64	0.831782	0.754059	0.297567

C	C65	0.459025	0.342101	0.420707
C	C66	0.540350	0.435637	0.386282
O	O67	0.473677	0.539662	0.372948
H	H68	0.356371	0.322797	0.399929
H	H69	0.438132	0.378148	0.465171
H	H70	0.518938	0.257130	0.424658
H	H71	0.651080	0.448833	0.399919

M34 CCHOH* on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165296	0.999749	0.196738
Pd	Pd34	0.166080	0.249961	0.196935
Pd	Pd35	0.168067	0.499638	0.198923
Pd	Pd36	0.166312	0.749465	0.196974

Pd	Pd37	0.415949	0.124679	0.196757
Pd	Pd38	0.417156	0.374772	0.197841
Pd	Pd39	0.417021	0.624734	0.197935
Pd	Pd40	0.415884	0.874736	0.196848
Pd	Pd41	0.665506	0.999675	0.196933
Pd	Pd42	0.665557	0.250588	0.198164
Pd	Pd43	0.666742	0.499759	0.197699
Pd	Pd44	0.665518	0.748802	0.198118
Pd	Pd45	0.915215	0.125149	0.196900
Pd	Pd46	0.916735	0.374935	0.197003
Pd	Pd47	0.916760	0.624453	0.196959
Pd	Pd48	0.915274	0.874275	0.196839
Pd	Pd49	0.081715	0.122926	0.296913
Pd	Pd50	0.078549	0.371454	0.297820
Pd	Pd51	0.078996	0.626669	0.297644
Pd	Pd52	0.081726	0.875611	0.296807
Pd	Pd53	0.332237	0.999211	0.296751
Pd	Pd54	0.330358	0.246245	0.296669
Pd	Pd55	0.319781	0.498604	0.299761
Pd	Pd56	0.330540	0.751979	0.297000
Pd	Pd57	0.582088	0.123642	0.297298
Pd	Pd58	0.585236	0.370950	0.300583
Pd	Pd59	0.586006	0.628340	0.300469
Pd	Pd60	0.582319	0.875108	0.297319
Pd	Pd61	0.831817	0.999349	0.297034
Pd	Pd62	0.832391	0.247695	0.297490
Pd	Pd63	0.835704	0.499277	0.297439
Pd	Pd64	0.832933	0.751004	0.297408
C	C65	0.500784	0.500286	0.347721
C	C66	0.406010	0.498821	0.394906
O	O67	0.380399	0.601451	0.426847
H	H68	0.372335	0.412299	0.414243
H	H69	0.307372	0.584585	0.455819

M35 CHCHOH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000

Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165406	0.000183	0.196869
Pd	Pd34	0.166320	0.250165	0.196991
Pd	Pd35	0.168732	0.500333	0.198433
Pd	Pd36	0.166068	0.750279	0.196764
Pd	Pd37	0.416162	0.125123	0.196770
Pd	Pd38	0.416480	0.375002	0.197814
Pd	Pd39	0.416814	0.624918	0.197814
Pd	Pd40	0.416305	0.875487	0.196753
Pd	Pd41	0.665908	0.000054	0.196946
Pd	Pd42	0.665972	0.251380	0.197963
Pd	Pd43	0.666624	0.500380	0.197956
Pd	Pd44	0.665185	0.748917	0.198810
Pd	Pd45	0.915528	0.125220	0.196853
Pd	Pd46	0.917764	0.375609	0.197017
Pd	Pd47	0.916725	0.625197	0.196891
Pd	Pd48	0.914842	0.874582	0.197012
Pd	Pd49	0.082237	0.125590	0.296906
Pd	Pd50	0.084266	0.376000	0.297587
Pd	Pd51	0.081551	0.627051	0.297181
Pd	Pd52	0.081083	0.876619	0.296758
Pd	Pd53	0.332244	0.001204	0.296775
Pd	Pd54	0.331957	0.248973	0.296901
Pd	Pd55	0.332290	0.502090	0.301027
Pd	Pd56	0.330024	0.754508	0.296327
Pd	Pd57	0.583077	0.124699	0.297108
Pd	Pd58	0.585040	0.371461	0.299789
Pd	Pd59	0.581219	0.626975	0.301696
Pd	Pd60	0.582122	0.876806	0.297674
Pd	Pd61	0.832184	0.000571	0.297237
Pd	Pd62	0.834282	0.250008	0.297048
Pd	Pd63	0.834975	0.500509	0.296687
Pd	Pd64	0.831240	0.750481	0.297703
C	C65	0.475209	0.538785	0.365328
C	C66	0.545802	0.428758	0.385480
O	O67	0.463378	0.348397	0.417302
H	H68	0.422538	0.598427	0.397535
H	H69	0.654878	0.436746	0.401428
H	H70	0.520939	0.278656	0.428711

M36 CH₂CHOH* on Pd(111)

data_					
_cell_length_a		9.514851			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		22.764721			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'				
loop_					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166444	0.000101	0.196994	
Pd	Pd34	0.167113	0.249817	0.196932	
Pd	Pd35	0.166618	0.499852	0.196430	
Pd	Pd36	0.166654	0.750124	0.196858	
Pd	Pd37	0.416978	0.124831	0.197010	
Pd	Pd38	0.417722	0.374773	0.197748	
Pd	Pd39	0.417196	0.625174	0.197524	
Pd	Pd40	0.416893	0.875102	0.196990	
Pd	Pd41	0.666385	0.000150	0.197177	
Pd	Pd42	0.665356	0.251882	0.198908	
Pd	Pd43	0.666303	0.499944	0.197825	

Pd	Pd44	0.665387	0.748425	0.198427
Pd	Pd45	0.915841	0.125361	0.196963
Pd	Pd46	0.916710	0.374727	0.196698
Pd	Pd47	0.916607	0.625021	0.196494
Pd	Pd48	0.916018	0.875141	0.196769
Pd	Pd49	0.083560	0.124556	0.296975
Pd	Pd50	0.083286	0.373965	0.296821
Pd	Pd51	0.083234	0.625611	0.296633
Pd	Pd52	0.083435	0.875594	0.297008
Pd	Pd53	0.333709	0.999961	0.296970
Pd	Pd54	0.333438	0.249625	0.297021
Pd	Pd55	0.329751	0.499766	0.295293
Pd	Pd56	0.332756	0.750595	0.296899
Pd	Pd57	0.583660	0.124883	0.297482
Pd	Pd58	0.584236	0.376917	0.303211
Pd	Pd59	0.583158	0.623773	0.302072
Pd	Pd60	0.583512	0.874872	0.297482
Pd	Pd61	0.833133	0.999872	0.297231
Pd	Pd62	0.833813	0.249195	0.297157
Pd	Pd63	0.836348	0.500046	0.295721
Pd	Pd64	0.834245	0.750793	0.296425
C	C65	0.577970	0.441883	0.390317
C	C66	0.586593	0.573837	0.392176
O	O67	0.708491	0.619331	0.416766
H	H68	0.475719	0.405142	0.403748
H	H69	0.668704	0.395355	0.409828
H	H70	0.490376	0.625095	0.402919
H	H71	0.709279	0.708030	0.412283

M37 CH₃CHOH* on Pd(111)

data

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000

Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166517	0.000273	0.197125
Pd	Pd34	0.166538	0.250071	0.197137
Pd	Pd35	0.166814	0.500138	0.196951
Pd	Pd36	0.166908	0.750034	0.196940
Pd	Pd37	0.416878	0.125100	0.197087
Pd	Pd38	0.416406	0.374941	0.196823
Pd	Pd39	0.417856	0.625044	0.198308
Pd	Pd40	0.416453	0.875185	0.196855
Pd	Pd41	0.666827	0.999982	0.196927
Pd	Pd42	0.667045	0.250061	0.196975
Pd	Pd43	0.665850	0.501087	0.198157
Pd	Pd44	0.665929	0.749117	0.198189
Pd	Pd45	0.916691	0.125208	0.197140
Pd	Pd46	0.916333	0.375343	0.197046
Pd	Pd47	0.916669	0.625015	0.196854
Pd	Pd48	0.916484	0.874996	0.196844
Pd	Pd49	0.083639	0.125270	0.297331
Pd	Pd50	0.083650	0.374939	0.297123
Pd	Pd51	0.084014	0.625233	0.296947
Pd	Pd52	0.083810	0.875470	0.297097
Pd	Pd53	0.333508	0.000236	0.297060
Pd	Pd54	0.333537	0.250046	0.297128
Pd	Pd55	0.333333	0.499741	0.296756
Pd	Pd56	0.333421	0.750294	0.296839
Pd	Pd57	0.583719	0.125198	0.297301
Pd	Pd58	0.583126	0.373806	0.296386
Pd	Pd59	0.584159	0.625926	0.304998
Pd	Pd60	0.583514	0.876097	0.296298
Pd	Pd61	0.833645	0.000397	0.297076
Pd	Pd62	0.833362	0.250210	0.297384
Pd	Pd63	0.834057	0.500293	0.296706
Pd	Pd64	0.834524	0.750933	0.296497
C	C65	0.610142	0.736496	0.425345
C	C66	0.588183	0.614761	0.396828
O	O67	0.692473	0.534029	0.413436
H	H68	0.528796	0.801370	0.411394
H	H69	0.714291	0.774129	0.414742
H	H70	0.603799	0.725875	0.473547
H	H71	0.481227	0.576750	0.401280
H	H72	0.669207	0.452665	0.397827

M38 CCH₂O* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.166391      0.999702      0.196965
Pd Pd34     0.167341      0.249318      0.196665
Pd Pd35     0.166633      0.499276      0.196549
Pd Pd36     0.169126      0.749805      0.199240
Pd Pd37     0.416506      0.123185      0.197032
Pd Pd38     0.418890      0.373132      0.197630
Pd Pd39     0.416940      0.625037      0.196704
Pd Pd40     0.415760      0.872565      0.199524
Pd Pd41     0.665980      0.000569      0.197023
Pd Pd42     0.665230      0.251162      0.199269
Pd Pd43     0.667525      0.497981      0.197441
Pd Pd44     0.667986      0.750638      0.196590
Pd Pd45     0.915405      0.125867      0.197014
Pd Pd46     0.916961      0.374518      0.196881

```

Pd	Pd47	0.917730	0.624876	0.196736
Pd	Pd48	0.917476	0.875377	0.196908
Pd	Pd49	0.082532	0.122932	0.296712
Pd	Pd50	0.081714	0.371379	0.296993
Pd	Pd51	0.083714	0.624514	0.297064
Pd	Pd52	0.084455	0.875238	0.297404
Pd	Pd53	0.334799	0.998820	0.297502
Pd	Pd54	0.331284	0.244873	0.297111
Pd	Pd55	0.327077	0.494331	0.295049
Pd	Pd56	0.337704	0.746548	0.304918
Pd	Pd57	0.582898	0.126934	0.298044
Pd	Pd58	0.580887	0.378567	0.308645
Pd	Pd59	0.592107	0.627558	0.295025
Pd	Pd60	0.586412	0.876220	0.297106
Pd	Pd61	0.833123	0.001023	0.296947
Pd	Pd62	0.831029	0.250583	0.297955
Pd	Pd63	0.838644	0.499136	0.297087
Pd	Pd64	0.836872	0.751314	0.297016
C	C65	0.486935	0.520164	0.346938
C	C66	0.445027	0.584570	0.403201
O	O67	0.363663	0.688701	0.389329
H	H68	0.382829	0.521682	0.431085
H	H69	0.541294	0.610392	0.427732

M39 CHCH₂O* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515

Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165965	0.000200	0.196898
Pd	Pd34	0.166892	0.250261	0.196943
Pd	Pd35	0.168593	0.500089	0.198316
Pd	Pd36	0.167136	0.750094	0.197890
Pd	Pd37	0.416555	0.125146	0.196784
Pd	Pd38	0.416810	0.375069	0.197366
Pd	Pd39	0.416885	0.624654	0.198138
Pd	Pd40	0.415996	0.874638	0.197927
Pd	Pd41	0.666065	0.999546	0.196806
Pd	Pd42	0.667083	0.249963	0.196496
Pd	Pd43	0.667265	0.500229	0.197258
Pd	Pd44	0.665368	0.748773	0.198308
Pd	Pd45	0.916229	0.124887	0.196788
Pd	Pd46	0.917921	0.375489	0.197076
Pd	Pd47	0.917030	0.625003	0.196826
Pd	Pd48	0.915334	0.874351	0.196761
Pd	Pd49	0.832396	0.000593	0.296854
Pd	Pd50	0.830639	0.749889	0.297309
Pd	Pd51	0.834352	0.499967	0.297176
Pd	Pd52	0.834154	0.250370	0.296862
Pd	Pd53	0.583608	0.125631	0.296937
Pd	Pd54	0.583247	0.877024	0.297207
Pd	Pd55	0.581968	0.624586	0.300924
Pd	Pd56	0.585883	0.372188	0.295787
Pd	Pd57	0.332704	0.003428	0.296899
Pd	Pd58	0.328629	0.756351	0.298187
Pd	Pd59	0.334169	0.500495	0.300920
Pd	Pd60	0.332935	0.250099	0.297214
Pd	Pd61	0.082457	0.126342	0.296944
Pd	Pd62	0.079289	0.877293	0.296648
Pd	Pd63	0.080687	0.625953	0.297001
Pd	Pd64	0.084475	0.375923	0.297620
C	C65	0.463243	0.554912	0.366613
C	C66	0.402165	0.646087	0.408485
O	O67	0.334819	0.748312	0.385351
H	H68	0.513919	0.478931	0.390482
H	H69	0.490023	0.676084	0.437582
H	H70	0.327608	0.595272	0.437308

M40 CH₂CH₂O* on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.333333 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.333333 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.583333 0.125000 0.000000
Pd Pd10 0.583333 0.375000 0.000000
Pd Pd11 0.583333 0.625000 0.000000
Pd Pd12 0.583333 0.875000 0.000000
Pd Pd13 0.833333 0.000000 0.000000
Pd Pd14 0.833333 0.250000 0.000000
Pd Pd15 0.833333 0.500000 0.000000
Pd Pd16 0.833333 0.750000 0.000000
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.098515
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.098515
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.098515
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.098515
Pd Pd21 0.250000 0.125000 0.098515
Pd Pd22 0.250000 0.375000 0.098515
Pd Pd23 0.250000 0.625000 0.098515
Pd Pd24 0.250000 0.875000 0.098515
Pd Pd25 0.500000 0.000000 0.098515
Pd Pd26 0.500000 0.250000 0.098515
Pd Pd27 0.500000 0.500000 0.098515
Pd Pd28 0.500000 0.750000 0.098515
Pd Pd29 0.750000 0.125000 0.098515
Pd Pd30 0.750000 0.375000 0.098515
Pd Pd31 0.750000 0.625000 0.098515
Pd Pd32 0.750000 0.875000 0.098515
Pd Pd33 0.165625 0.000941 0.196796
Pd Pd34 0.166685 0.250878 0.197065
Pd Pd35 0.169131 0.500491 0.198833
Pd Pd36 0.164965 0.750837 0.196465
Pd Pd37 0.416593 0.125927 0.196807
Pd Pd38 0.417525 0.375330 0.198408
Pd Pd39 0.416358 0.625929 0.196700
Pd Pd40 0.416254 0.876684 0.196587
Pd Pd41 0.666213 0.000077 0.196890
Pd Pd42 0.666787 0.250581 0.197180
Pd Pd43 0.665742 0.500222 0.198144
Pd Pd44 0.664234 0.748075 0.199331
Pd Pd45 0.916188 0.125400 0.196660
Pd Pd46 0.917477 0.376146 0.196688
Pd Pd47 0.916055 0.625352 0.196664
Pd Pd48 0.914451 0.874878 0.196915
Pd Pd49 0.081724 0.127165 0.297128
Pd Pd50 0.080801 0.376593 0.297623
Pd Pd51 0.078122 0.628803 0.297098
Pd Pd52 0.080396 0.878229 0.296662
Pd Pd53 0.331364 0.003889 0.296979

```

Pd	Pd54	0.331441	0.252018	0.297079
Pd	Pd55	0.326367	0.505536	0.297719
Pd	Pd56	0.328574	0.757294	0.295181
Pd	Pd57	0.582764	0.125687	0.296988
Pd	Pd58	0.586698	0.370813	0.299751
Pd	Pd59	0.580509	0.629941	0.300088
Pd	Pd60	0.581930	0.879825	0.297519
Pd	Pd61	0.832713	0.001904	0.297361
Pd	Pd62	0.834248	0.250175	0.296247
Pd	Pd63	0.832429	0.501944	0.296284
Pd	Pd64	0.831442	0.752716	0.297572
C	C65	0.605718	0.391313	0.389235
C	C66	0.485863	0.470395	0.410016
O	O67	0.446131	0.564876	0.369433
H	H68	0.605676	0.300047	0.408948
H	H69	0.709035	0.434869	0.395425
H	H70	0.391501	0.415097	0.418762
H	H71	0.515091	0.516958	0.451464

M41 CH₃CH₂O* on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515

Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166853	0.999611	0.196888
Pd	Pd34	0.166348	0.249650	0.196893
Pd	Pd35	0.167667	0.499563	0.198592
Pd	Pd36	0.166328	0.749575	0.196896
Pd	Pd37	0.417323	0.124162	0.196843
Pd	Pd38	0.416366	0.374401	0.196776
Pd	Pd39	0.416227	0.624729	0.196659
Pd	Pd40	0.417321	0.874909	0.196867
Pd	Pd41	0.667257	0.999509	0.197039
Pd	Pd42	0.665971	0.250727	0.198556
Pd	Pd43	0.666032	0.499497	0.196641
Pd	Pd44	0.666047	0.748397	0.198488
Pd	Pd45	0.916383	0.124786	0.196862
Pd	Pd46	0.916812	0.374575	0.196905
Pd	Pd47	0.916836	0.624550	0.196922
Pd	Pd48	0.916478	0.874365	0.196896
Pd	Pd49	0.083690	0.123371	0.297096
Pd	Pd50	0.080297	0.372491	0.297710
Pd	Pd51	0.080178	0.625830	0.297757
Pd	Pd52	0.083646	0.874954	0.297173
Pd	Pd53	0.333182	0.999076	0.297255
Pd	Pd54	0.331973	0.246988	0.296268
Pd	Pd55	0.323475	0.499212	0.296497
Pd	Pd56	0.331842	0.751349	0.296229
Pd	Pd57	0.584055	0.121108	0.297591
Pd	Pd58	0.588175	0.366454	0.296951
Pd	Pd59	0.587964	0.631631	0.296544
Pd	Pd60	0.584081	0.877005	0.297731
Pd	Pd61	0.835195	0.999094	0.297400
Pd	Pd62	0.836104	0.246403	0.297588
Pd	Pd63	0.834245	0.499127	0.296138
Pd	Pd64	0.835973	0.751774	0.297601
C	C65	0.421018	0.616928	0.439159
C	C66	0.496814	0.503526	0.418464
O	O67	0.500155	0.499026	0.355084
H	H68	0.474767	0.699078	0.423008
H	H69	0.312197	0.617828	0.422775
H	H70	0.418702	0.619816	0.487423
H	H71	0.443705	0.420132	0.433568
H	H72	0.606601	0.501597	0.433773

M42 CCH₂OH* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol

```

_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.165809	0.000181	0.196886
Pd Pd34	0.166956	0.250083	0.197065
Pd Pd35	0.168671	0.500239	0.198003
Pd Pd36	0.166907	0.750331	0.196963
Pd Pd37	0.416439	0.125315	0.196937
Pd Pd38	0.417122	0.375019	0.197930
Pd Pd39	0.417227	0.625239	0.197928
Pd Pd40	0.416579	0.875300	0.196852
Pd Pd41	0.666001	0.000242	0.197052
Pd Pd42	0.666244	0.251085	0.197964
Pd Pd43	0.667326	0.500206	0.197832
Pd Pd44	0.666185	0.749363	0.198181
Pd Pd45	0.915705	0.125585	0.196912
Pd Pd46	0.917837	0.375509	0.197077
Pd Pd47	0.917736	0.625030	0.197053
Pd Pd48	0.915637	0.874802	0.196949
Pd Pd49	0.082598	0.124528	0.296861
Pd Pd50	0.084725	0.374551	0.297462
Pd Pd51	0.084702	0.626492	0.297377
Pd Pd52	0.082719	0.876345	0.296872
Pd Pd53	0.333866	0.000459	0.296765
Pd Pd54	0.331655	0.247166	0.297665
Pd Pd55	0.331303	0.500417	0.300824
Pd Pd56	0.331824	0.753810	0.297208

Pd	Pd57	0.583436	0.125712	0.297383
Pd	Pd58	0.585073	0.373505	0.300790
Pd	Pd59	0.585534	0.628078	0.301125
Pd	Pd60	0.583479	0.875668	0.297472
Pd	Pd61	0.832766	0.000554	0.297056
Pd	Pd62	0.833766	0.250491	0.297263
Pd	Pd63	0.838349	0.500585	0.297215
Pd	Pd64	0.833977	0.750730	0.297447
C	C65	0.500989	0.501154	0.349709
C	C66	0.498746	0.498676	0.415441
O	O67	0.426059	0.391765	0.434703
H	H68	0.446577	0.582973	0.430918
H	H69	0.609013	0.500390	0.431167
H	H70	0.426633	0.391261	0.477455

M43 CHCH₂OH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515

Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165076	0.000196	0.196953
Pd	Pd34	0.166148	0.250367	0.197117
Pd	Pd35	0.168129	0.500431	0.198598
Pd	Pd36	0.166457	0.750326	0.197188
Pd	Pd37	0.415896	0.125267	0.196732
Pd	Pd38	0.415836	0.375462	0.197433
Pd	Pd39	0.416473	0.625088	0.198216
Pd	Pd40	0.415572	0.875142	0.196981
Pd	Pd41	0.665557	0.999788	0.196782
Pd	Pd42	0.666397	0.250127	0.196654
Pd	Pd43	0.666662	0.500545	0.197499
Pd	Pd44	0.664881	0.748591	0.198621
Pd	Pd45	0.915626	0.124861	0.196858
Pd	Pd46	0.917309	0.375669	0.197145
Pd	Pd47	0.916518	0.625118	0.197023
Pd	Pd48	0.914652	0.874249	0.197022
Pd	Pd49	0.831237	0.000754	0.297138
Pd	Pd50	0.829726	0.749937	0.297759
Pd	Pd51	0.833592	0.499627	0.297427
Pd	Pd52	0.833218	0.250219	0.296900
Pd	Pd53	0.582068	0.124999	0.297002
Pd	Pd54	0.582278	0.876939	0.297023
Pd	Pd55	0.581681	0.625115	0.301977
Pd	Pd56	0.584740	0.371961	0.295645
Pd	Pd57	0.331314	0.002214	0.296607
Pd	Pd58	0.326474	0.754611	0.296949
Pd	Pd59	0.333038	0.501806	0.302065
Pd	Pd60	0.332041	0.249716	0.297230
Pd	Pd61	0.081476	0.126153	0.297050
Pd	Pd62	0.078612	0.877037	0.296806
Pd	Pd63	0.079525	0.625915	0.297304
Pd	Pd64	0.084009	0.376064	0.297785
C	C65	0.466965	0.550140	0.367291
C	C66	0.416050	0.630625	0.416429
O	O67	0.368412	0.750625	0.400092
H	H68	0.514879	0.467514	0.387072
H	H69	0.499940	0.638817	0.449845
H	H70	0.325028	0.586860	0.437807
H	H71	0.451962	0.801142	0.392456

M44 CH₂CH₂OH* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd      Pd1      0.083333      0.125000      0.000000

```

Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166443	0.000050	0.196936
Pd	Pd34	0.166187	0.249873	0.196963
Pd	Pd35	0.166943	0.499841	0.197417
Pd	Pd36	0.167243	0.750174	0.198136
Pd	Pd37	0.416064	0.124880	0.196910
Pd	Pd38	0.415751	0.375800	0.197575
Pd	Pd39	0.415492	0.625425	0.198114
Pd	Pd40	0.415835	0.874128	0.198184
Pd	Pd41	0.665950	0.999889	0.196934
Pd	Pd42	0.665624	0.249869	0.196860
Pd	Pd43	0.666241	0.500040	0.196862
Pd	Pd44	0.666510	0.750235	0.196701
Pd	Pd45	0.915920	0.125045	0.196938
Pd	Pd46	0.915924	0.374970	0.196886
Pd	Pd47	0.916504	0.625083	0.196810
Pd	Pd48	0.916435	0.875038	0.196896
Pd	Pd49	0.832387	0.000215	0.297004
Pd	Pd50	0.832484	0.750404	0.297046
Pd	Pd51	0.832462	0.499972	0.297002
Pd	Pd52	0.832266	0.249850	0.296988
Pd	Pd53	0.582667	0.125167	0.297167
Pd	Pd54	0.583140	0.875946	0.296875
Pd	Pd55	0.584205	0.625288	0.295778
Pd	Pd56	0.583451	0.374244	0.296926
Pd	Pd57	0.332602	0.000791	0.297106
Pd	Pd58	0.332620	0.751250	0.302983
Pd	Pd59	0.331830	0.498810	0.298247
Pd	Pd60	0.332323	0.248771	0.297001
Pd	Pd61	0.081946	0.124871	0.296970

Pd	Pd62	0.081667	0.875494	0.296851
Pd	Pd63	0.081068	0.625475	0.296497
Pd	Pd64	0.081188	0.374335	0.296745
C	C65	0.333971	0.740637	0.393289
C	C66	0.412007	0.632955	0.417703
O	O67	0.342322	0.520886	0.400018
H	H68	0.383589	0.825944	0.407668
H	H69	0.222483	0.739940	0.406075
H	H70	0.522982	0.631708	0.402670
H	H71	0.411643	0.636969	0.466350
H	H72	0.399304	0.451706	0.412513

M45 CH₃CH₂OH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515

Pd	Pd33	0.166226	0.999930	0.197121
Pd	Pd34	0.165983	0.249917	0.197111
Pd	Pd35	0.165928	0.499951	0.196868
Pd	Pd36	0.166073	0.749946	0.196818
Pd	Pd37	0.416373	0.124897	0.197049
Pd	Pd38	0.415760	0.374623	0.196803
Pd	Pd39	0.416804	0.624962	0.197580
Pd	Pd40	0.416226	0.875289	0.197055
Pd	Pd41	0.666531	0.999726	0.197030
Pd	Pd42	0.666477	0.249831	0.196789
Pd	Pd43	0.665642	0.500878	0.197677
Pd	Pd44	0.665706	0.749303	0.197844
Pd	Pd45	0.916285	0.124883	0.197037
Pd	Pd46	0.915765	0.375141	0.196967
Pd	Pd47	0.916067	0.625038	0.197137
Pd	Pd48	0.916019	0.874789	0.197009
Pd	Pd49	0.082739	0.124884	0.297287
Pd	Pd50	0.082821	0.374740	0.297116
Pd	Pd51	0.082847	0.624965	0.297098
Pd	Pd52	0.082833	0.875006	0.297133
Pd	Pd53	0.332351	0.000034	0.297291
Pd	Pd54	0.332245	0.249694	0.297197
Pd	Pd55	0.331559	0.499366	0.296542
Pd	Pd56	0.331353	0.750673	0.296694
Pd	Pd57	0.582530	0.124837	0.297074
Pd	Pd58	0.582239	0.373008	0.295969
Pd	Pd59	0.583284	0.625046	0.299455
Pd	Pd60	0.582580	0.876376	0.296988
Pd	Pd61	0.833184	0.000109	0.297174
Pd	Pd62	0.833064	0.249582	0.297081
Pd	Pd63	0.833698	0.499192	0.296966
Pd	Pd64	0.833662	0.750542	0.297043
C	C65	0.702764	0.477597	0.441879
C	C66	0.553454	0.522023	0.435149
O	O67	0.555615	0.635003	0.401342
H	H68	0.750491	0.461156	0.398178
H	H69	0.704382	0.390836	0.465855
H	H70	0.767960	0.544195	0.465325
H	H71	0.487725	0.454300	0.412013
H	H72	0.505478	0.541841	0.478187
H	H73	0.459794	0.667475	0.399318

M46 CCOO* on Pd(111)

data

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000

Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166012	0.000057	0.196897
Pd	Pd34	0.166646	0.249653	0.196633
Pd	Pd35	0.165992	0.499514	0.196652
Pd	Pd36	0.168911	0.750096	0.199049
Pd	Pd37	0.416038	0.123633	0.196908
Pd	Pd38	0.418106	0.373796	0.197716
Pd	Pd39	0.416423	0.625351	0.196764
Pd	Pd40	0.415414	0.872973	0.199118
Pd	Pd41	0.665661	0.001076	0.196941
Pd	Pd42	0.664608	0.251752	0.199104
Pd	Pd43	0.666820	0.498651	0.197518
Pd	Pd44	0.667585	0.751115	0.196631
Pd	Pd45	0.915027	0.126266	0.196976
Pd	Pd46	0.916300	0.374929	0.196820
Pd	Pd47	0.917150	0.625311	0.196644
Pd	Pd48	0.917206	0.875733	0.196851
Pd	Pd49	0.081655	0.123271	0.296695
Pd	Pd50	0.080464	0.371496	0.296999
Pd	Pd51	0.082287	0.625244	0.296871
Pd	Pd52	0.084059	0.875692	0.297247
Pd	Pd53	0.334060	0.999095	0.297195
Pd	Pd54	0.330242	0.245074	0.296993
Pd	Pd55	0.325033	0.494639	0.295452
Pd	Pd56	0.335989	0.747366	0.304596
Pd	Pd57	0.581884	0.127545	0.297877
Pd	Pd58	0.580279	0.378804	0.308064
Pd	Pd59	0.592346	0.628996	0.295233
Pd	Pd60	0.585567	0.877172	0.296927
Pd	Pd61	0.832393	0.001674	0.296872
Pd	Pd62	0.829994	0.250926	0.297809

Pd	Pd63	0.837993	0.499586	0.296971
Pd	Pd64	0.836522	0.752332	0.296965
C	C65	0.486896	0.520172	0.345968
C	C66	0.443722	0.585307	0.402259
O	O67	0.471452	0.545059	0.451020
O	O68	0.375054	0.687236	0.391290

M47 CHCOO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165632	0.999807	0.196759
Pd	Pd34	0.166015	0.249680	0.196762
Pd	Pd35	0.166366	0.499863	0.196635
Pd	Pd36	0.166093	0.749960	0.196779
Pd	Pd37	0.416127	0.124677	0.196885

Pd	Pd38	0.416382	0.374457	0.197270
Pd	Pd39	0.416559	0.625150	0.197345
Pd	Pd40	0.416177	0.874922	0.196888
Pd	Pd41	0.665763	0.999785	0.197093
Pd	Pd42	0.665411	0.250440	0.198354
Pd	Pd43	0.665223	0.499848	0.197994
Pd	Pd44	0.665463	0.749167	0.198417
Pd	Pd45	0.915562	0.125167	0.196800
Pd	Pd46	0.915465	0.375569	0.197849
Pd	Pd47	0.915484	0.624017	0.197952
Pd	Pd48	0.915562	0.874422	0.196812
Pd	Pd49	0.082607	0.123600	0.296909
Pd	Pd50	0.083957	0.372700	0.296603
Pd	Pd51	0.084132	0.626658	0.296690
Pd	Pd52	0.082677	0.875785	0.296929
Pd	Pd53	0.332886	0.999589	0.296905
Pd	Pd54	0.331797	0.248122	0.297010
Pd	Pd55	0.328676	0.499567	0.295855
Pd	Pd56	0.331963	0.751046	0.297008
Pd	Pd57	0.582115	0.125067	0.297487
Pd	Pd58	0.581466	0.374469	0.300657
Pd	Pd59	0.581899	0.624543	0.300974
Pd	Pd60	0.582146	0.874008	0.297545
Pd	Pd61	0.831509	0.999617	0.296861
Pd	Pd62	0.833302	0.247575	0.297182
Pd	Pd63	0.837735	0.499808	0.298575
Pd	Pd64	0.833500	0.751790	0.297293
C	C65	0.564373	0.499235	0.365470
C	C66	0.686075	0.496077	0.407804
O	O67	0.815781	0.497211	0.387306
O	O68	0.660652	0.492133	0.460881
H	H69	0.463188	0.499936	0.389426

M48 CH₂COO* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000

Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167070	0.999744	0.196839
Pd	Pd34	0.166817	0.249271	0.196779
Pd	Pd35	0.167158	0.499429	0.197499
Pd	Pd36	0.167421	0.749694	0.197732
Pd	Pd37	0.417363	0.124397	0.196816
Pd	Pd38	0.416447	0.375116	0.197884
Pd	Pd39	0.416133	0.625204	0.198429
Pd	Pd40	0.416752	0.874153	0.197878
Pd	Pd41	0.667105	0.999460	0.196690
Pd	Pd42	0.666504	0.249957	0.196824
Pd	Pd43	0.665667	0.500512	0.197865
Pd	Pd44	0.666397	0.749208	0.197608
Pd	Pd45	0.916605	0.124712	0.196811
Pd	Pd46	0.916276	0.374660	0.196610
Pd	Pd47	0.916724	0.624589	0.196630
Pd	Pd48	0.917084	0.874546	0.196656
Pd	Pd49	0.834482	0.999966	0.296986
Pd	Pd50	0.835545	0.750909	0.296625
Pd	Pd51	0.835391	0.497843	0.296575
Pd	Pd52	0.834278	0.248446	0.296996
Pd	Pd53	0.584453	0.123965	0.297080
Pd	Pd54	0.585520	0.877259	0.296529
Pd	Pd55	0.589070	0.624560	0.298210
Pd	Pd56	0.585415	0.371160	0.296980
Pd	Pd57	0.333430	0.000271	0.296941
Pd	Pd58	0.331904	0.752646	0.300812
Pd	Pd59	0.330830	0.494891	0.298101
Pd	Pd60	0.333322	0.246442	0.296752
Pd	Pd61	0.083244	0.123821	0.297040
Pd	Pd62	0.082524	0.875302	0.296862
Pd	Pd63	0.081306	0.624402	0.296339
Pd	Pd64	0.081876	0.372416	0.296600
C	C65	0.339039	0.742347	0.393110
C	C66	0.416124	0.626100	0.390585
O	O67	0.553055	0.627938	0.389049
O	O68	0.345554	0.524496	0.388984
H	H69	0.399306	0.820353	0.409164
H	H70	0.231011	0.736830	0.409362

M49 CH₃COO* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd   Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd   Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd   Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd   Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd   Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd   Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd   Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd   Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd   Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd   Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd   Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd   Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd   Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd   Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd   Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd   Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd   Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd   Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd   Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd   Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd   Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd   Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd   Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd   Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd   Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd   Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd   Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd   Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd   Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd   Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd   Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd   Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd   Pd33     0.166254      0.999996      0.196848
Pd   Pd34     0.166427      0.249847      0.196771
Pd   Pd35     0.166511      0.499993      0.196415
Pd   Pd36     0.166429      0.750142      0.196769
Pd   Pd37     0.416749      0.124723      0.196843
Pd   Pd38     0.417033      0.374681      0.197607
Pd   Pd39     0.417037      0.625304      0.197610
Pd   Pd40     0.416747      0.875264      0.196843
Pd   Pd41     0.666560      0.999987      0.196918
Pd   Pd42     0.665541      0.251305      0.198345
Pd   Pd43     0.666044      0.499992      0.197622
Pd   Pd44     0.665533      0.748672      0.198355

```

Pd	Pd45	0.915864	0.125098	0.196757
Pd	Pd46	0.916410	0.374864	0.196643
Pd	Pd47	0.916408	0.625119	0.196643
Pd	Pd48	0.915860	0.874880	0.196756
Pd	Pd49	0.083186	0.124718	0.296883
Pd	Pd50	0.082977	0.374809	0.296651
Pd	Pd51	0.082982	0.625166	0.296648
Pd	Pd52	0.083191	0.875257	0.296881
Pd	Pd53	0.332282	0.999985	0.296926
Pd	Pd54	0.331514	0.249089	0.296704
Pd	Pd55	0.330201	0.499985	0.295823
Pd	Pd56	0.331528	0.750882	0.296702
Pd	Pd57	0.583178	0.123163	0.297089
Pd	Pd58	0.583410	0.372900	0.299128
Pd	Pd59	0.583400	0.627047	0.299168
Pd	Pd60	0.583179	0.876808	0.297090
Pd	Pd61	0.833989	0.999990	0.297155
Pd	Pd62	0.835057	0.248664	0.296835
Pd	Pd63	0.835102	0.499990	0.295639
Pd	Pd64	0.835055	0.751311	0.296838
C	C65	0.582172	0.499690	0.481693
C	C66	0.584015	0.499827	0.415375
O	O67	0.583580	0.603952	0.390442
O	O68	0.583660	0.395733	0.390383
H	H69	0.472004	0.499710	0.496337
H	H70	0.633210	0.417444	0.498522
H	H71	0.633309	0.581846	0.498596

M50 CCOOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165617	0.999924	0.196881
Pd	Pd34	0.166666	0.249842	0.196960
Pd	Pd35	0.168661	0.499934	0.198206
Pd	Pd36	0.166850	0.749994	0.197014
Pd	Pd37	0.416302	0.124807	0.196817
Pd	Pd38	0.417195	0.374776	0.197955
Pd	Pd39	0.417090	0.624900	0.197983
Pd	Pd40	0.416335	0.874819	0.196892
Pd	Pd41	0.665907	0.999914	0.197013
Pd	Pd42	0.666026	0.250844	0.197979
Pd	Pd43	0.667180	0.499775	0.197863
Pd	Pd44	0.666038	0.749004	0.198155
Pd	Pd45	0.915530	0.125336	0.196915
Pd	Pd46	0.917694	0.375216	0.197056
Pd	Pd47	0.917641	0.624690	0.197067
Pd	Pd48	0.915598	0.874486	0.196918
Pd	Pd49	0.082422	0.123856	0.296862
Pd	Pd50	0.083754	0.373495	0.297510
Pd	Pd51	0.084066	0.626005	0.297450
Pd	Pd52	0.082626	0.875868	0.296855
Pd	Pd53	0.333573	0.999675	0.296751
Pd	Pd54	0.331289	0.246249	0.297206
Pd	Pd55	0.329323	0.499335	0.300843
Pd	Pd56	0.331605	0.752847	0.297424
Pd	Pd57	0.583058	0.124712	0.297248
Pd	Pd58	0.585200	0.372073	0.301131
Pd	Pd59	0.586071	0.627843	0.300735
Pd	Pd60	0.583208	0.875067	0.297397
Pd	Pd61	0.832658	0.999863	0.297011
Pd	Pd62	0.833428	0.249545	0.297221
Pd	Pd63	0.838053	0.499852	0.297247
Pd	Pd64	0.834042	0.750382	0.297404
C	C65	0.499899	0.500596	0.348901
C	C66	0.502067	0.498017	0.414229
O	O67	0.557874	0.416215	0.442257
O	O68	0.436135	0.595117	0.438854
H	H69	0.443052	0.584914	0.481588

M51 CHCOOH* on Pd(111)

data_	
_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.165152      0.001001      0.196844
Pd Pd34     0.166294      0.250817      0.197098
Pd Pd35     0.168340      0.500637      0.198815
Pd Pd36     0.166758      0.750858      0.197429
Pd Pd37     0.416005      0.125577      0.196724
Pd Pd38     0.416352      0.375475      0.197351
Pd Pd39     0.416333      0.625357      0.198034
Pd Pd40     0.415194      0.875220      0.197445
Pd Pd41     0.665427      0.000019      0.196723
Pd Pd42     0.666644      0.250639      0.196474
Pd Pd43     0.666882      0.500828      0.197338
Pd Pd44     0.664725      0.749126      0.198855
Pd Pd45     0.915674      0.125425      0.196791
Pd Pd46     0.917613      0.376071      0.197138
Pd Pd47     0.916592      0.625589      0.196809
Pd Pd48     0.914678      0.874756      0.196816
Pd Pd49     0.831645      0.001769      0.296935
Pd Pd50     0.830652      0.751343      0.297576

```

Pd	Pd51	0.833461	0.500748	0.297269
Pd	Pd52	0.832982	0.251165	0.296888
Pd	Pd53	0.582455	0.126305	0.296795
Pd	Pd54	0.582672	0.878504	0.297123
Pd	Pd55	0.582163	0.626384	0.300782
Pd	Pd56	0.585049	0.372723	0.295627
Pd	Pd57	0.331480	0.003848	0.296630
Pd	Pd58	0.328226	0.756182	0.298112
Pd	Pd59	0.331925	0.500674	0.300747
Pd	Pd60	0.331738	0.250364	0.297289
Pd	Pd61	0.081165	0.127057	0.297117
Pd	Pd62	0.078885	0.878156	0.296393
Pd	Pd63	0.079219	0.626879	0.297002
Pd	Pd64	0.082705	0.376456	0.297942
C	C65	0.467385	0.547965	0.366305
C	C66	0.407595	0.637419	0.406749
O	O67	0.343236	0.733497	0.393220
O	O68	0.425429	0.611244	0.464175
H	H69	0.381499	0.677126	0.486777
H	H70	0.517927	0.472666	0.390227

M52 CH₂COOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515

Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165870	0.000007	0.196982
Pd	Pd34	0.166027	0.249870	0.196790
Pd	Pd35	0.166999	0.499814	0.197815
Pd	Pd36	0.165470	0.750164	0.196944
Pd	Pd37	0.416023	0.125061	0.196745
Pd	Pd38	0.416166	0.375863	0.198630
Pd	Pd39	0.415158	0.624771	0.197299
Pd	Pd40	0.416098	0.874974	0.196772
Pd	Pd41	0.665991	0.000289	0.196916
Pd	Pd42	0.664927	0.250870	0.198211
Pd	Pd43	0.665238	0.499121	0.198020
Pd	Pd44	0.666025	0.749994	0.196611
Pd	Pd45	0.915405	0.125394	0.196928
Pd	Pd46	0.915794	0.374854	0.196796
Pd	Pd47	0.915765	0.624643	0.196721
Pd	Pd48	0.915667	0.875266	0.196927
Pd	Pd49	0.081040	0.124383	0.296866
Pd	Pd50	0.079805	0.373905	0.296769
Pd	Pd51	0.081003	0.625615	0.296721
Pd	Pd52	0.081465	0.875108	0.297047
Pd	Pd53	0.331606	0.999608	0.296933
Pd	Pd54	0.330481	0.247711	0.296293
Pd	Pd55	0.329721	0.499281	0.299497
Pd	Pd56	0.331682	0.751420	0.296536
Pd	Pd57	0.582296	0.123494	0.296925
Pd	Pd58	0.582969	0.374567	0.302206
Pd	Pd59	0.583966	0.627334	0.295556
Pd	Pd60	0.582117	0.875346	0.296976
Pd	Pd61	0.832032	0.999727	0.297280
Pd	Pd62	0.831825	0.249043	0.297116
Pd	Pd63	0.832647	0.500668	0.296803
Pd	Pd64	0.832420	0.750605	0.296956
C	C65	0.564113	0.376137	0.393446
C	C66	0.490835	0.489394	0.407704
O	O67	0.364229	0.512602	0.396128
O	O68	0.568817	0.572706	0.436962
H	H69	0.497556	0.296453	0.401863
H	H70	0.668964	0.368919	0.412779
H	H71	0.511031	0.646393	0.440564

M53 CH₃COOH* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_

```

_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166306	0.000038	0.196947
Pd	Pd34	0.166720	0.249866	0.196989
Pd	Pd35	0.166193	0.499610	0.196927
Pd	Pd36	0.167280	0.749781	0.197940
Pd	Pd37	0.416541	0.124595	0.196943
Pd	Pd38	0.416719	0.375000	0.196921
Pd	Pd39	0.415605	0.625905	0.198135
Pd	Pd40	0.415787	0.873910	0.198010
Pd	Pd41	0.666033	0.999741	0.197008
Pd	Pd42	0.666288	0.249874	0.197083
Pd	Pd43	0.666120	0.499919	0.196907
Pd	Pd44	0.666371	0.750048	0.196970
Pd	Pd45	0.916168	0.124926	0.197010
Pd	Pd46	0.916251	0.374801	0.197034
Pd	Pd47	0.916326	0.624861	0.196837
Pd	Pd48	0.916330	0.874841	0.196794
Pd	Pd49	0.832885	0.999976	0.296978
Pd	Pd50	0.832770	0.749599	0.296956
Pd	Pd51	0.832915	0.499307	0.297045
Pd	Pd52	0.832903	0.249640	0.297225
Pd	Pd53	0.583500	0.124984	0.297253
Pd	Pd54	0.584252	0.875300	0.296924
Pd	Pd55	0.584540	0.623886	0.296659

Pd	Pd56	0.583503	0.374465	0.297376
Pd	Pd57	0.333150	0.001346	0.296673
Pd	Pd58	0.332974	0.749339	0.300956
Pd	Pd59	0.332854	0.497673	0.296653
Pd	Pd60	0.333051	0.249716	0.297060
Pd	Pd61	0.082489	0.124942	0.296965
Pd	Pd62	0.081517	0.875388	0.296542
Pd	Pd63	0.081586	0.623849	0.296713
Pd	Pd64	0.082561	0.374417	0.297092
C	C65	0.346669	0.727540	0.499517
C	C66	0.366234	0.699237	0.435591
O	O67	0.318505	0.768358	0.397089
O	O68	0.436737	0.597580	0.425060
H	H69	0.394909	0.816229	0.508931
H	H70	0.233772	0.735949	0.508655
H	H71	0.393187	0.657240	0.527428
H	H72	0.445936	0.584337	0.380986

M54 CCOHOH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515

Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165713	0.999995	0.196848
Pd	Pd34	0.166574	0.250158	0.197063
Pd	Pd35	0.167557	0.499988	0.198189
Pd	Pd36	0.166576	0.749834	0.197062
Pd	Pd37	0.416264	0.124854	0.197148
Pd	Pd38	0.417058	0.374588	0.197537
Pd	Pd39	0.417056	0.625399	0.197535
Pd	Pd40	0.416266	0.875128	0.197147
Pd	Pd41	0.665644	0.999992	0.197238
Pd	Pd42	0.665878	0.250547	0.198303
Pd	Pd43	0.666909	0.499997	0.197541
Pd	Pd44	0.665876	0.749446	0.198305
Pd	Pd45	0.915592	0.125379	0.196934
Pd	Pd46	0.916865	0.375135	0.197105
Pd	Pd47	0.916865	0.624868	0.197102
Pd	Pd48	0.915598	0.874617	0.196935
Pd	Pd49	0.082343	0.123979	0.296960
Pd	Pd50	0.080857	0.373067	0.297636
Pd	Pd51	0.080860	0.626918	0.297630
Pd	Pd52	0.082345	0.875999	0.296967
Pd	Pd53	0.332717	0.999983	0.297272
Pd	Pd54	0.330891	0.247124	0.297712
Pd	Pd55	0.323999	0.499986	0.298072
Pd	Pd56	0.330912	0.752848	0.297709
Pd	Pd57	0.582474	0.123998	0.298081
Pd	Pd58	0.585269	0.370559	0.300080
Pd	Pd59	0.585286	0.629409	0.300074
Pd	Pd60	0.582484	0.875975	0.298083
Pd	Pd61	0.832464	0.999992	0.297151
Pd	Pd62	0.833199	0.248688	0.297611
Pd	Pd63	0.835743	0.499994	0.297432
Pd	Pd64	0.833197	0.751298	0.297613
C	C65	0.498133	0.499987	0.346956
C	C66	0.454039	0.499995	0.406504
O	O67	0.433163	0.399769	0.437321
O	O68	0.433107	0.600229	0.437326
H	H69	0.447540	0.330149	0.410277
H	H70	0.447461	0.669875	0.410265

M55 CHCOHOH* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract	_z		
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165488	0.000010	0.196848	
Pd	Pd34	0.166135	0.250115	0.196877	
Pd	Pd35	0.168827	0.500099	0.198661	
Pd	Pd36	0.166418	0.750012	0.196842	
Pd	Pd37	0.416416	0.124803	0.196581	
Pd	Pd38	0.417186	0.374947	0.197994	
Pd	Pd39	0.417080	0.624652	0.197775	
Pd	Pd40	0.416357	0.875139	0.196776	
Pd	Pd41	0.666036	0.000031	0.196888	
Pd	Pd42	0.666151	0.251382	0.197874	
Pd	Pd43	0.667063	0.499917	0.197904	
Pd	Pd44	0.665468	0.748747	0.198643	
Pd	Pd45	0.915564	0.125132	0.196830	
Pd	Pd46	0.918198	0.375329	0.196940	
Pd	Pd47	0.917324	0.625384	0.196853	
Pd	Pd48	0.914998	0.874463	0.197057	
Pd	Pd49	0.082256	0.124984	0.297017	
Pd	Pd50	0.083998	0.375032	0.298063	
Pd	Pd51	0.082047	0.626731	0.297563	
Pd	Pd52	0.081750	0.876164	0.296753	
Pd	Pd53	0.332687	0.000668	0.296715	
Pd	Pd54	0.331295	0.247920	0.296298	
Pd	Pd55	0.331337	0.500419	0.300829	
Pd	Pd56	0.331058	0.753433	0.296406	
Pd	Pd57	0.582803	0.124963	0.296973	
Pd	Pd58	0.585272	0.371925	0.301010	
Pd	Pd59	0.583781	0.626474	0.300808	

Pd	Pd60	0.582840	0.876571	0.297494
Pd	Pd61	0.832381	0.000430	0.297072
Pd	Pd62	0.834053	0.250184	0.296912
Pd	Pd63	0.836370	0.500405	0.296383
Pd	Pd64	0.832334	0.750363	0.297916
C	C65	0.476802	0.534469	0.363158
C	C66	0.546486	0.429439	0.391397
O	O67	0.670961	0.442638	0.419158
O	O68	0.470745	0.342862	0.419120
H	H69	0.433051	0.600520	0.395076
H	H70	0.725463	0.504301	0.397015
H	H71	0.381738	0.333146	0.397021

M56 CH₂COHOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515

Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166448	0.000034	0.196972
Pd	Pd34	0.167219	0.249791	0.196980
Pd	Pd35	0.166828	0.499946	0.196514
Pd	Pd36	0.166689	0.750081	0.196873
Pd	Pd37	0.417082	0.124858	0.197021
Pd	Pd38	0.417862	0.374653	0.197736
Pd	Pd39	0.417772	0.625083	0.197691
Pd	Pd40	0.417053	0.875149	0.196818
Pd	Pd41	0.666544	0.000126	0.197155
Pd	Pd42	0.665480	0.251782	0.198860
Pd	Pd43	0.666608	0.500054	0.197920
Pd	Pd44	0.665788	0.748375	0.198486
Pd	Pd45	0.915966	0.125302	0.196982
Pd	Pd46	0.916939	0.374692	0.196647
Pd	Pd47	0.916997	0.625058	0.196642
Pd	Pd48	0.916054	0.874967	0.196871
Pd	Pd49	0.083863	0.124485	0.297040
Pd	Pd50	0.083656	0.373775	0.296972
Pd	Pd51	0.084227	0.625278	0.297031
Pd	Pd52	0.083892	0.875539	0.297090
Pd	Pd53	0.334222	0.999905	0.296802
Pd	Pd54	0.333818	0.249500	0.297142
Pd	Pd55	0.329982	0.499128	0.295555
Pd	Pd56	0.333173	0.750714	0.296440
Pd	Pd57	0.584047	0.124722	0.297516
Pd	Pd58	0.584130	0.377403	0.302762
Pd	Pd59	0.584851	0.623796	0.302929
Pd	Pd60	0.583959	0.874404	0.297308
Pd	Pd61	0.833496	0.999722	0.297243
Pd	Pd62	0.833985	0.249217	0.297105
Pd	Pd63	0.837130	0.499991	0.295719
Pd	Pd64	0.835058	0.750432	0.296850
C	C65	0.583634	0.443969	0.388650
C	C66	0.577887	0.577425	0.395167
O	O67	0.694439	0.629029	0.419596
O	O68	0.457837	0.633747	0.414980
H	H69	0.682774	0.406915	0.405487
H	H70	0.490061	0.399429	0.406796
H	H71	0.680539	0.717487	0.420763
H	H72	0.378050	0.608168	0.389616

M57 CH₃COHOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000

Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166552	0.000237	0.197145
Pd	Pd34	0.166358	0.250094	0.197070
Pd	Pd35	0.166452	0.500235	0.196820
Pd	Pd36	0.166498	0.750071	0.196871
Pd	Pd37	0.416698	0.125031	0.197087
Pd	Pd38	0.416394	0.374933	0.196733
Pd	Pd39	0.417850	0.625217	0.198234
Pd	Pd40	0.416593	0.875260	0.196950
Pd	Pd41	0.666824	0.999966	0.196914
Pd	Pd42	0.666644	0.250273	0.196901
Pd	Pd43	0.665752	0.501219	0.198373
Pd	Pd44	0.665730	0.748840	0.198120
Pd	Pd45	0.916517	0.125263	0.197053
Pd	Pd46	0.916075	0.375437	0.197000
Pd	Pd47	0.916491	0.624928	0.196906
Pd	Pd48	0.916461	0.875196	0.196769
Pd	Pd49	0.083574	0.125242	0.297250
Pd	Pd50	0.082959	0.375002	0.297017
Pd	Pd51	0.082941	0.625462	0.297179
Pd	Pd52	0.083437	0.875452	0.297196
Pd	Pd53	0.333462	0.000154	0.297255
Pd	Pd54	0.333180	0.250097	0.296942
Pd	Pd55	0.331968	0.500146	0.295994
Pd	Pd56	0.332139	0.750656	0.296783
Pd	Pd57	0.583472	0.125366	0.297144
Pd	Pd58	0.583192	0.374487	0.296444
Pd	Pd59	0.582179	0.625079	0.306105
Pd	Pd60	0.583932	0.875947	0.296240
Pd	Pd61	0.833669	0.000305	0.297097
Pd	Pd62	0.833258	0.250166	0.297081

Pd	Pd63	0.833137	0.500141	0.297023
Pd	Pd64	0.834150	0.750964	0.296262
C	C65	0.479124	0.545052	0.423390
C	C66	0.584821	0.635201	0.399288
O	O67	0.718223	0.605310	0.416645
O	O68	0.557710	0.756462	0.412714
H	H69	0.507471	0.451825	0.410781
H	H70	0.479521	0.552553	0.471714
H	H71	0.372848	0.565567	0.407172
H	H72	0.782615	0.670476	0.403884
H	H73	0.468241	0.780144	0.393697

M58 CCHOO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515

Pd	Pd33	0.167090	0.000073	0.196800
Pd	Pd34	0.167432	0.249501	0.196511
Pd	Pd35	0.167139	0.499308	0.196498
Pd	Pd36	0.169049	0.750057	0.198217
Pd	Pd37	0.417044	0.123753	0.196887
Pd	Pd38	0.418779	0.373690	0.197669
Pd	Pd39	0.418355	0.624806	0.197987
Pd	Pd40	0.416320	0.872959	0.199193
Pd	Pd41	0.666276	0.000734	0.197099
Pd	Pd42	0.665417	0.252039	0.199006
Pd	Pd43	0.666998	0.500356	0.198640
Pd	Pd44	0.668807	0.751408	0.196488
Pd	Pd45	0.915698	0.126257	0.196761
Pd	Pd46	0.916752	0.374929	0.196681
Pd	Pd47	0.918060	0.625126	0.196586
Pd	Pd48	0.918122	0.876195	0.196534
Pd	Pd49	0.083475	0.123393	0.296742
Pd	Pd50	0.081469	0.370902	0.296648
Pd	Pd51	0.084369	0.624908	0.296435
Pd	Pd52	0.086332	0.876636	0.297184
Pd	Pd53	0.335683	0.999407	0.297414
Pd	Pd54	0.331277	0.244467	0.297117
Pd	Pd55	0.325221	0.493167	0.296156
Pd	Pd56	0.335616	0.748464	0.301773
Pd	Pd57	0.583837	0.126449	0.297784
Pd	Pd58	0.582450	0.375897	0.306485
Pd	Pd59	0.601027	0.629913	0.296879
Pd	Pd60	0.587603	0.878218	0.297362
Pd	Pd61	0.835160	0.001923	0.296890
Pd	Pd62	0.831799	0.249863	0.297776
Pd	Pd63	0.841537	0.498126	0.297179
Pd	Pd64	0.842579	0.754239	0.296360
C	C65	0.486992	0.512963	0.345393
C	C66	0.475112	0.610991	0.395897
O	O67	0.352820	0.676503	0.384885
O	O68	0.599441	0.674448	0.386425
H	H69	0.468453	0.574002	0.441123

M59 CHCHOO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
 Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
 Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
 Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
 Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
 Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000

Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.168285	0.999202	0.196687
Pd	Pd34	0.166740	0.248914	0.196592
Pd	Pd35	0.166848	0.499227	0.196656
Pd	Pd36	0.170299	0.749536	0.198390
Pd	Pd37	0.417531	0.123793	0.196881
Pd	Pd38	0.416669	0.374249	0.197707
Pd	Pd39	0.418893	0.624356	0.198587
Pd	Pd40	0.418295	0.873919	0.197748
Pd	Pd41	0.667957	0.000181	0.196679
Pd	Pd42	0.664904	0.252077	0.198844
Pd	Pd43	0.666200	0.500309	0.197790
Pd	Pd44	0.668344	0.748725	0.198098
Pd	Pd45	0.916638	0.125147	0.196579
Pd	Pd46	0.915894	0.374619	0.196215
Pd	Pd47	0.918528	0.625460	0.196341
Pd	Pd48	0.919377	0.875034	0.196796
Pd	Pd49	0.836678	0.999822	0.296967
Pd	Pd50	0.843943	0.753830	0.297327
Pd	Pd51	0.839643	0.498541	0.295202
Pd	Pd52	0.835811	0.246632	0.297070
Pd	Pd53	0.585175	0.123897	0.297252
Pd	Pd54	0.588659	0.878916	0.295956
Pd	Pd55	0.599891	0.631823	0.301196
Pd	Pd56	0.585761	0.372035	0.300060
Pd	Pd57	0.335366	0.998096	0.297391
Pd	Pd58	0.336421	0.744326	0.301419
Pd	Pd59	0.319300	0.491176	0.295179
Pd	Pd60	0.333749	0.245155	0.296807
Pd	Pd61	0.085400	0.121578	0.296728
Pd	Pd62	0.089353	0.874090	0.297647
Pd	Pd63	0.083022	0.624123	0.296914
Pd	Pd64	0.079572	0.368728	0.296393
C	C65	0.463575	0.686305	0.365253
C	C66	0.455596	0.559853	0.394748

O	O67	0.337317	0.495594	0.383831
O	O68	0.583538	0.502355	0.369991
H	H69	0.496360	0.760826	0.394705
H	H70	0.473039	0.564351	0.442958

M60 CH₂CHOO* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167077	0.999631	0.196848
Pd	Pd34	0.166800	0.249533	0.196842
Pd	Pd35	0.167398	0.499560	0.197820
Pd	Pd36	0.167506	0.749789	0.197699
Pd	Pd37	0.417057	0.124248	0.196849
Pd	Pd38	0.416737	0.374712	0.197866
Pd	Pd39	0.416506	0.624782	0.198034

Pd	Pd40	0.416790	0.874153	0.197911
Pd	Pd41	0.666910	0.999664	0.196734
Pd	Pd42	0.666248	0.250106	0.197095
Pd	Pd43	0.665961	0.499952	0.197850
Pd	Pd44	0.666424	0.749215	0.198062
Pd	Pd45	0.916415	0.124938	0.196718
Pd	Pd46	0.916415	0.374809	0.196642
Pd	Pd47	0.916677	0.624866	0.196624
Pd	Pd48	0.917149	0.874835	0.196804
Pd	Pd49	0.834403	0.000223	0.296981
Pd	Pd50	0.836214	0.751475	0.296939
Pd	Pd51	0.834599	0.498862	0.296536
Pd	Pd52	0.833408	0.249165	0.296818
Pd	Pd53	0.583858	0.124290	0.296943
Pd	Pd54	0.585086	0.877055	0.296891
Pd	Pd55	0.588582	0.627109	0.297646
Pd	Pd56	0.583690	0.373346	0.297812
Pd	Pd57	0.333560	0.999223	0.297156
Pd	Pd58	0.333738	0.749714	0.300434
Pd	Pd59	0.328713	0.495751	0.297417
Pd	Pd60	0.332828	0.246790	0.296851
Pd	Pd61	0.083103	0.123720	0.296915
Pd	Pd62	0.083969	0.874698	0.297106
Pd	Pd63	0.081798	0.624597	0.296453
Pd	Pd64	0.080790	0.372662	0.296895
C	C65	0.350071	0.723563	0.389728
C	C66	0.428773	0.604847	0.402953
O	O67	0.569082	0.608496	0.384176
O	O68	0.354568	0.501823	0.384068
H	H69	0.406803	0.803637	0.406322
H	H70	0.241288	0.720896	0.405944
H	H71	0.435290	0.594762	0.451862

M61 CH₃CHOO* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000

Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165116	0.998938	0.196895
Pd	Pd34	0.164079	0.249140	0.196500
Pd	Pd35	0.166368	0.498901	0.198342
Pd	Pd36	0.167919	0.749001	0.199420
Pd	Pd37	0.415191	0.123191	0.196604
Pd	Pd38	0.416027	0.373570	0.196669
Pd	Pd39	0.415091	0.624620	0.196846
Pd	Pd40	0.415388	0.873501	0.197606
Pd	Pd41	0.665769	0.000761	0.196480
Pd	Pd42	0.663042	0.252317	0.199196
Pd	Pd43	0.665207	0.500804	0.198188
Pd	Pd44	0.667759	0.750654	0.195933
Pd	Pd45	0.913838	0.125634	0.196822
Pd	Pd46	0.914437	0.374991	0.196763
Pd	Pd47	0.916907	0.624533	0.196751
Pd	Pd48	0.917167	0.875023	0.196936
Pd	Pd49	0.831672	0.999083	0.297099
Pd	Pd50	0.833578	0.750768	0.296620
Pd	Pd51	0.829508	0.497784	0.297210
Pd	Pd52	0.828503	0.247508	0.297585
Pd	Pd53	0.579372	0.122377	0.297400
Pd	Pd54	0.583544	0.877736	0.295287
Pd	Pd55	0.586970	0.628762	0.293803
Pd	Pd56	0.577764	0.372417	0.301190
Pd	Pd57	0.329649	0.995999	0.297065
Pd	Pd58	0.327955	0.742101	0.301624
Pd	Pd59	0.317841	0.490534	0.295238
Pd	Pd60	0.326191	0.242633	0.295524
Pd	Pd61	0.078482	0.121125	0.296754
Pd	Pd62	0.081234	0.872299	0.297976
Pd	Pd63	0.075034	0.621695	0.298351
Pd	Pd64	0.073292	0.369598	0.297450
C	C65	0.589088	0.547421	0.441834
C	C66	0.459250	0.565372	0.403695
O	O67	0.435720	0.459073	0.369650
O	O68	0.474791	0.672922	0.369676
H	H69	0.681272	0.535069	0.413156
H	H70	0.576457	0.466470	0.469574
H	H71	0.605533	0.627759	0.469645

H	H72	0.363894	0.578746	0.430942

M62 CCHOOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166265	0.999656	0.196947
Pd	Pd34	0.167088	0.249231	0.196685
Pd	Pd35	0.166675	0.499248	0.196762
Pd	Pd36	0.168384	0.749664	0.198787
Pd	Pd37	0.416256	0.123127	0.197058
Pd	Pd38	0.418603	0.373264	0.197763
Pd	Pd39	0.416796	0.624744	0.196868
Pd	Pd40	0.415322	0.872190	0.199621
Pd	Pd41	0.665507	0.000385	0.197037
Pd	Pd42	0.664940	0.251045	0.199083

Pd	Pd43	0.667389	0.497983	0.197467
Pd	Pd44	0.667735	0.750629	0.196636
Pd	Pd45	0.915158	0.125695	0.196938
Pd	Pd46	0.916837	0.374348	0.196897
Pd	Pd47	0.917284	0.624644	0.196807
Pd	Pd48	0.917112	0.875178	0.196929
Pd	Pd49	0.082082	0.122543	0.296718
Pd	Pd50	0.081118	0.370869	0.296953
Pd	Pd51	0.083433	0.624591	0.296860
Pd	Pd52	0.084426	0.875089	0.297166
Pd	Pd53	0.334562	0.998654	0.297532
Pd	Pd54	0.330737	0.244397	0.297206
Pd	Pd55	0.326447	0.493341	0.295807
Pd	Pd56	0.337950	0.747318	0.304284
Pd	Pd57	0.582435	0.126434	0.298003
Pd	Pd58	0.581481	0.377224	0.307888
Pd	Pd59	0.592256	0.627555	0.295081
Pd	Pd60	0.586319	0.876059	0.297348
Pd	Pd61	0.832743	0.000847	0.296877
Pd	Pd62	0.830608	0.249978	0.297786
Pd	Pd63	0.838628	0.498772	0.297227
Pd	Pd64	0.836724	0.751363	0.297161
C	C65	0.488079	0.517921	0.346223
C	C66	0.448267	0.585169	0.402911
O	O67	0.349819	0.673932	0.387962
O	O68	0.575464	0.633317	0.426741
H	H69	0.397983	0.522624	0.434995
H	H70	0.548100	0.688386	0.458393

M63 CHCHOOH* on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000

Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165785	0.000316	0.196816
Pd	Pd34	0.166837	0.250161	0.196954
Pd	Pd35	0.168647	0.499951	0.198660
Pd	Pd36	0.165669	0.749827	0.196980
Pd	Pd37	0.416377	0.125006	0.196779
Pd	Pd38	0.416821	0.374966	0.197481
Pd	Pd39	0.416730	0.624248	0.198072
Pd	Pd40	0.415371	0.873971	0.198337
Pd	Pd41	0.665409	0.999143	0.197059
Pd	Pd42	0.666958	0.249763	0.196528
Pd	Pd43	0.667697	0.499971	0.197194
Pd	Pd44	0.665360	0.748818	0.198235
Pd	Pd45	0.915839	0.124728	0.196810
Pd	Pd46	0.918042	0.375183	0.197164
Pd	Pd47	0.917191	0.624766	0.197046
Pd	Pd48	0.914855	0.874519	0.196727
Pd	Pd49	0.832267	0.000427	0.296945
Pd	Pd50	0.831354	0.749806	0.297240
Pd	Pd51	0.835112	0.499630	0.297320
Pd	Pd52	0.833726	0.250125	0.296981
Pd	Pd53	0.583554	0.125657	0.297055
Pd	Pd54	0.583489	0.876640	0.298095
Pd	Pd55	0.583101	0.624570	0.300144
Pd	Pd56	0.585889	0.372263	0.295886
Pd	Pd57	0.332860	0.003947	0.297034
Pd	Pd58	0.329721	0.758026	0.296997
Pd	Pd59	0.334868	0.499753	0.301674
Pd	Pd60	0.332849	0.249845	0.297304
Pd	Pd61	0.082092	0.126203	0.296977
Pd	Pd62	0.079590	0.877548	0.296133
Pd	Pd63	0.081788	0.625771	0.297389
Pd	Pd64	0.084530	0.375360	0.297758
C	C65	0.466088	0.554327	0.365848
C	C66	0.407832	0.652827	0.406578
O	O67	0.300404	0.721731	0.382738
O	O68	0.527181	0.725346	0.423796
H	H69	0.517708	0.479818	0.390396
H	H70	0.362985	0.608299	0.446394
H	H71	0.490640	0.790066	0.448919

M64 CH₂CHOOH* on Pd(111)
data_

_cell_length_a	9.514851		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166585	0.999581	0.196824
Pd Pd34	0.166077	0.249381	0.196772
Pd Pd35	0.167139	0.499461	0.197344
Pd Pd36	0.167178	0.749751	0.197777
Pd Pd37	0.416559	0.124477	0.196719
Pd Pd38	0.415789	0.374915	0.197397
Pd Pd39	0.415922	0.624560	0.198449
Pd Pd40	0.416088	0.874039	0.197859
Pd Pd41	0.666308	0.999200	0.196771
Pd Pd42	0.665907	0.249783	0.196684
Pd Pd43	0.665309	0.500650	0.198134
Pd Pd44	0.665563	0.748694	0.198194
Pd Pd45	0.915949	0.124640	0.196729
Pd Pd46	0.915813	0.374838	0.196632
Pd Pd47	0.916438	0.624700	0.196620

Pd	Pd48	0.916364	0.874408	0.196740
Pd	Pd49	0.833370	0.999877	0.296959
Pd	Pd50	0.834494	0.750894	0.296879
Pd	Pd51	0.833925	0.498519	0.296641
Pd	Pd52	0.832961	0.248720	0.296846
Pd	Pd53	0.583023	0.124307	0.296929
Pd	Pd54	0.584052	0.876652	0.296739
Pd	Pd55	0.586149	0.625302	0.299654
Pd	Pd56	0.583919	0.372292	0.296487
Pd	Pd57	0.332674	0.000199	0.297026
Pd	Pd58	0.332129	0.750966	0.300950
Pd	Pd59	0.329802	0.497652	0.297718
Pd	Pd60	0.332300	0.247667	0.296650
Pd	Pd61	0.082418	0.123993	0.296918
Pd	Pd62	0.082442	0.874893	0.296921
Pd	Pd63	0.080989	0.624872	0.296362
Pd	Pd64	0.080992	0.373061	0.296577
C	C65	0.350224	0.736644	0.390785
C	C66	0.435508	0.627044	0.409902
O	O67	0.568466	0.617609	0.388361
O	O68	0.347928	0.517144	0.395548
H	H69	0.404428	0.820388	0.404337
H	H70	0.242419	0.734665	0.408088
H	H71	0.443503	0.625463	0.458720
H	H72	0.404222	0.446622	0.407300

M65 CH₃CHOOH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165953	0.000856	0.196846
Pd	Pd34	0.166259	0.250556	0.197024
Pd	Pd35	0.168716	0.500275	0.198761
Pd	Pd36	0.165150	0.750788	0.196539
Pd	Pd37	0.416739	0.125515	0.196809
Pd	Pd38	0.416856	0.375402	0.197633
Pd	Pd39	0.416090	0.625706	0.196719
Pd	Pd40	0.416677	0.876428	0.196601
Pd	Pd41	0.666705	0.000288	0.196870
Pd	Pd42	0.666320	0.251405	0.197039
Pd	Pd43	0.666003	0.500559	0.197667
Pd	Pd44	0.664957	0.748278	0.198953
Pd	Pd45	0.916047	0.125371	0.196812
Pd	Pd46	0.917381	0.375855	0.196936
Pd	Pd47	0.916406	0.625551	0.196678
Pd	Pd48	0.914993	0.874990	0.196977
Pd	Pd49	0.082303	0.126683	0.297301
Pd	Pd50	0.080784	0.376050	0.297863
Pd	Pd51	0.078647	0.627861	0.297247
Pd	Pd52	0.080959	0.877770	0.296832
Pd	Pd53	0.331379	0.002839	0.297068
Pd	Pd54	0.331240	0.250401	0.296793
Pd	Pd55	0.326067	0.503668	0.297828
Pd	Pd56	0.328698	0.756448	0.295136
Pd	Pd57	0.582971	0.124280	0.296857
Pd	Pd58	0.585436	0.370022	0.296609
Pd	Pd59	0.582690	0.631527	0.298935
Pd	Pd60	0.582777	0.879462	0.297397
Pd	Pd61	0.833576	0.001695	0.297445
Pd	Pd62	0.835111	0.249972	0.296797
Pd	Pd63	0.833229	0.501456	0.296443
Pd	Pd64	0.833005	0.752742	0.297687
C	C65	0.372352	0.419053	0.440101
C	C66	0.494138	0.492360	0.415924
O	O67	0.451346	0.566860	0.369186
O	O68	0.602212	0.406443	0.398664
H	H69	0.285345	0.480089	0.451459
H	H70	0.335806	0.355077	0.405969
H	H71	0.404929	0.367355	0.479007
H	H72	0.540437	0.553213	0.449475
H	H73	0.690968	0.451240	0.393737

M66 H* on Pd(111)

data_

_cell_length_a

9.514851

_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166428	0.000000	0.197198
Pd Pd34	0.166575	0.249906	0.197108
Pd Pd35	0.167161	0.500000	0.197329
Pd Pd36	0.166575	0.750094	0.197108
Pd Pd37	0.416557	0.124871	0.197095
Pd Pd38	0.416627	0.374984	0.197643
Pd Pd39	0.416627	0.625016	0.197643
Pd Pd40	0.416557	0.875129	0.197095
Pd Pd41	0.666588	0.000000	0.197208
Pd Pd42	0.666269	0.250346	0.197345
Pd Pd43	0.666549	0.500000	0.197643
Pd Pd44	0.666269	0.749654	0.197345
Pd Pd45	0.916276	0.125108	0.197111
Pd Pd46	0.916754	0.375112	0.197103
Pd Pd47	0.916754	0.624888	0.197103
Pd Pd48	0.916276	0.874892	0.197111

Pd	Pd49	0.083236	0.124480	0.297230
Pd	Pd50	0.083046	0.374397	0.297179
Pd	Pd51	0.083046	0.625603	0.297179
Pd	Pd52	0.083236	0.875520	0.297230
Pd	Pd53	0.333566	0.000000	0.297308
Pd	Pd54	0.332332	0.248373	0.297299
Pd	Pd55	0.329890	0.500000	0.298518
Pd	Pd56	0.332332	0.751627	0.297299
Pd	Pd57	0.583499	0.124726	0.297327
Pd	Pd58	0.584589	0.372626	0.298495
Pd	Pd59	0.584589	0.627374	0.298495
Pd	Pd60	0.583499	0.875274	0.297327
Pd	Pd61	0.833343	0.000000	0.297257
Pd	Pd62	0.833523	0.249548	0.297230
Pd	Pd63	0.835108	0.500000	0.297251
Pd	Pd64	0.833523	0.750452	0.297230
H	H65	0.500274	0.500000	0.333949

M67 O* on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515

Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165962	0.000000	0.196772
Pd	Pd34	0.166392	0.249919	0.196797
Pd	Pd35	0.168701	0.500000	0.198728
Pd	Pd36	0.166392	0.750081	0.196797
Pd	Pd37	0.416753	0.124800	0.196698
Pd	Pd38	0.416691	0.374866	0.197157
Pd	Pd39	0.416691	0.625134	0.197157
Pd	Pd40	0.416753	0.875200	0.196698
Pd	Pd41	0.666397	0.000000	0.196958
Pd	Pd42	0.665845	0.251391	0.198565
Pd	Pd43	0.666686	0.500000	0.197028
Pd	Pd44	0.665845	0.748609	0.198565
Pd	Pd45	0.915667	0.125360	0.196834
Pd	Pd46	0.917446	0.375163	0.196908
Pd	Pd47	0.917446	0.624837	0.196908
Pd	Pd48	0.915667	0.874640	0.196834
Pd	Pd49	0.082720	0.123921	0.296801
Pd	Pd50	0.082010	0.373350	0.297428
Pd	Pd51	0.082010	0.626650	0.297428
Pd	Pd52	0.082720	0.876079	0.296801
Pd	Pd53	0.333386	0.000000	0.296768
Pd	Pd54	0.331382	0.246790	0.296444
Pd	Pd55	0.326077	0.500000	0.299047
Pd	Pd56	0.331382	0.753210	0.296444
Pd	Pd57	0.583570	0.123398	0.297402
Pd	Pd58	0.586780	0.369531	0.298927
Pd	Pd59	0.586780	0.630469	0.298927
Pd	Pd60	0.583570	0.876602	0.297402
Pd	Pd61	0.833720	0.000000	0.297226
Pd	Pd62	0.834756	0.248418	0.297396
Pd	Pd63	0.836325	0.500000	0.296459
Pd	Pd64	0.834756	0.751582	0.297396
O	O65	0.500202	0.500000	0.347753

M68 OH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851

_cell_length_b 10.986804

_cell_length_c 22.764721

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000

Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166838	0.000000	0.196839
Pd	Pd34	0.166251	0.250012	0.196824
Pd	Pd35	0.167632	0.500000	0.198519
Pd	Pd36	0.166251	0.749988	0.196824
Pd	Pd37	0.417281	0.124683	0.196796
Pd	Pd38	0.416192	0.375011	0.197041
Pd	Pd39	0.416192	0.624989	0.197041
Pd	Pd40	0.417281	0.875317	0.196796
Pd	Pd41	0.667226	0.000000	0.197030
Pd	Pd42	0.665794	0.251266	0.198474
Pd	Pd43	0.665668	0.500000	0.196888
Pd	Pd44	0.665794	0.748734	0.198474
Pd	Pd45	0.916276	0.125160	0.196855
Pd	Pd46	0.916530	0.375007	0.196793
Pd	Pd47	0.916530	0.624993	0.196793
Pd	Pd48	0.916276	0.874840	0.196855
Pd	Pd49	0.083491	0.124109	0.297029
Pd	Pd50	0.079542	0.373221	0.297427
Pd	Pd51	0.079542	0.626779	0.297427
Pd	Pd52	0.083491	0.875891	0.297029
Pd	Pd53	0.333033	0.000000	0.297128
Pd	Pd54	0.331593	0.247794	0.296265
Pd	Pd55	0.322262	0.500000	0.297329
Pd	Pd56	0.331593	0.752206	0.296265
Pd	Pd57	0.583876	0.121970	0.297520
Pd	Pd58	0.588035	0.367008	0.297325
Pd	Pd59	0.588035	0.632992	0.297325
Pd	Pd60	0.583876	0.878030	0.297520
Pd	Pd61	0.835086	0.000000	0.297504
Pd	Pd62	0.835840	0.247123	0.297458
Pd	Pd63	0.833853	0.500000	0.296068
Pd	Pd64	0.835840	0.752877	0.297458

O	O65	0.499875	0.500000	0.355998
H	H66	0.500598	0.500000	0.398783

M69 H₂O* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167031	0.999956	0.197118
Pd	Pd34	0.166938	0.250001	0.196952
Pd	Pd35	0.166923	0.500010	0.196950
Pd	Pd36	0.167030	0.750070	0.197115
Pd	Pd37	0.417071	0.124723	0.197121
Pd	Pd38	0.417388	0.374993	0.197475
Pd	Pd39	0.417057	0.625268	0.197121
Pd	Pd40	0.417294	0.875002	0.197124
Pd	Pd41	0.667274	0.000108	0.197053

Pd	Pd42	0.666617	0.250568	0.197603
Pd	Pd43	0.666591	0.499440	0.197609
Pd	Pd44	0.667251	0.749883	0.197057
Pd	Pd45	0.916872	0.125135	0.197044
Pd	Pd46	0.917072	0.375015	0.197145
Pd	Pd47	0.916853	0.624891	0.197041
Pd	Pd48	0.917130	0.875005	0.197095
Pd	Pd49	0.084463	0.124889	0.297135
Pd	Pd50	0.084714	0.375011	0.297104
Pd	Pd51	0.084476	0.625145	0.297137
Pd	Pd52	0.084291	0.875020	0.297222
Pd	Pd53	0.334058	0.999873	0.297271
Pd	Pd54	0.333407	0.249423	0.296840
Pd	Pd55	0.333409	0.500607	0.296841
Pd	Pd56	0.334071	0.750171	0.297263
Pd	Pd57	0.584257	0.123769	0.296978
Pd	Pd58	0.584800	0.375034	0.298642
Pd	Pd59	0.584258	0.626246	0.296997
Pd	Pd60	0.584269	0.875025	0.297196
Pd	Pd61	0.834599	0.999938	0.297184
Pd	Pd62	0.835312	0.249553	0.296946
Pd	Pd63	0.835329	0.500459	0.296944
Pd	Pd64	0.834606	0.750084	0.297186
O	O65	0.570393	0.374333	0.402613
H	H66	0.511387	0.302214	0.407658
H	H67	0.506869	0.443474	0.407781

Transition state of R1 CO₂* + H* = COOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165988	0.999298	0.202904
Pd	Pd50	0.166087	0.248890	0.202881
Pd	Pd51	0.165855	0.499146	0.202870
Pd	Pd52	0.165909	0.749398	0.202927
Pd	Pd53	0.665266	0.999894	0.203415
Pd	Pd54	0.665007	0.249642	0.203349
Pd	Pd55	0.665965	0.499827	0.202657
Pd	Pd56	0.665611	0.750337	0.202973
Pd	Pd57	0.331770	0.123697	0.236345
Pd	Pd58	0.330764	0.373398	0.235996
Pd	Pd59	0.331033	0.624194	0.236185
Pd	Pd60	0.331062	0.874237	0.236239
Pd	Pd61	0.830349	0.124842	0.236240
Pd	Pd62	0.830755	0.374603	0.235976
Pd	Pd63	0.831197	0.624875	0.235801
Pd	Pd64	0.830220	0.875023	0.236338
Pd	Pd65	0.998879	0.999550	0.268389
Pd	Pd66	0.998998	0.249313	0.268371
Pd	Pd67	0.999033	0.499313	0.268428
Pd	Pd68	0.999094	0.749542	0.268456
Pd	Pd69	0.499703	0.998931	0.269746
Pd	Pd70	0.499252	0.250318	0.271062
Pd	Pd71	0.499507	0.497423	0.267762
Pd	Pd72	0.499228	0.750602	0.269058
Pd	Pd73	0.165414	0.123493	0.307654
Pd	Pd74	0.164884	0.372643	0.307555
Pd	Pd75	0.164739	0.623281	0.307485
Pd	Pd76	0.164952	0.874341	0.307628
Pd	Pd77	0.665693	0.124474	0.308614

Pd	Pd78	0.665738	0.374812	0.307749
Pd	Pd79	0.667121	0.624601	0.306831
Pd	Pd80	0.664579	0.874530	0.309460
Pd	Pd81	0.830525	0.749997	0.338274
Pd	Pd82	0.331041	0.996925	0.338729
Pd	Pd83	0.331035	0.247325	0.338274
Pd	Pd84	0.328977	0.496902	0.337334
Pd	Pd85	0.328425	0.748124	0.338230
Pd	Pd86	0.830381	0.999704	0.338454
Pd	Pd87	0.830498	0.249702	0.338357
Pd	Pd88	0.830603	0.499522	0.338173
Pd	Pd89	0.997492	0.124408	0.368334
Pd	Pd90	0.997467	0.374257	0.368339
Pd	Pd91	0.997261	0.624523	0.368361
Pd	Pd92	0.997308	0.874580	0.368370
Pd	Pd93	0.497731	0.119359	0.369495
Pd	Pd94	0.499104	0.373209	0.371983
Pd	Pd95	0.496794	0.620264	0.365804
Pd	Pd96	0.496797	0.866081	0.373365
C	C97	0.504312	0.578070	0.447004
O	O98	0.506292	0.468822	0.460351
O	O99	0.507261	0.677027	0.475173
H	H100	0.502399	0.762820	0.429128

Transition state of R2 $\text{HCOO}^* + \text{H}^* = \text{HCOOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447

Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165905	0.999944	0.202926
Pd	Pd50	0.165921	0.250057	0.202930
Pd	Pd51	0.165800	0.500058	0.202939
Pd	Pd52	0.165813	0.749895	0.202935
Pd	Pd53	0.665750	0.999963	0.202906
Pd	Pd54	0.665742	0.250029	0.202903
Pd	Pd55	0.665323	0.500003	0.203039
Pd	Pd56	0.665329	0.749980	0.203030
Pd	Pd57	0.330737	0.124996	0.236131
Pd	Pd58	0.330739	0.375491	0.236257
Pd	Pd59	0.330408	0.624978	0.236762
Pd	Pd60	0.330762	0.874483	0.236247
Pd	Pd61	0.830360	0.124985	0.236179
Pd	Pd62	0.830436	0.374982	0.236116
Pd	Pd63	0.830359	0.624996	0.235868
Pd	Pd64	0.830447	0.874985	0.236113
Pd	Pd65	0.998777	0.000070	0.268370
Pd	Pd66	0.998785	0.249900	0.268371
Pd	Pd67	0.998519	0.499960	0.268412
Pd	Pd68	0.998549	0.750048	0.268404
Pd	Pd69	0.499060	0.999850	0.268274
Pd	Pd70	0.499069	0.250126	0.268274
Pd	Pd71	0.498762	0.500965	0.269566
Pd	Pd72	0.498770	0.749026	0.269562
Pd	Pd73	0.164871	0.124975	0.307885
Pd	Pd74	0.164500	0.374675	0.307670
Pd	Pd75	0.163153	0.624991	0.307803
Pd	Pd76	0.164520	0.875284	0.307651
Pd	Pd77	0.665055	0.124986	0.308005
Pd	Pd78	0.665349	0.374746	0.307720
Pd	Pd79	0.664406	0.624986	0.307814
Pd	Pd80	0.665352	0.875202	0.307719

Pd	Pd81	0.829501	0.749855	0.338151
Pd	Pd82	0.329627	0.999819	0.338051
Pd	Pd83	0.329635	0.250133	0.338053
Pd	Pd84	0.328435	0.498677	0.339584
Pd	Pd85	0.328456	0.751327	0.339592
Pd	Pd86	0.829963	0.000015	0.338305
Pd	Pd87	0.829969	0.249946	0.338321
Pd	Pd88	0.829483	0.500096	0.338150
Pd	Pd89	0.996797	0.124987	0.368335
Pd	Pd90	0.996559	0.375004	0.368297
Pd	Pd91	0.995819	0.624997	0.368621
Pd	Pd92	0.996571	0.874971	0.368295
Pd	Pd93	0.496746	0.124967	0.368075
Pd	Pd94	0.497327	0.372734	0.368078
Pd	Pd95	0.496967	0.625002	0.370588
Pd	Pd96	0.497335	0.877240	0.368093
C	C97	0.379375	0.624555	0.478820
O	O98	0.467003	0.624951	0.456833
O	O99	0.295491	0.624353	0.455858
H	H100	0.381785	0.624397	0.526127
H	H101	0.294652	0.624998	0.380423

Transition state of R3 H₂COO* + H* = H₂COOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447

Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166128	0.999577	0.202764
Pd	Pd50	0.166346	0.249524	0.202724
Pd	Pd51	0.165898	0.499671	0.202728
Pd	Pd52	0.166116	0.749889	0.202662
Pd	Pd53	0.665943	0.000015	0.202989
Pd	Pd54	0.665517	0.249870	0.203072
Pd	Pd55	0.666034	0.500055	0.202527
Pd	Pd56	0.665404	0.750048	0.203179
Pd	Pd57	0.331658	0.124797	0.235841
Pd	Pd58	0.330789	0.376172	0.237546
Pd	Pd59	0.330916	0.624543	0.236828
Pd	Pd60	0.331680	0.874284	0.236082
Pd	Pd61	0.830729	0.124940	0.236289
Pd	Pd62	0.830949	0.374638	0.235892
Pd	Pd63	0.831409	0.625170	0.235598
Pd	Pd64	0.830787	0.874951	0.236227
Pd	Pd65	0.998995	0.999842	0.268350
Pd	Pd66	0.998899	0.249619	0.268339
Pd	Pd67	0.998687	0.499634	0.268396
Pd	Pd68	0.999066	0.749900	0.268392
Pd	Pd69	0.500007	0.999818	0.268562
Pd	Pd70	0.499782	0.250960	0.270278
Pd	Pd71	0.500461	0.500357	0.268724
Pd	Pd72	0.499426	0.748721	0.270732
Pd	Pd73	0.165176	0.123323	0.307334
Pd	Pd74	0.163319	0.372308	0.307205
Pd	Pd75	0.163833	0.624661	0.306657
Pd	Pd76	0.165095	0.874686	0.307205
Pd	Pd77	0.666672	0.124598	0.308181
Pd	Pd78	0.667590	0.375016	0.307333
Pd	Pd79	0.667024	0.625188	0.307201
Pd	Pd80	0.666792	0.875658	0.308044
Pd	Pd81	0.831031	0.750097	0.338419
Pd	Pd82	0.330801	0.998904	0.338035

Pd	Pd83	0.329478	0.246207	0.338171
Pd	Pd84	0.326244	0.494644	0.338904
Pd	Pd85	0.329095	0.751512	0.339289
Pd	Pd86	0.831492	0.999936	0.338749
Pd	Pd87	0.831129	0.249752	0.338674
Pd	Pd88	0.830628	0.500263	0.338076
Pd	Pd89	0.998168	0.125006	0.368494
Pd	Pd90	0.997382	0.374868	0.368599
Pd	Pd91	0.997724	0.624988	0.368465
Pd	Pd92	0.998286	0.874951	0.368476
Pd	Pd93	0.498377	0.123030	0.368817
Pd	Pd94	0.498851	0.369375	0.368012
Pd	Pd95	0.498523	0.629741	0.370399
Pd	Pd96	0.499492	0.877605	0.369083
C	C97	0.390878	0.494647	0.460685
O	O98	0.486970	0.493199	0.434842
O	O99	0.314096	0.537256	0.426384
H	H100	0.374299	0.400336	0.474554
H	H101	0.396517	0.555052	0.498359
H	H102	0.368064	0.653286	0.392910

Transition state of R4 COOH* + H* = HOCOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166299	0.000002	0.202925
Pd	Pd50	0.166031	0.250044	0.202925
Pd	Pd51	0.166214	0.500020	0.202767
Pd	Pd52	0.166053	0.749974	0.202931
Pd	Pd53	0.665977	0.000009	0.202952
Pd	Pd54	0.665789	0.249884	0.202935
Pd	Pd55	0.665758	0.499995	0.202871
Pd	Pd56	0.665805	0.750116	0.202926
Pd	Pd57	0.331451	0.125348	0.236302
Pd	Pd58	0.331078	0.375196	0.236327
Pd	Pd59	0.331102	0.624805	0.236334
Pd	Pd60	0.331457	0.874677	0.236310
Pd	Pd61	0.830797	0.125055	0.236238
Pd	Pd62	0.830726	0.375286	0.236579
Pd	Pd63	0.830752	0.624709	0.236575
Pd	Pd64	0.830824	0.874948	0.236242
Pd	Pd65	0.999247	0.999998	0.268351
Pd	Pd66	0.999281	0.250015	0.268422
Pd	Pd67	0.998900	0.500006	0.268555
Pd	Pd68	0.999310	0.749995	0.268434
Pd	Pd69	0.499619	0.000019	0.268519
Pd	Pd70	0.499551	0.250733	0.269243
Pd	Pd71	0.499418	0.499991	0.269215
Pd	Pd72	0.499542	0.749250	0.269231
Pd	Pd73	0.165305	0.124701	0.307521
Pd	Pd74	0.165322	0.374839	0.307690
Pd	Pd75	0.165327	0.625182	0.307700
Pd	Pd76	0.165301	0.875323	0.307534
Pd	Pd77	0.665854	0.124405	0.308214
Pd	Pd78	0.665859	0.373469	0.307631
Pd	Pd79	0.665881	0.626551	0.307586
Pd	Pd80	0.665883	0.875610	0.308195
Pd	Pd81	0.831083	0.750839	0.338554
Pd	Pd82	0.330765	0.000020	0.338283
Pd	Pd83	0.330505	0.250757	0.338451

Pd	Pd84	0.329486	0.500018	0.338842
Pd	Pd85	0.330538	0.749255	0.338461
Pd	Pd86	0.831140	0.999991	0.338412
Pd	Pd87	0.831075	0.249141	0.338564
Pd	Pd88	0.828000	0.499995	0.340727
Pd	Pd89	0.998013	0.124985	0.368408
Pd	Pd90	0.997108	0.375251	0.368201
Pd	Pd91	0.997111	0.624708	0.368215
Pd	Pd92	0.998024	0.875000	0.368409
Pd	Pd93	0.497478	0.124993	0.368482
Pd	Pd94	0.498954	0.375283	0.370787
Pd	Pd95	0.499012	0.624716	0.370776
Pd	Pd96	0.497532	0.875017	0.368470
C	C97	0.563523	0.499969	0.427133
O	O98	0.515097	0.500061	0.478602
O	O99	0.657492	0.499896	0.430753
H	H100	0.443573	0.500207	0.470669
H	H101	0.706252	0.499695	0.374435

Transition state of R5 HCOOH* + H* = HOCHOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170

Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165935	0.999913	0.202937
Pd	Pd50	0.165987	0.249925	0.203000
Pd	Pd51	0.165896	0.499936	0.202980
Pd	Pd52	0.165882	0.749860	0.202951
Pd	Pd53	0.665814	0.999771	0.203035
Pd	Pd54	0.665754	0.249551	0.202754
Pd	Pd55	0.665616	0.500260	0.202800
Pd	Pd56	0.665616	0.750125	0.203073
Pd	Pd57	0.331055	0.124744	0.236301
Pd	Pd58	0.330936	0.374984	0.236256
Pd	Pd59	0.331191	0.624617	0.236408
Pd	Pd60	0.331070	0.874445	0.236307
Pd	Pd61	0.830499	0.125072	0.236381
Pd	Pd62	0.831508	0.375005	0.235876
Pd	Pd63	0.830440	0.624864	0.236358
Pd	Pd64	0.830489	0.874939	0.236341
Pd	Pd65	0.998852	0.000070	0.268396
Pd	Pd66	0.999432	0.249968	0.268496
Pd	Pd67	0.999480	0.500016	0.268552
Pd	Pd68	0.998987	0.749918	0.268432
Pd	Pd69	0.499605	0.999268	0.268395
Pd	Pd70	0.499428	0.250103	0.268762
Pd	Pd71	0.499658	0.499107	0.269373
Pd	Pd72	0.499741	0.749396	0.268837
Pd	Pd73	0.165291	0.124729	0.307793
Pd	Pd74	0.165985	0.374795	0.307967
Pd	Pd75	0.165674	0.624965	0.307834
Pd	Pd76	0.164855	0.875114	0.307498
Pd	Pd77	0.665713	0.124365	0.308483
Pd	Pd78	0.667404	0.374281	0.306008
Pd	Pd79	0.665910	0.625153	0.308319
Pd	Pd80	0.665814	0.875145	0.308478
Pd	Pd81	0.830787	0.749989	0.338596
Pd	Pd82	0.330368	0.999074	0.338398
Pd	Pd83	0.331089	0.249976	0.338290
Pd	Pd84	0.331397	0.499503	0.338561
Pd	Pd85	0.330584	0.749236	0.338584

Pd	Pd86	0.830761	0.999981	0.338733
Pd	Pd87	0.830805	0.249915	0.338608
Pd	Pd88	0.830779	0.499973	0.338559
Pd	Pd89	0.997641	0.124856	0.368457
Pd	Pd90	0.998042	0.374931	0.368395
Pd	Pd91	0.997856	0.625166	0.368436
Pd	Pd92	0.997638	0.875066	0.368418
Pd	Pd93	0.497286	0.122687	0.368195
Pd	Pd94	0.502901	0.372692	0.369964
Pd	Pd95	0.500624	0.624360	0.370358
Pd	Pd96	0.497696	0.873865	0.368774
C	C97	0.603767	0.379736	0.448035
O	O98	0.640726	0.484460	0.451894
O	O99	0.664028	0.282855	0.452543
H	H100	0.521083	0.362073	0.455050
H	H101	0.627141	0.209006	0.440643
H	H102	0.575341	0.561333	0.416813

Transition state of R6 CO₂* + H* = HCOO* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170

Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165806	0.999682	0.202868
Pd	Pd50	0.165900	0.249700	0.202864
Pd	Pd51	0.165734	0.499684	0.202846
Pd	Pd52	0.165842	0.749704	0.202877
Pd	Pd53	0.665653	0.000015	0.202970
Pd	Pd54	0.665014	0.249950	0.203105
Pd	Pd55	0.665482	0.500135	0.202856
Pd	Pd56	0.665161	0.750080	0.203129
Pd	Pd57	0.330906	0.124714	0.236106
Pd	Pd58	0.330575	0.374899	0.236348
Pd	Pd59	0.330542	0.624638	0.236252
Pd	Pd60	0.330846	0.874366	0.236207
Pd	Pd61	0.830143	0.124906	0.236199
Pd	Pd62	0.830481	0.374826	0.235884
Pd	Pd63	0.830645	0.625094	0.235720
Pd	Pd64	0.830223	0.874978	0.236248
Pd	Pd65	0.998484	0.999799	0.268379
Pd	Pd66	0.998490	0.249785	0.268324
Pd	Pd67	0.998530	0.499781	0.268324
Pd	Pd68	0.998559	0.749740	0.268354
Pd	Pd69	0.498938	0.999653	0.268330
Pd	Pd70	0.498290	0.251414	0.270329
Pd	Pd71	0.499205	0.499731	0.268803
Pd	Pd72	0.498742	0.748880	0.269534
Pd	Pd73	0.164149	0.124279	0.307539
Pd	Pd74	0.164246	0.374246	0.307664
Pd	Pd75	0.164293	0.623844	0.307767
Pd	Pd76	0.164101	0.874287	0.307529
Pd	Pd77	0.664954	0.124649	0.308019
Pd	Pd78	0.665610	0.375061	0.307383
Pd	Pd79	0.664718	0.625208	0.307539
Pd	Pd80	0.664832	0.875219	0.308172
Pd	Pd81	0.829269	0.749885	0.338237
Pd	Pd82	0.328671	0.998727	0.338129
Pd	Pd83	0.328344	0.247847	0.338260
Pd	Pd84	0.329002	0.497930	0.338055
Pd	Pd85	0.327770	0.749647	0.338268
Pd	Pd86	0.829716	0.999833	0.338505

Pd	Pd87	0.829686	0.249859	0.338275
Pd	Pd88	0.829242	0.500147	0.337956
Pd	Pd89	0.996445	0.124918	0.368304
Pd	Pd90	0.996392	0.374900	0.368297
Pd	Pd91	0.996157	0.624866	0.368246
Pd	Pd92	0.996292	0.874689	0.368333
Pd	Pd93	0.496150	0.120948	0.368509
Pd	Pd94	0.497615	0.368370	0.369414
Pd	Pd95	0.496267	0.626230	0.369923
Pd	Pd96	0.495752	0.874820	0.368435
C	C97	0.484964	0.543254	0.462295
O	O98	0.497098	0.429632	0.454496
O	O99	0.500179	0.613245	0.501278
H	H100	0.418100	0.590514	0.423342

Transition state of R7 HCOO* + H* = H₂COO* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170

Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165791	0.000002	0.202958
Pd	Pd50	0.165912	0.249924	0.202955
Pd	Pd51	0.165643	0.499999	0.202845
Pd	Pd52	0.165906	0.750082	0.202957
Pd	Pd53	0.665608	0.000000	0.202522
Pd	Pd54	0.665903	0.250712	0.203573
Pd	Pd55	0.665607	0.500004	0.203894
Pd	Pd56	0.665902	0.749279	0.203570
Pd	Pd57	0.330608	0.125190	0.236184
Pd	Pd58	0.330843	0.375195	0.235949
Pd	Pd59	0.330840	0.624809	0.235951
Pd	Pd60	0.330615	0.874812	0.236184
Pd	Pd61	0.830556	0.124900	0.236088
Pd	Pd62	0.831563	0.375090	0.235948
Pd	Pd63	0.831562	0.624909	0.235952
Pd	Pd64	0.830551	0.875103	0.236083
Pd	Pd65	0.998963	1.000000	0.268352
Pd	Pd66	0.999632	0.249839	0.268410
Pd	Pd67	0.999192	0.499992	0.268964
Pd	Pd68	0.999631	0.750161	0.268411
Pd	Pd69	0.498573	0.000003	0.268019
Pd	Pd70	0.498788	0.249820	0.268724
Pd	Pd71	0.499060	0.500006	0.269968
Pd	Pd72	0.498787	0.750196	0.268725
Pd	Pd73	0.165227	0.124763	0.307840
Pd	Pd74	0.164873	0.374681	0.307830
Pd	Pd75	0.164865	0.625326	0.307827
Pd	Pd76	0.165220	0.875245	0.307830
Pd	Pd77	0.665332	0.122661	0.308038
Pd	Pd78	0.666167	0.371128	0.307803
Pd	Pd79	0.666178	0.628883	0.307805
Pd	Pd80	0.665334	0.877352	0.308036
Pd	Pd81	0.832414	0.751849	0.337695
Pd	Pd82	0.329362	0.999999	0.338211
Pd	Pd83	0.329938	0.251308	0.337959
Pd	Pd84	0.328409	0.500007	0.337956
Pd	Pd85	0.329919	0.748701	0.337967
Pd	Pd86	0.831780	0.000010	0.338417
Pd	Pd87	0.832400	0.248169	0.337697
Pd	Pd88	0.831799	0.500001	0.338956
Pd	Pd89	0.998554	0.124732	0.368754

Pd	Pd90	0.998283	0.374628	0.368891
Pd	Pd91	0.998287	0.625366	0.368890
Pd	Pd92	0.998558	0.875267	0.368755
Pd	Pd93	0.495565	0.123593	0.368055
Pd	Pd94	0.489391	0.371294	0.371733
Pd	Pd95	0.489372	0.628726	0.371724
Pd	Pd96	0.495565	0.876433	0.368057
C	C97	0.674437	0.500068	0.421212
O	O98	0.637278	0.393628	0.404253
O	O99	0.637318	0.606501	0.404196
H	H100	0.695471	0.500148	0.466953
H	H101	0.770124	0.500013	0.401938

Transition state of R8 COOH* + H* = HCOOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170

Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165807	0.000085	0.202798
Pd	Pd50	0.165945	0.249939	0.202835
Pd	Pd51	0.165966	0.499873	0.202801
Pd	Pd52	0.165961	0.750028	0.202806
Pd	Pd53	0.665685	0.999797	0.203000
Pd	Pd54	0.665409	0.249763	0.202952
Pd	Pd55	0.665460	0.500120	0.202896
Pd	Pd56	0.665177	0.750075	0.203194
Pd	Pd57	0.331039	0.124932	0.236234
Pd	Pd58	0.331146	0.375236	0.236074
Pd	Pd59	0.331115	0.624867	0.236113
Pd	Pd60	0.331072	0.874576	0.236264
Pd	Pd61	0.830323	0.124952	0.236305
Pd	Pd62	0.830935	0.374918	0.235940
Pd	Pd63	0.831392	0.624948	0.235569
Pd	Pd64	0.830262	0.874917	0.236342
Pd	Pd65	0.998497	0.000085	0.268312
Pd	Pd66	0.998995	0.250077	0.268369
Pd	Pd67	0.999281	0.499965	0.268441
Pd	Pd68	0.999025	0.749833	0.268387
Pd	Pd69	0.499176	0.999617	0.268344
Pd	Pd70	0.498775	0.251527	0.269697
Pd	Pd71	0.500218	0.500672	0.269910
Pd	Pd72	0.499173	0.748295	0.270121
Pd	Pd73	0.164681	0.125214	0.307517
Pd	Pd74	0.165025	0.374858	0.307590
Pd	Pd75	0.165495	0.624758	0.307589
Pd	Pd76	0.163996	0.875638	0.307236
Pd	Pd77	0.665424	0.124525	0.308082
Pd	Pd78	0.666835	0.374460	0.307061
Pd	Pd79	0.666672	0.624839	0.307088
Pd	Pd80	0.665311	0.875273	0.308648
Pd	Pd81	0.830271	0.749715	0.338349
Pd	Pd82	0.328852	0.999716	0.338311
Pd	Pd83	0.329658	0.249347	0.338138
Pd	Pd84	0.331011	0.499273	0.337541
Pd	Pd85	0.328860	0.750489	0.338090
Pd	Pd86	0.830391	0.999728	0.338668
Pd	Pd87	0.830696	0.249626	0.338459
Pd	Pd88	0.830481	0.499977	0.338209
Pd	Pd89	0.997358	0.124696	0.368328
Pd	Pd90	0.997415	0.374785	0.368430
Pd	Pd91	0.997520	0.624983	0.368273

Pd	Pd92	0.996947	0.874770	0.368394
Pd	Pd93	0.496920	0.121947	0.368435
Pd	Pd94	0.499740	0.366833	0.369431
Pd	Pd95	0.500376	0.630520	0.371401
Pd	Pd96	0.496155	0.878279	0.368863
C	C97	0.549248	0.555536	0.444691
O	O98	0.537390	0.445360	0.454085
O	O99	0.615636	0.618196	0.476022
H	H100	0.617465	0.702021	0.461523
H	H101	0.456611	0.634195	0.436031

Transition state of R9 HCOOH* + H* = H₂COOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894

Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166227	0.000013	0.203082
Pd	Pd50	0.166126	0.249936	0.203030
Pd	Pd51	0.165507	0.499939	0.203086
Pd	Pd52	0.166071	0.750025	0.203064
Pd	Pd53	0.666167	0.999751	0.202998
Pd	Pd54	0.666010	0.249110	0.202510
Pd	Pd55	0.665871	0.499630	0.202192
Pd	Pd56	0.665908	0.750587	0.202350
Pd	Pd57	0.331575	0.125291	0.236355
Pd	Pd58	0.331120	0.375220	0.236145
Pd	Pd59	0.331048	0.624597	0.236142
Pd	Pd60	0.331455	0.874635	0.236333
Pd	Pd61	0.831295	0.124900	0.236249
Pd	Pd62	0.831280	0.374995	0.236445
Pd	Pd63	0.831403	0.624124	0.236392
Pd	Pd64	0.831128	0.874520	0.236252
Pd	Pd65	0.999951	0.999806	0.268470
Pd	Pd66	0.000152	0.249810	0.268572
Pd	Pd67	0.997855	0.499637	0.269571
Pd	Pd68	0.000039	0.749588	0.268564
Pd	Pd69	0.500024	0.999861	0.268305
Pd	Pd70	0.499671	0.250437	0.269130
Pd	Pd71	0.499893	0.499684	0.269265
Pd	Pd72	0.499237	0.749416	0.269127
Pd	Pd73	0.166852	0.125067	0.308034
Pd	Pd74	0.166605	0.374784	0.307963
Pd	Pd75	0.166553	0.624728	0.307937
Pd	Pd76	0.166627	0.874913	0.307987
Pd	Pd77	0.666779	0.123476	0.308154
Pd	Pd78	0.667005	0.371805	0.305436
Pd	Pd79	0.666564	0.627424	0.304641
Pd	Pd80	0.666697	0.875346	0.308451
Pd	Pd81	0.832150	0.750101	0.338467
Pd	Pd82	0.331502	0.999990	0.338514
Pd	Pd83	0.333349	0.251121	0.338298
Pd	Pd84	0.333105	0.499767	0.338236
Pd	Pd85	0.332940	0.748964	0.338236
Pd	Pd86	0.832128	0.999361	0.338406
Pd	Pd87	0.832109	0.248296	0.338620
Pd	Pd88	0.827690	0.498741	0.342088
Pd	Pd89	0.999163	0.124324	0.368493
Pd	Pd90	0.998785	0.374261	0.368617
Pd	Pd91	0.998477	0.624400	0.368557
Pd	Pd92	0.998986	0.874558	0.368428
Pd	Pd93	0.499133	0.123194	0.368543

Pd	Pd94	0.503790	0.369428	0.370360
Pd	Pd95	0.502527	0.631464	0.370011
Pd	Pd96	0.499242	0.877227	0.368725
C	C97	0.671875	0.524294	0.439788
O	O98	0.577899	0.506763	0.426615
O	O99	0.701550	0.638561	0.454816
H	H100	0.706398	0.455307	0.467274
H	H101	0.667259	0.697678	0.429918
H	H102	0.728820	0.496436	0.389141

Transition state of R10 HOCOH* + H* = HOCHOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894

Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165986	0.000471	0.202918
Pd	Pd50	0.165935	0.250196	0.202927
Pd	Pd51	0.165901	0.500244	0.202865
Pd	Pd52	0.165934	0.750472	0.202873
Pd	Pd53	0.665802	0.000015	0.203019
Pd	Pd54	0.665497	0.249736	0.203036
Pd	Pd55	0.665721	0.499758	0.202815
Pd	Pd56	0.665393	0.750201	0.202965
Pd	Pd57	0.331469	0.125801	0.236358
Pd	Pd58	0.331039	0.375482	0.236192
Pd	Pd59	0.330748	0.625336	0.236017
Pd	Pd60	0.331142	0.875307	0.236280
Pd	Pd61	0.830482	0.125046	0.236406
Pd	Pd62	0.830701	0.374931	0.236195
Pd	Pd63	0.831560	0.624932	0.235720
Pd	Pd64	0.830484	0.874996	0.236295
Pd	Pd65	0.998779	0.000265	0.268358
Pd	Pd66	0.998875	0.250287	0.268435
Pd	Pd67	0.999387	0.500173	0.268559
Pd	Pd68	0.999198	0.750288	0.268471
Pd	Pd69	0.499533	0.000123	0.268575
Pd	Pd70	0.499618	0.251779	0.269575
Pd	Pd71	0.499438	0.500705	0.269162
Pd	Pd72	0.498842	0.748290	0.270134
Pd	Pd73	0.165037	0.125417	0.307639
Pd	Pd74	0.164898	0.375095	0.307686
Pd	Pd75	0.165120	0.626198	0.307726
Pd	Pd76	0.164726	0.876446	0.307622
Pd	Pd77	0.665623	0.124733	0.308388
Pd	Pd78	0.665953	0.374718	0.307846
Pd	Pd79	0.667676	0.625080	0.306425
Pd	Pd80	0.665726	0.875235	0.308212
Pd	Pd81	0.830669	0.749830	0.338465
Pd	Pd82	0.330394	0.001380	0.338433
Pd	Pd83	0.330400	0.251791	0.338422
Pd	Pd84	0.329163	0.501026	0.337690
Pd	Pd85	0.329793	0.751072	0.338159
Pd	Pd86	0.830614	1.000000	0.338632
Pd	Pd87	0.830337	0.250035	0.338710
Pd	Pd88	0.830457	0.499857	0.338659
Pd	Pd89	0.997324	0.125168	0.368405
Pd	Pd90	0.997051	0.375068	0.368498
Pd	Pd91	0.997395	0.625103	0.368504
Pd	Pd92	0.997165	0.875161	0.368459
Pd	Pd93	0.497242	0.126889	0.368538
Pd	Pd94	0.498778	0.378983	0.371443

Pd	Pd95	0.501026	0.629368	0.370382
Pd	Pd96	0.497056	0.877714	0.368705
C	C97	0.534649	0.499450	0.437526
O	O98	0.473539	0.463111	0.481177
O	O99	0.629589	0.475876	0.453781
H	H100	0.405356	0.483440	0.470152
H	H101	0.673736	0.493821	0.421190
H	H102	0.524445	0.623967	0.438959

Transition state of R11 C* + H* = CH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894

Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165782	0.000014	0.202564
Pd	Pd50	0.165736	0.249950	0.202597
Pd	Pd51	0.165785	0.500003	0.202657
Pd	Pd52	0.165730	0.750067	0.202590
Pd	Pd53	0.665795	0.000006	0.202921
Pd	Pd54	0.665294	0.250061	0.203520
Pd	Pd55	0.665609	0.500017	0.202522
Pd	Pd56	0.665302	0.749955	0.203523
Pd	Pd57	0.330742	0.125092	0.235816
Pd	Pd58	0.331261	0.375555	0.236167
Pd	Pd59	0.331261	0.624470	0.236159
Pd	Pd60	0.330749	0.874920	0.235815
Pd	Pd61	0.830821	0.124944	0.236230
Pd	Pd62	0.830724	0.375134	0.236417
Pd	Pd63	0.830740	0.624875	0.236414
Pd	Pd64	0.830814	0.875048	0.236237
Pd	Pd65	0.999237	0.999991	0.268280
Pd	Pd66	0.999290	0.249852	0.268320
Pd	Pd67	0.998870	0.499989	0.268556
Pd	Pd68	0.999281	0.750135	0.268319
Pd	Pd69	0.499227	0.999997	0.268374
Pd	Pd70	0.498212	0.248404	0.269322
Pd	Pd71	0.499967	0.500000	0.271980
Pd	Pd72	0.498214	0.751600	0.269318
Pd	Pd73	0.165219	0.124199	0.307112
Pd	Pd74	0.164783	0.374335	0.306853
Pd	Pd75	0.164782	0.625672	0.306845
Pd	Pd76	0.165214	0.875793	0.307103
Pd	Pd77	0.666426	0.122991	0.308274
Pd	Pd78	0.667194	0.368599	0.309200
Pd	Pd79	0.667171	0.631369	0.309191
Pd	Pd80	0.666431	0.876992	0.308288
Pd	Pd81	0.833647	0.752319	0.338877
Pd	Pd82	0.330800	0.999985	0.337872
Pd	Pd83	0.329231	0.250311	0.337779
Pd	Pd84	0.326594	0.499999	0.339069
Pd	Pd85	0.329241	0.749676	0.337771
Pd	Pd86	0.832285	0.000001	0.338454
Pd	Pd87	0.833652	0.247669	0.338862
Pd	Pd88	0.833466	0.500002	0.339898
Pd	Pd89	0.000346	0.124248	0.368740
Pd	Pd90	0.999293	0.374153	0.368638
Pd	Pd91	0.999302	0.625797	0.368640
Pd	Pd92	0.000362	0.875719	0.368730
Pd	Pd93	0.497518	0.123005	0.368883
Pd	Pd94	0.492007	0.369455	0.376167
Pd	Pd95	0.492039	0.630514	0.376157

Pd	Pd96	0.497523	0.876956	0.368885
C	C97	0.579362	0.499973	0.347261
H	H98	0.671852	0.500015	0.364875

Transition state of R12 CH* + H* = CH₂* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166351	0.999139	0.203091
Pd	Pd50	0.166128	0.249719	0.202996
Pd	Pd51	0.165984	0.499897	0.202846
Pd	Pd52	0.166150	0.749795	0.202890
Pd	Pd53	0.665658	0.000379	0.202951
Pd	Pd54	0.665244	0.250341	0.203194
Pd	Pd55	0.665531	0.500157	0.202955
Pd	Pd56	0.665583	0.750374	0.202798
Pd	Pd57	0.331085	0.124719	0.236119
Pd	Pd58	0.330630	0.376343	0.236968
Pd	Pd59	0.331047	0.625203	0.237225
Pd	Pd60	0.331165	0.873254	0.237442
Pd	Pd61	0.830052	0.125113	0.236214
Pd	Pd62	0.830052	0.374844	0.235979
Pd	Pd63	0.831646	0.625228	0.235357
Pd	Pd64	0.830380	0.875452	0.236011
Pd	Pd65	0.998848	0.999884	0.268280
Pd	Pd66	0.998148	0.249199	0.268169
Pd	Pd67	0.998070	0.499438	0.268180
Pd	Pd68	0.998484	0.750575	0.268219
Pd	Pd69	0.499432	0.001177	0.268509
Pd	Pd70	0.498873	0.251744	0.269120
Pd	Pd71	0.499424	0.500894	0.269753
Pd	Pd72	0.499800	0.750874	0.269933
Pd	Pd73	0.164823	0.122827	0.307865
Pd	Pd74	0.162455	0.373063	0.307335
Pd	Pd75	0.162084	0.625055	0.306619
Pd	Pd76	0.165449	0.873631	0.308243
Pd	Pd77	0.665330	0.125850	0.308288
Pd	Pd78	0.664283	0.375738	0.308373
Pd	Pd79	0.666626	0.626615	0.306550
Pd	Pd80	0.665963	0.876345	0.307862
Pd	Pd81	0.829886	0.750486	0.338023
Pd	Pd82	0.331079	0.998485	0.338375
Pd	Pd83	0.328738	0.248912	0.337514
Pd	Pd84	0.324223	0.496694	0.340888
Pd	Pd85	0.330924	0.748947	0.342817
Pd	Pd86	0.830305	0.000552	0.338410
Pd	Pd87	0.829441	0.250730	0.338395
Pd	Pd88	0.828895	0.500714	0.337846
Pd	Pd89	0.996714	0.125431	0.368287
Pd	Pd90	0.995482	0.375235	0.368282
Pd	Pd91	0.995893	0.625056	0.368114
Pd	Pd92	0.996928	0.875198	0.368259
Pd	Pd93	0.497296	0.128175	0.368546
Pd	Pd94	0.494893	0.375096	0.370799
Pd	Pd95	0.507179	0.631046	0.372680
Pd	Pd96	0.500286	0.882845	0.369455
C	C97	0.364245	0.618023	0.399086
H	H98	0.327967	0.630968	0.440632
H	H99	0.428593	0.521991	0.408335

Transition state of R13 $\text{CH}_2^* + \text{H}^* = \text{CH}_3^* + ^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617

Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166233	0.000453	0.202866
Pd	Pd50	0.166017	0.250196	0.202865
Pd	Pd51	0.165970	0.500252	0.202805
Pd	Pd52	0.166126	0.750500	0.202799
Pd	Pd53	0.665702	0.000140	0.203045
Pd	Pd54	0.665421	0.250057	0.203173
Pd	Pd55	0.665517	0.499925	0.203003
Pd	Pd56	0.665415	0.750163	0.203047
Pd	Pd57	0.331743	0.125769	0.236310
Pd	Pd58	0.331362	0.375557	0.236207
Pd	Pd59	0.331121	0.625524	0.236150
Pd	Pd60	0.331482	0.875389	0.236241
Pd	Pd61	0.830555	0.125006	0.236336
Pd	Pd62	0.830444	0.374874	0.236127
Pd	Pd63	0.831371	0.625186	0.235597
Pd	Pd64	0.830649	0.875273	0.236218
Pd	Pd65	0.999193	0.000267	0.268359
Pd	Pd66	0.999016	0.250231	0.268382
Pd	Pd67	0.999269	0.500193	0.268461
Pd	Pd68	0.999324	0.750352	0.268388
Pd	Pd69	0.499813	0.000220	0.269064
Pd	Pd70	0.499617	0.251828	0.269728
Pd	Pd71	0.499746	0.501401	0.269960
Pd	Pd72	0.499324	0.749347	0.270145
Pd	Pd73	0.165456	0.125430	0.307487
Pd	Pd74	0.165031	0.375130	0.307469
Pd	Pd75	0.165315	0.625989	0.307493
Pd	Pd76	0.165361	0.876133	0.307451
Pd	Pd77	0.665976	0.124992	0.308392
Pd	Pd78	0.666034	0.374927	0.308510
Pd	Pd79	0.667366	0.625501	0.307029
Pd	Pd80	0.666084	0.875730	0.308217
Pd	Pd81	0.831101	0.750232	0.338224
Pd	Pd82	0.330947	0.001259	0.338420
Pd	Pd83	0.330279	0.251128	0.338534
Pd	Pd84	0.328913	0.500720	0.337599
Pd	Pd85	0.329857	0.751592	0.338355
Pd	Pd86	0.831130	0.000153	0.338680
Pd	Pd87	0.830976	0.249937	0.338524
Pd	Pd88	0.830843	0.500072	0.338123
Pd	Pd89	0.998076	0.125185	0.368355
Pd	Pd90	0.997675	0.375108	0.368448
Pd	Pd91	0.997907	0.625218	0.368368
Pd	Pd92	0.997952	0.875221	0.368366
Pd	Pd93	0.497889	0.127801	0.368828
Pd	Pd94	0.497721	0.376656	0.371547
Pd	Pd95	0.499582	0.628988	0.371455
Pd	Pd96	0.497823	0.877621	0.369408
C	C97	0.506964	0.502641	0.434200
H	H98	0.443733	0.491289	0.463332
H	H99	0.579293	0.495554	0.455744
H	H100	0.498318	0.662386	0.437199

Transition state of R14 $\text{CH}_3^* + \text{H}^* = \text{CH}_4^* + *$ on Pd(211)
data_

_cell_length_a	13.456032		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	23.511980		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617

Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166135	0.000314	0.202966
Pd	Pd50	0.166088	0.250201	0.202960
Pd	Pd51	0.165968	0.500222	0.202890
Pd	Pd52	0.166093	0.750342	0.202896
Pd	Pd53	0.665889	0.999932	0.202996
Pd	Pd54	0.665806	0.249897	0.203036
Pd	Pd55	0.665725	0.499785	0.202935
Pd	Pd56	0.665273	0.750078	0.203125
Pd	Pd57	0.331397	0.125585	0.236322
Pd	Pd58	0.331159	0.375609	0.236265
Pd	Pd59	0.331169	0.625208	0.236128
Pd	Pd60	0.331454	0.875000	0.236308
Pd	Pd61	0.830714	0.124942	0.236340
Pd	Pd62	0.830905	0.374920	0.236149
Pd	Pd63	0.831237	0.625041	0.235783
Pd	Pd64	0.830732	0.874923	0.236203
Pd	Pd65	0.999214	0.000143	0.268391
Pd	Pd66	0.999405	0.250173	0.268428
Pd	Pd67	0.999728	0.500117	0.268520
Pd	Pd68	0.999597	0.750071	0.268458
Pd	Pd69	0.499677	0.000090	0.268391
Pd	Pd70	0.499773	0.250897	0.268755
Pd	Pd71	0.499853	0.500594	0.269527
Pd	Pd72	0.499331	0.748070	0.270545
Pd	Pd73	0.165455	0.125416	0.307775
Pd	Pd74	0.165703	0.375424	0.307782
Pd	Pd75	0.166125	0.625740	0.307784
Pd	Pd76	0.165367	0.875934	0.307692
Pd	Pd77	0.665820	0.124776	0.308326
Pd	Pd78	0.666153	0.374598	0.308127
Pd	Pd79	0.667090	0.624868	0.307224
Pd	Pd80	0.666177	0.875277	0.308142
Pd	Pd81	0.831188	0.749846	0.338287
Pd	Pd82	0.330485	0.001094	0.338423
Pd	Pd83	0.330477	0.251352	0.338399
Pd	Pd84	0.330863	0.501269	0.338222
Pd	Pd85	0.330801	0.751072	0.338274
Pd	Pd86	0.830908	0.999930	0.338584
Pd	Pd87	0.830920	0.249881	0.338488
Pd	Pd88	0.831290	0.499885	0.338158
Pd	Pd89	0.997770	0.124993	0.368387
Pd	Pd90	0.997898	0.374804	0.368426
Pd	Pd91	0.998274	0.625098	0.368420
Pd	Pd92	0.997782	0.875067	0.368408
Pd	Pd93	0.497515	0.126852	0.368360
Pd	Pd94	0.497944	0.374789	0.369770
Pd	Pd95	0.501868	0.629124	0.372324
Pd	Pd96	0.497476	0.878701	0.368312
C	C97	0.534808	0.618262	0.460890
H	H98	0.468760	0.663071	0.478324
H	H99	0.552387	0.536801	0.485854
H	H100	0.600489	0.677292	0.458915
H	H101	0.515064	0.508445	0.414981

Transition state of R15 $\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{HCO}^* + *$ on Pd(211)

data_
 _cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804

_cell_length_c	23.511980		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd Pd49	0.165766	0.000035	0.202865

Pd	Pd50	0.165749	0.250040	0.202865
Pd	Pd51	0.165601	0.500046	0.202918
Pd	Pd52	0.165753	0.750025	0.202893
Pd	Pd53	0.665656	0.999883	0.202937
Pd	Pd54	0.665430	0.249827	0.202976
Pd	Pd55	0.665414	0.500051	0.203028
Pd	Pd56	0.665469	0.749917	0.203213
Pd	Pd57	0.330770	0.125198	0.236192
Pd	Pd58	0.330724	0.375077	0.236128
Pd	Pd59	0.330718	0.624968	0.236151
Pd	Pd60	0.330743	0.874903	0.236175
Pd	Pd61	0.830341	0.124894	0.236217
Pd	Pd62	0.830642	0.375117	0.236031
Pd	Pd63	0.830460	0.624768	0.236117
Pd	Pd64	0.830298	0.874983	0.236226
Pd	Pd65	0.998453	0.000005	0.268317
Pd	Pd66	0.998942	0.249935	0.268384
Pd	Pd67	0.998847	0.499963	0.268549
Pd	Pd68	0.998899	0.750026	0.268363
Pd	Pd69	0.499078	0.999998	0.268326
Pd	Pd70	0.498880	0.250342	0.268995
Pd	Pd71	0.498730	0.499965	0.269487
Pd	Pd72	0.498778	0.749735	0.268946
Pd	Pd73	0.164613	0.124545	0.307455
Pd	Pd74	0.164745	0.374541	0.307573
Pd	Pd75	0.164667	0.625502	0.307607
Pd	Pd76	0.164579	0.875645	0.307453
Pd	Pd77	0.665426	0.124059	0.308275
Pd	Pd78	0.666206	0.373147	0.307321
Pd	Pd79	0.665991	0.626082	0.308120
Pd	Pd80	0.665404	0.875669	0.308331
Pd	Pd81	0.831025	0.750617	0.338247
Pd	Pd82	0.329905	0.000164	0.338251
Pd	Pd83	0.330078	0.251023	0.338291
Pd	Pd84	0.328624	0.499969	0.337981
Pd	Pd85	0.329664	0.749317	0.338258
Pd	Pd86	0.830442	0.999838	0.338639
Pd	Pd87	0.831042	0.249050	0.338243
Pd	Pd88	0.830996	0.499717	0.338840
Pd	Pd89	0.997635	0.124729	0.368483
Pd	Pd90	0.997472	0.374548	0.368553
Pd	Pd91	0.997336	0.625227	0.368555
Pd	Pd92	0.997643	0.875127	0.368478
Pd	Pd93	0.496975	0.124523	0.368344
Pd	Pd94	0.499079	0.374049	0.371330
Pd	Pd95	0.497527	0.626743	0.371456
Pd	Pd96	0.496842	0.875744	0.368329
C	C97	0.582770	0.500931	0.413492
O	O98	0.594090	0.499440	0.464536
H	H99	0.654332	0.507716	0.379094

Transition state of R16 $\text{HCO}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{CO}^* + *$ on Pd(211)

```

data
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha    90.000000
_cell_angle_beta     90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.166667 -0.000000 0.000000
Pd Pd2 0.166667 0.250000 0.000000
Pd Pd3 0.166667 0.500000 0.000000
Pd Pd4 0.166667 0.750000 0.000000
Pd Pd5 0.666667 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.666667 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.666667 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.666667 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.333333 0.125000 0.033723
Pd Pd10 0.333333 0.375000 0.033723
Pd Pd11 0.333333 0.625000 0.033723
Pd Pd12 0.333333 0.875000 0.033723
Pd Pd13 0.833333 0.125000 0.033723
Pd Pd14 0.833333 0.375000 0.033723
Pd Pd15 0.833333 0.625000 0.033723
Pd Pd16 0.833333 0.875000 0.033723
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.067447
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.067447
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.067447
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.067447
Pd Pd21 0.500000 -0.000000 0.067447
Pd Pd22 0.500000 0.250000 0.067447
Pd Pd23 0.500000 0.500000 0.067447
Pd Pd24 0.500000 0.750000 0.067447
Pd Pd25 0.166667 0.125000 0.101170
Pd Pd26 0.166667 0.375000 0.101170
Pd Pd27 0.166667 0.625000 0.101170
Pd Pd28 0.166667 0.875000 0.101170
Pd Pd29 0.666667 0.125000 0.101170
Pd Pd30 0.666667 0.375000 0.101170
Pd Pd31 0.666667 0.625000 0.101170
Pd Pd32 0.666667 0.875000 0.101170
Pd Pd33 0.333333 -0.000000 0.134894
Pd Pd34 0.333333 0.250000 0.134894
Pd Pd35 0.333333 0.500000 0.134894
Pd Pd36 0.333333 0.750000 0.134894
Pd Pd37 0.833333 -0.000000 0.134894
Pd Pd38 0.833333 0.250000 0.134894
Pd Pd39 0.833333 0.500000 0.134894
Pd Pd40 0.833333 0.750000 0.134894
Pd Pd41 0.000000 0.125000 0.168617
Pd Pd42 0.000000 0.375000 0.168617
Pd Pd43 0.000000 0.625000 0.168617
Pd Pd44 0.000000 0.875000 0.168617
Pd Pd45 0.500000 0.125000 0.168617
Pd Pd46 0.500000 0.375000 0.168617
Pd Pd47 0.500000 0.625000 0.168617
Pd Pd48 0.500000 0.875000 0.168617
Pd Pd49 0.165880 0.999891 0.202903
Pd Pd50 0.166027 0.249862 0.202910
Pd Pd51 0.165791 0.499965 0.202908
Pd Pd52 0.166109 0.749822 0.202957
Pd Pd53 0.665933 0.999502 0.202869

```

Pd	Pd54	0.665419	0.249494	0.202662
Pd	Pd55	0.665570	0.500449	0.203312
Pd	Pd56	0.665746	0.749539	0.203605
Pd	Pd57	0.331165	0.125093	0.236187
Pd	Pd58	0.331022	0.375414	0.235985
Pd	Pd59	0.331418	0.624547	0.236282
Pd	Pd60	0.331024	0.874587	0.236240
Pd	Pd61	0.830667	0.124904	0.236187
Pd	Pd62	0.830946	0.374774	0.235995
Pd	Pd63	0.830894	0.624725	0.236252
Pd	Pd64	0.830878	0.874829	0.236328
Pd	Pd65	0.998979	0.999981	0.268331
Pd	Pd66	0.999476	0.249775	0.268404
Pd	Pd67	0.999558	0.499797	0.268491
Pd	Pd68	0.999634	0.749689	0.268425
Pd	Pd69	0.499648	0.000235	0.268023
Pd	Pd70	0.498990	0.251185	0.269588
Pd	Pd71	0.499738	0.499704	0.269886
Pd	Pd72	0.499575	0.750201	0.269197
Pd	Pd73	0.165794	0.124586	0.307780
Pd	Pd74	0.165654	0.374308	0.307638
Pd	Pd75	0.165980	0.624534	0.307918
Pd	Pd76	0.165355	0.874893	0.307522
Pd	Pd77	0.666245	0.124352	0.307933
Pd	Pd78	0.666475	0.372945	0.306499
Pd	Pd79	0.666682	0.624720	0.309748
Pd	Pd80	0.666315	0.875879	0.308476
Pd	Pd81	0.831943	0.750003	0.338420
Pd	Pd82	0.330296	0.999541	0.338229
Pd	Pd83	0.331933	0.250336	0.337811
Pd	Pd84	0.331159	0.498925	0.338271
Pd	Pd85	0.330974	0.748600	0.338289
Pd	Pd86	0.831243	0.999767	0.338661
Pd	Pd87	0.831337	0.249328	0.338426
Pd	Pd88	0.832005	0.498791	0.338407
Pd	Pd89	0.998375	0.124489	0.368421
Pd	Pd90	0.998436	0.374193	0.368532
Pd	Pd91	0.998237	0.624656	0.368464
Pd	Pd92	0.998414	0.874984	0.368470
Pd	Pd93	0.498077	0.121934	0.368411
Pd	Pd94	0.500489	0.367299	0.371560
Pd	Pd95	0.494006	0.630248	0.372302
Pd	Pd96	0.497369	0.877577	0.368431
C	C97	0.578183	0.561411	0.434683
O	O98	0.575284	0.448526	0.443190
H	H99	0.593965	0.623381	0.470714
H	H100	0.629208	0.599229	0.386411

Transition state of R17 $\text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{H}_3\text{CO}^* + *$ on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol

```

_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd Pd49	0.165968	0.999871	0.202900
Pd Pd50	0.166123	0.249684	0.202884
Pd Pd51	0.165882	0.499792	0.202868
Pd Pd52	0.166176	0.749867	0.203002
Pd Pd53	0.666007	0.999754	0.202910
Pd Pd54	0.665402	0.249477	0.202732
Pd Pd55	0.665655	0.500408	0.203190
Pd Pd56	0.665836	0.750030	0.203218

Pd	Pd57	0.331435	0.125102	0.236315
Pd	Pd58	0.331271	0.374994	0.235898
Pd	Pd59	0.331311	0.624539	0.235923
Pd	Pd60	0.331468	0.874791	0.236141
Pd	Pd61	0.830805	0.125030	0.236192
Pd	Pd62	0.830937	0.374882	0.235962
Pd	Pd63	0.830958	0.624877	0.236195
Pd	Pd64	0.830910	0.874873	0.236313
Pd	Pd65	0.999206	0.999998	0.268283
Pd	Pd66	0.999680	0.249993	0.268411
Pd	Pd67	0.999710	0.499928	0.268483
Pd	Pd68	0.999820	0.749713	0.268424
Pd	Pd69	0.499918	0.000175	0.268177
Pd	Pd70	0.499229	0.251850	0.269975
Pd	Pd71	0.499781	0.500352	0.269782
Pd	Pd72	0.500257	0.749635	0.268988
Pd	Pd73	0.166051	0.124401	0.307750
Pd	Pd74	0.165766	0.374173	0.307725
Pd	Pd75	0.166317	0.624694	0.307921
Pd	Pd76	0.165592	0.875025	0.307606
Pd	Pd77	0.666501	0.124278	0.307980
Pd	Pd78	0.666702	0.373871	0.306644
Pd	Pd79	0.666923	0.624752	0.308851
Pd	Pd80	0.666638	0.875639	0.308470
Pd	Pd81	0.831953	0.749871	0.338475
Pd	Pd82	0.330782	0.999244	0.338261
Pd	Pd83	0.331720	0.250147	0.338200
Pd	Pd84	0.331142	0.498733	0.337500
Pd	Pd85	0.332218	0.748243	0.337439
Pd	Pd86	0.831498	0.999830	0.338585
Pd	Pd87	0.831435	0.249554	0.338348
Pd	Pd88	0.831884	0.499247	0.338277
Pd	Pd89	0.998601	0.124645	0.368310
Pd	Pd90	0.998342	0.374583	0.368548
Pd	Pd91	0.998479	0.624845	0.368448
Pd	Pd92	0.998553	0.874969	0.368395
Pd	Pd93	0.498399	0.122003	0.368482
Pd	Pd94	0.501131	0.368810	0.371222
Pd	Pd95	0.496640	0.630100	0.371798
Pd	Pd96	0.498051	0.876675	0.368480
C	C97	0.591717	0.547592	0.443128
O	O98	0.578288	0.427652	0.439876
H	H99	0.531850	0.601696	0.464505
H	H100	0.618926	0.599001	0.390985
H	H101	0.665882	0.574860	0.459126

Transition state of R18 COH* + H* = HCOH* + * on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x

```

_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165878	0.998059	0.202804
Pd	Pd50	0.165746	0.248354	0.202871
Pd	Pd51	0.165727	0.498849	0.202853
Pd	Pd52	0.166174	0.748736	0.202786
Pd	Pd53	0.665839	0.002078	0.203029
Pd	Pd54	0.664884	0.252513	0.204688
Pd	Pd55	0.665542	0.500642	0.203498
Pd	Pd56	0.665956	0.751607	0.202688
Pd	Pd57	0.330851	0.122464	0.236042
Pd	Pd58	0.330759	0.373197	0.235940

Pd	Pd59	0.331181	0.623300	0.236118
Pd	Pd60	0.331412	0.872498	0.236499
Pd	Pd61	0.830132	0.126458	0.236497
Pd	Pd62	0.829253	0.376243	0.237005
Pd	Pd63	0.832430	0.626521	0.235424
Pd	Pd64	0.831248	0.876611	0.236205
Pd	Pd65	0.998780	0.999994	0.268282
Pd	Pd66	0.998238	0.250221	0.268367
Pd	Pd67	0.000155	0.500228	0.268500
Pd	Pd68	0.000682	0.750303	0.268510
Pd	Pd69	0.499902	0.999131	0.268564
Pd	Pd70	0.499333	0.248830	0.269423
Pd	Pd71	0.498165	0.499174	0.268911
Pd	Pd72	0.500143	0.749096	0.269232
Pd	Pd73	0.163758	0.119862	0.307153
Pd	Pd74	0.164384	0.371534	0.307050
Pd	Pd75	0.166491	0.623788	0.307671
Pd	Pd76	0.166740	0.871977	0.307818
Pd	Pd77	0.665934	0.128247	0.309138
Pd	Pd78	0.664094	0.383333	0.315528
Pd	Pd79	0.669931	0.632258	0.305667
Pd	Pd80	0.667492	0.879405	0.307972
Pd	Pd81	0.834206	0.754304	0.338237
Pd	Pd82	0.331490	0.994562	0.338475
Pd	Pd83	0.328084	0.245101	0.337289
Pd	Pd84	0.327549	0.495644	0.338089
Pd	Pd85	0.335108	0.742507	0.338961
Pd	Pd86	0.831498	0.003525	0.338750
Pd	Pd87	0.831301	0.252982	0.339301
Pd	Pd88	0.836136	0.504078	0.337903
Pd	Pd89	0.998407	0.126878	0.368698
Pd	Pd90	0.998820	0.375853	0.368815
Pd	Pd91	0.000949	0.627757	0.368912
Pd	Pd92	0.999986	0.878098	0.368595
Pd	Pd93	0.496326	0.119048	0.368962
Pd	Pd94	0.489506	0.366718	0.371700
Pd	Pd95	0.500131	0.616259	0.373018
Pd	Pd96	0.500165	0.870948	0.368750
C	C97	0.609093	0.467111	0.387251
O	O98	0.657006	0.453276	0.437605
H	H99	0.695418	0.377160	0.436319
H	H100	0.628954	0.590269	0.376101

Transition state of R19 HCOH* + H* = CH₂OH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.166667 -0.000000 0.000000

Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166164	0.000489	0.202898
Pd	Pd50	0.166032	0.250239	0.202931
Pd	Pd51	0.166051	0.500231	0.202855
Pd	Pd52	0.166069	0.750465	0.202857
Pd	Pd53	0.665804	0.000026	0.203048
Pd	Pd54	0.665608	0.249762	0.203019
Pd	Pd55	0.665651	0.499794	0.202779
Pd	Pd56	0.665428	0.750318	0.202919
Pd	Pd57	0.331667	0.125771	0.236373
Pd	Pd58	0.331336	0.375566	0.236314
Pd	Pd59	0.331003	0.625256	0.236185
Pd	Pd60	0.331344	0.875255	0.236319
Pd	Pd61	0.830633	0.125015	0.236445

Pd	Pd62	0.830799	0.374951	0.236169
Pd	Pd63	0.831617	0.625034	0.235681
Pd	Pd64	0.830600	0.875070	0.236324
Pd	Pd65	0.999008	0.000249	0.268361
Pd	Pd66	0.999114	0.250302	0.268452
Pd	Pd67	0.999553	0.500150	0.268539
Pd	Pd68	0.999318	0.750279	0.268485
Pd	Pd69	0.499748	0.000029	0.268817
Pd	Pd70	0.499773	0.251485	0.269533
Pd	Pd71	0.499755	0.500898	0.269676
Pd	Pd72	0.499120	0.748687	0.270187
Pd	Pd73	0.165297	0.125420	0.307560
Pd	Pd74	0.165183	0.375168	0.307654
Pd	Pd75	0.165333	0.626089	0.307683
Pd	Pd76	0.165036	0.876344	0.307497
Pd	Pd77	0.665926	0.124702	0.308441
Pd	Pd78	0.666366	0.374442	0.307743
Pd	Pd79	0.667953	0.625429	0.306347
Pd	Pd80	0.665996	0.875438	0.308241
Pd	Pd81	0.830889	0.749926	0.338531
Pd	Pd82	0.330771	0.001318	0.338461
Pd	Pd83	0.330657	0.251644	0.338543
Pd	Pd84	0.329442	0.500709	0.337998
Pd	Pd85	0.329979	0.751156	0.338299
Pd	Pd86	0.830964	0.000005	0.338710
Pd	Pd87	0.830817	0.250002	0.338676
Pd	Pd88	0.830686	0.499915	0.338515
Pd	Pd89	0.997840	0.125093	0.368403
Pd	Pd90	0.997420	0.375139	0.368519
Pd	Pd91	0.997666	0.625098	0.368492
Pd	Pd92	0.997636	0.875119	0.368447
Pd	Pd93	0.497713	0.127412	0.368664
Pd	Pd94	0.499118	0.377968	0.371555
Pd	Pd95	0.500852	0.628859	0.370730
Pd	Pd96	0.497527	0.877408	0.369038
C	C97	0.536938	0.502473	0.433540
O	O98	0.633177	0.492227	0.450705
H	H99	0.488560	0.476469	0.469354
H	H100	0.677963	0.513273	0.418759
H	H101	0.505944	0.639755	0.438872

Transition state of R20 $\text{CH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000

Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165938	0.999861	0.202991
Pd	Pd50	0.166014	0.249685	0.202991
Pd	Pd51	0.165845	0.499851	0.202953
Pd	Pd52	0.165938	0.749877	0.202983
Pd	Pd53	0.665904	0.999837	0.202955
Pd	Pd54	0.665764	0.249554	0.202637
Pd	Pd55	0.665440	0.500184	0.202974
Pd	Pd56	0.665644	0.750117	0.203084
Pd	Pd57	0.331063	0.124654	0.236277
Pd	Pd58	0.331039	0.375058	0.235913
Pd	Pd59	0.331214	0.624692	0.235909
Pd	Pd60	0.331152	0.874417	0.236262
Pd	Pd61	0.830681	0.125161	0.236365
Pd	Pd62	0.830849	0.374944	0.236183
Pd	Pd63	0.830913	0.624817	0.236095

Pd	Pd64	0.830868	0.875006	0.236267
Pd	Pd65	0.999069	0.000123	0.268343
Pd	Pd66	0.999155	0.249868	0.268464
Pd	Pd67	0.999333	0.499967	0.268560
Pd	Pd68	0.999579	0.749803	0.268507
Pd	Pd69	0.499613	0.999640	0.268297
Pd	Pd70	0.499245	0.250391	0.268783
Pd	Pd71	0.499350	0.499951	0.270022
Pd	Pd72	0.499512	0.749056	0.269512
Pd	Pd73	0.165895	0.124671	0.308073
Pd	Pd74	0.165079	0.374345	0.307762
Pd	Pd75	0.166061	0.624797	0.308047
Pd	Pd76	0.165294	0.874998	0.307750
Pd	Pd77	0.665788	0.124847	0.308256
Pd	Pd78	0.666045	0.373403	0.306624
Pd	Pd79	0.666338	0.625397	0.307652
Pd	Pd80	0.666083	0.876030	0.308342
Pd	Pd81	0.831393	0.750114	0.338323
Pd	Pd82	0.330550	0.998918	0.338327
Pd	Pd83	0.331353	0.250501	0.337823
Pd	Pd84	0.331169	0.499812	0.337604
Pd	Pd85	0.332178	0.747641	0.338000
Pd	Pd86	0.830939	0.000254	0.338567
Pd	Pd87	0.830460	0.250111	0.338943
Pd	Pd88	0.830739	0.499591	0.338845
Pd	Pd89	0.997826	0.125028	0.368372
Pd	Pd90	0.997276	0.374838	0.368546
Pd	Pd91	0.997618	0.624784	0.368460
Pd	Pd92	0.997859	0.875256	0.368451
Pd	Pd93	0.497412	0.123279	0.368397
Pd	Pd94	0.497842	0.370173	0.370650
Pd	Pd95	0.497680	0.627362	0.374597
Pd	Pd96	0.497360	0.876260	0.368699
C	C97	0.602424	0.574646	0.441797
O	O98	0.619044	0.448407	0.440849
H	H99	0.539806	0.594172	0.470545
H	H100	0.668504	0.627162	0.454013
H	H101	0.678561	0.431496	0.417150
H	H102	0.623356	0.621723	0.381908

Transition state of R21 $\text{CCO}^* + \text{H}^* = \text{CHCO}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000

Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166027	0.000001	0.202747
Pd	Pd50	0.165923	0.249872	0.202789
Pd	Pd51	0.165060	0.500004	0.202957
Pd	Pd52	0.165919	0.750129	0.202791
Pd	Pd53	0.666421	0.999999	0.202873
Pd	Pd54	0.665772	0.250250	0.203285
Pd	Pd55	0.665898	0.500002	0.202504
Pd	Pd56	0.665772	0.749745	0.203287
Pd	Pd57	0.330978	0.125033	0.236178
Pd	Pd58	0.330599	0.375261	0.235991
Pd	Pd59	0.330597	0.624742	0.235994
Pd	Pd60	0.330975	0.874963	0.236178
Pd	Pd61	0.831387	0.125387	0.236249
Pd	Pd62	0.831898	0.375761	0.236843
Pd	Pd63	0.831893	0.624240	0.236846
Pd	Pd64	0.831386	0.874612	0.236250

Pd	Pd65	0.000183	0.999996	0.268436
Pd	Pd66	0.000272	0.249889	0.268627
Pd	Pd67	0.997258	0.500004	0.270567
Pd	Pd68	0.000272	0.750106	0.268627
Pd	Pd69	0.499608	0.999995	0.268365
Pd	Pd70	0.498766	0.250047	0.269000
Pd	Pd71	0.498599	0.499998	0.268967
Pd	Pd72	0.498768	0.749948	0.268997
Pd	Pd73	0.166242	0.124370	0.307599
Pd	Pd74	0.166456	0.374795	0.307437
Pd	Pd75	0.166449	0.625215	0.307445
Pd	Pd76	0.166245	0.875633	0.307600
Pd	Pd77	0.666805	0.123407	0.307951
Pd	Pd78	0.666583	0.370274	0.306919
Pd	Pd79	0.666585	0.629728	0.306919
Pd	Pd80	0.666805	0.876584	0.307951
Pd	Pd81	0.834275	0.752744	0.338684
Pd	Pd82	0.331748	0.000000	0.338438
Pd	Pd83	0.332219	0.251042	0.338052
Pd	Pd84	0.331478	0.500003	0.338265
Pd	Pd85	0.332223	0.748961	0.338055
Pd	Pd86	0.832853	0.999999	0.338035
Pd	Pd87	0.834279	0.247257	0.338679
Pd	Pd88	0.833044	0.499996	0.347285
Pd	Pd89	0.000808	0.123953	0.368875
Pd	Pd90	0.002560	0.373100	0.369528
Pd	Pd91	0.002553	0.626897	0.369531
Pd	Pd92	0.000811	0.876037	0.368876
Pd	Pd93	0.498992	0.124396	0.368580
Pd	Pd94	0.500719	0.375446	0.371873
Pd	Pd95	0.500719	0.624548	0.371870
Pd	Pd96	0.498998	0.875595	0.368582
C	C97	0.684733	0.499978	0.365059
C	C98	0.604779	0.499997	0.407940
O	O99	0.605889	0.500002	0.460242
H	H100	0.784230	0.499993	0.408624

Transition state of R22 $\text{CHCO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000

Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165728	0.000135	0.202715
Pd	Pd50	0.166031	0.249973	0.202685
Pd	Pd51	0.166030	0.500055	0.202535
Pd	Pd52	0.165843	0.750363	0.202733
Pd	Pd53	0.665905	0.999884	0.202766
Pd	Pd54	0.665554	0.251336	0.204381
Pd	Pd55	0.665486	0.500180	0.203725
Pd	Pd56	0.665362	0.749115	0.203524
Pd	Pd57	0.330826	0.125043	0.236067
Pd	Pd58	0.331251	0.375125	0.235972
Pd	Pd59	0.331009	0.624812	0.235893
Pd	Pd60	0.330890	0.875023	0.235999
Pd	Pd61	0.830692	0.124594	0.236327
Pd	Pd62	0.831719	0.374774	0.236286
Pd	Pd63	0.830410	0.624707	0.236577
Pd	Pd64	0.830623	0.874461	0.236304
Pd	Pd65	0.998794	0.999722	0.268357
Pd	Pd66	0.999782	0.249568	0.268475
Pd	Pd67	0.999816	0.500039	0.268574

Pd	Pd68	0.999323	0.749839	0.268386
Pd	Pd69	0.499153	0.999198	0.268307
Pd	Pd70	0.499264	0.249097	0.269127
Pd	Pd71	0.499215	0.499915	0.269300
Pd	Pd72	0.499394	0.749327	0.269126
Pd	Pd73	0.165056	0.124513	0.307320
Pd	Pd74	0.166411	0.374539	0.306977
Pd	Pd75	0.165444	0.625791	0.306855
Pd	Pd76	0.164517	0.876283	0.307288
Pd	Pd77	0.666234	0.120437	0.308259
Pd	Pd78	0.666410	0.370737	0.309356
Pd	Pd79	0.666684	0.626276	0.311484
Pd	Pd80	0.666416	0.874039	0.308155
Pd	Pd81	0.833444	0.749751	0.338801
Pd	Pd82	0.330266	0.000295	0.338161
Pd	Pd83	0.331682	0.250981	0.337772
Pd	Pd84	0.329073	0.500390	0.338175
Pd	Pd85	0.329854	0.750297	0.337431
Pd	Pd86	0.832036	0.998543	0.338521
Pd	Pd87	0.834232	0.246465	0.339160
Pd	Pd88	0.836518	0.497801	0.339780
Pd	Pd89	0.999977	0.122941	0.368905
Pd	Pd90	0.002403	0.373058	0.368725
Pd	Pd91	0.000873	0.624975	0.368895
Pd	Pd92	0.999256	0.874504	0.368813
Pd	Pd93	0.497589	0.123166	0.368700
Pd	Pd94	0.495296	0.373429	0.371129
Pd	Pd95	0.494478	0.625580	0.371061
Pd	Pd96	0.497125	0.876756	0.368540
C	C97	0.635107	0.435149	0.393373
C	C98	0.634200	0.570025	0.398125
O	O99	0.662766	0.634699	0.437582
H	H100	0.651122	0.388890	0.434072
H	H101	0.735590	0.410566	0.372614

Transition state of R23 $\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723

Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166009	0.000329	0.202936
Pd	Pd50	0.165917	0.250002	0.202932
Pd	Pd51	0.165954	0.500016	0.202854
Pd	Pd52	0.166003	0.750264	0.202873
Pd	Pd53	0.665491	0.000048	0.203209
Pd	Pd54	0.665208	0.249759	0.203237
Pd	Pd55	0.665472	0.499767	0.202877
Pd	Pd56	0.665455	0.750370	0.202935
Pd	Pd57	0.331680	0.125571	0.236470
Pd	Pd58	0.331309	0.375089	0.236057
Pd	Pd59	0.331199	0.625083	0.235907
Pd	Pd60	0.331310	0.875333	0.236119
Pd	Pd61	0.830321	0.124968	0.236379
Pd	Pd62	0.830584	0.374817	0.236009
Pd	Pd63	0.831841	0.625014	0.235406
Pd	Pd64	0.830316	0.875185	0.236273
Pd	Pd65	0.998756	0.000123	0.268395
Pd	Pd66	0.998915	0.250139	0.268425
Pd	Pd67	0.999467	0.499977	0.268499
Pd	Pd68	0.999212	0.750276	0.268419
Pd	Pd69	0.499590	0.999645	0.269202

Pd	Pd70	0.499393	0.251908	0.270236
Pd	Pd71	0.499990	0.500701	0.270033
Pd	Pd72	0.499650	0.749229	0.269855
Pd	Pd73	0.165013	0.125353	0.307623
Pd	Pd74	0.165225	0.374751	0.307658
Pd	Pd75	0.165281	0.625408	0.307489
Pd	Pd76	0.164911	0.875991	0.307506
Pd	Pd77	0.665550	0.124755	0.308631
Pd	Pd78	0.665722	0.374622	0.307989
Pd	Pd79	0.668017	0.625144	0.305966
Pd	Pd80	0.665226	0.875409	0.308756
Pd	Pd81	0.830822	0.750058	0.338170
Pd	Pd82	0.330299	0.000871	0.338401
Pd	Pd83	0.330564	0.251234	0.338732
Pd	Pd84	0.330357	0.499696	0.337049
Pd	Pd85	0.329394	0.750576	0.337527
Pd	Pd86	0.830617	0.999884	0.338706
Pd	Pd87	0.830606	0.249987	0.338447
Pd	Pd88	0.830717	0.499916	0.338039
Pd	Pd89	0.997515	0.125013	0.368432
Pd	Pd90	0.997502	0.374938	0.368484
Pd	Pd91	0.997902	0.625089	0.368363
Pd	Pd92	0.997462	0.875099	0.368461
Pd	Pd93	0.497115	0.125504	0.368917
Pd	Pd94	0.497832	0.377222	0.374038
Pd	Pd95	0.502338	0.628092	0.370438
Pd	Pd96	0.495822	0.876396	0.370768
C	C97	0.473308	0.585737	0.458817
C	C98	0.536706	0.482861	0.440442
O	O99	0.615644	0.448099	0.460133
H	H100	0.393653	0.566988	0.461201
H	H101	0.503503	0.631959	0.496332
H	H102	0.478356	0.712760	0.426055

Transition state of R24 CCOH* + H* = CHCOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723

Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166433	0.999998	0.202765
Pd	Pd50	0.166229	0.249862	0.202818
Pd	Pd51	0.165093	0.499998	0.203001
Pd	Pd52	0.166237	0.750133	0.202817
Pd	Pd53	0.666503	0.999998	0.202770
Pd	Pd54	0.665904	0.250183	0.203277
Pd	Pd55	0.666036	0.500000	0.202508
Pd	Pd56	0.665912	0.749821	0.203274
Pd	Pd57	0.331468	0.125108	0.236404
Pd	Pd58	0.330936	0.375394	0.236186
Pd	Pd59	0.330941	0.624593	0.236190
Pd	Pd60	0.331470	0.874885	0.236403
Pd	Pd61	0.831708	0.125317	0.236274
Pd	Pd62	0.831979	0.375709	0.236999
Pd	Pd63	0.831976	0.624282	0.237000
Pd	Pd64	0.831712	0.874677	0.236278
Pd	Pd65	0.000508	0.999998	0.268367
Pd	Pd66	0.000632	0.249987	0.268641
Pd	Pd67	0.997127	0.499996	0.270707
Pd	Pd68	0.000639	0.750002	0.268643
Pd	Pd69	0.500179	0.000003	0.268508
Pd	Pd70	0.499259	0.249599	0.269114

Pd	Pd71	0.498803	0.499985	0.269174
Pd	Pd72	0.499255	0.750406	0.269107
Pd	Pd73	0.166944	0.124341	0.307566
Pd	Pd74	0.166866	0.374746	0.307440
Pd	Pd75	0.166875	0.625262	0.307446
Pd	Pd76	0.166956	0.875657	0.307565
Pd	Pd77	0.667614	0.123189	0.307918
Pd	Pd78	0.666746	0.370105	0.306828
Pd	Pd79	0.666734	0.629907	0.306818
Pd	Pd80	0.667611	0.876813	0.307923
Pd	Pd81	0.834785	0.752653	0.338757
Pd	Pd82	0.332745	0.999998	0.338698
Pd	Pd83	0.333582	0.251794	0.338327
Pd	Pd84	0.331237	0.499984	0.339013
Pd	Pd85	0.333594	0.748199	0.338331
Pd	Pd86	0.833650	0.999995	0.338112
Pd	Pd87	0.834784	0.247331	0.338761
Pd	Pd88	0.832678	0.499994	0.348160
Pd	Pd89	0.001513	0.124024	0.368790
Pd	Pd90	0.002923	0.373176	0.369581
Pd	Pd91	0.002922	0.626801	0.369577
Pd	Pd92	0.001514	0.875956	0.368784
Pd	Pd93	0.500118	0.124848	0.368725
Pd	Pd94	0.500943	0.375585	0.372554
Pd	Pd95	0.500926	0.624430	0.372542
Pd	Pd96	0.500125	0.875144	0.368729
C	C97	0.684938	0.500017	0.365669
C	C98	0.602124	0.500025	0.404489
O	O99	0.622355	0.499989	0.461429
H	H100	0.559624	0.499997	0.482321
H	H101	0.783792	0.500029	0.409668

Transition state of R25 $\text{CHCOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + ^*$ on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723

Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165777	0.000146	0.202726
Pd	Pd50	0.166035	0.249899	0.202698
Pd	Pd51	0.165935	0.500072	0.202622
Pd	Pd52	0.166089	0.750358	0.202739
Pd	Pd53	0.665878	0.999757	0.202944
Pd	Pd54	0.665490	0.251187	0.204391
Pd	Pd55	0.665725	0.500188	0.203578
Pd	Pd56	0.665563	0.749067	0.203841
Pd	Pd57	0.330879	0.125123	0.236148
Pd	Pd58	0.331077	0.375178	0.236020
Pd	Pd59	0.331222	0.624795	0.236007
Pd	Pd60	0.330942	0.875102	0.236139
Pd	Pd61	0.830668	0.124593	0.236452
Pd	Pd62	0.831591	0.374717	0.236341
Pd	Pd63	0.830940	0.624632	0.236543
Pd	Pd64	0.830633	0.874724	0.236381
Pd	Pd65	0.998831	0.999878	0.268344
Pd	Pd66	0.999769	0.249566	0.268457
Pd	Pd67	0.999640	0.499974	0.268656
Pd	Pd68	0.999832	0.749980	0.268325
Pd	Pd69	0.499377	0.999696	0.268413
Pd	Pd70	0.499369	0.249202	0.269335
Pd	Pd71	0.499284	0.499374	0.269046
Pd	Pd72	0.499743	0.750333	0.268974

Pd	Pd73	0.165248	0.124494	0.307435
Pd	Pd74	0.166013	0.374199	0.306933
Pd	Pd75	0.165590	0.625798	0.306862
Pd	Pd76	0.164832	0.876499	0.307272
Pd	Pd77	0.666501	0.120835	0.308503
Pd	Pd78	0.666576	0.370483	0.309379
Pd	Pd79	0.667616	0.626405	0.311163
Pd	Pd80	0.666585	0.874876	0.308992
Pd	Pd81	0.834626	0.750356	0.338526
Pd	Pd82	0.330513	0.000524	0.338280
Pd	Pd83	0.332131	0.251402	0.337844
Pd	Pd84	0.328634	0.500056	0.338391
Pd	Pd85	0.330361	0.749912	0.337618
Pd	Pd86	0.832265	0.998576	0.338787
Pd	Pd87	0.834402	0.246375	0.339225
Pd	Pd88	0.836279	0.497767	0.340065
Pd	Pd89	0.000198	0.123011	0.368960
Pd	Pd90	0.002155	0.372986	0.368802
Pd	Pd91	0.001025	0.625005	0.368885
Pd	Pd92	0.000011	0.874768	0.368874
Pd	Pd93	0.497871	0.123304	0.368962
Pd	Pd94	0.496034	0.374260	0.371542
Pd	Pd95	0.493683	0.626083	0.370294
Pd	Pd96	0.497029	0.876626	0.368760
C	C97	0.635721	0.440176	0.394188
C	C98	0.632854	0.572457	0.392023
O	O99	0.672505	0.632711	0.437326
H	H100	0.650910	0.398814	0.436022
H	H101	0.667890	0.720442	0.429532
H	H102	0.733283	0.409349	0.373406

Transition state of R26 $\text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + *$ on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723

Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166483	0.999836	0.203149
Pd	Pd50	0.166376	0.250005	0.203098
Pd	Pd51	0.165990	0.499778	0.202537
Pd	Pd52	0.166080	0.750630	0.202555
Pd	Pd53	0.665750	0.000172	0.203030
Pd	Pd54	0.665515	0.249978	0.203130
Pd	Pd55	0.665589	0.499879	0.202855
Pd	Pd56	0.665392	0.750239	0.202915
Pd	Pd57	0.331287	0.125065	0.236383
Pd	Pd58	0.330873	0.377015	0.237503
Pd	Pd59	0.330914	0.625451	0.237148
Pd	Pd60	0.331156	0.872901	0.237951
Pd	Pd61	0.830356	0.125067	0.236293
Pd	Pd62	0.830293	0.374721	0.236091
Pd	Pd63	0.831001	0.625075	0.235555
Pd	Pd64	0.830345	0.875347	0.236097
Pd	Pd65	0.999019	0.000315	0.268438
Pd	Pd66	0.998895	0.249604	0.268421
Pd	Pd67	0.998108	0.499232	0.268153
Pd	Pd68	0.998168	0.750871	0.268147
Pd	Pd69	0.499402	0.000354	0.268417
Pd	Pd70	0.499372	0.250994	0.268990
Pd	Pd71	0.499176	0.499797	0.269408
Pd	Pd72	0.499169	0.749095	0.270271
Pd	Pd73	0.165446	0.124647	0.308205

Pd	Pd74	0.164187	0.374375	0.307688
Pd	Pd75	0.161448	0.625485	0.304943
Pd	Pd76	0.164733	0.875444	0.308096
Pd	Pd77	0.665573	0.125109	0.308439
Pd	Pd78	0.665198	0.374691	0.308155
Pd	Pd79	0.665960	0.625556	0.306520
Pd	Pd80	0.665578	0.875743	0.307953
Pd	Pd81	0.829757	0.750184	0.338169
Pd	Pd82	0.330398	0.999107	0.338476
Pd	Pd83	0.330078	0.251455	0.338035
Pd	Pd84	0.325627	0.502557	0.342109
Pd	Pd85	0.327302	0.748111	0.343916
Pd	Pd86	0.830573	0.000002	0.338492
Pd	Pd87	0.830380	0.250309	0.338466
Pd	Pd88	0.829512	0.500189	0.338047
Pd	Pd89	0.997127	0.125204	0.368535
Pd	Pd90	0.996985	0.375530	0.368494
Pd	Pd91	0.996630	0.625128	0.367891
Pd	Pd92	0.997168	0.874605	0.368534
Pd	Pd93	0.497225	0.126203	0.368363
Pd	Pd94	0.496983	0.373588	0.370536
Pd	Pd95	0.504004	0.624668	0.371662
Pd	Pd96	0.497708	0.878714	0.368476
C	C97	0.402096	0.609964	0.443719
C	C98	0.311544	0.624713	0.407701
O	O99	0.226311	0.624391	0.437908
H	H100	0.391066	0.540178	0.476679
H	H101	0.429133	0.694551	0.463570
H	H102	0.168722	0.630178	0.410986
H	H103	0.476892	0.515937	0.419081

Transition state of R27 CCHO* + H* = CHCHO* + * on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723

Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165730	0.000589	0.202904
Pd	Pd50	0.165991	0.250098	0.202797
Pd	Pd51	0.165685	0.500267	0.202601
Pd	Pd52	0.165379	0.750440	0.202759
Pd	Pd53	0.666350	0.000308	0.202752
Pd	Pd54	0.666314	0.250070	0.203222
Pd	Pd55	0.665919	0.499077	0.202818
Pd	Pd56	0.665513	0.749804	0.202734
Pd	Pd57	0.330907	0.125537	0.236081
Pd	Pd58	0.330977	0.375495	0.236076
Pd	Pd59	0.330797	0.625483	0.235510
Pd	Pd60	0.330071	0.875591	0.235999
Pd	Pd61	0.831441	0.124270	0.236480
Pd	Pd62	0.831483	0.374979	0.237006
Pd	Pd63	0.831856	0.624273	0.236492
Pd	Pd64	0.830651	0.873112	0.237446
Pd	Pd65	0.999471	0.999255	0.268485
Pd	Pd66	0.000401	0.249079	0.268556
Pd	Pd67	0.000460	0.498911	0.269696
Pd	Pd68	0.998597	0.748946	0.269476
Pd	Pd69	0.498991	0.001064	0.268148
Pd	Pd70	0.499929	0.250681	0.268366
Pd	Pd71	0.498279	0.500930	0.269290
Pd	Pd72	0.497336	0.750706	0.268918
Pd	Pd73	0.166516	0.125101	0.307985

Pd	Pd74	0.167492	0.374907	0.307315
Pd	Pd75	0.168004	0.625368	0.306866
Pd	Pd76	0.165120	0.875608	0.307793
Pd	Pd77	0.666675	0.125531	0.308414
Pd	Pd78	0.666458	0.373787	0.308975
Pd	Pd79	0.661716	0.627008	0.305361
Pd	Pd80	0.664759	0.877799	0.306898
Pd	Pd81	0.829345	0.746969	0.344038
Pd	Pd82	0.330420	0.000498	0.338250
Pd	Pd83	0.331183	0.250585	0.338248
Pd	Pd84	0.332401	0.502147	0.337967
Pd	Pd85	0.331152	0.750477	0.337899
Pd	Pd86	0.831132	0.998061	0.338632
Pd	Pd87	0.834000	0.247091	0.338589
Pd	Pd88	0.840902	0.495726	0.343051
Pd	Pd89	0.999999	0.121640	0.368492
Pd	Pd90	0.004924	0.369585	0.369874
Pd	Pd91	0.007016	0.624925	0.369875
Pd	Pd92	0.997765	0.873692	0.369024
Pd	Pd93	0.497987	0.125902	0.368377
Pd	Pd94	0.496644	0.374348	0.368712
Pd	Pd95	0.497606	0.625009	0.373411
Pd	Pd96	0.496762	0.877892	0.367921
C	C97	0.739511	0.614463	0.377375
C	C98	0.697319	0.645989	0.432270
O	O99	0.605284	0.654332	0.441438
H	H100	0.748859	0.662520	0.468047
H	H101	0.720409	0.496008	0.373473

Transition state of R28 CHCHO* + H* = CH₂CHO* + * on Pd(211)

data

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165799	0.999432	0.202849
Pd	Pd50	0.166076	0.249526	0.202702
Pd	Pd51	0.166082	0.499824	0.202597
Pd	Pd52	0.165930	0.750131	0.202820
Pd	Pd53	0.665885	0.000520	0.202599
Pd	Pd54	0.665388	0.251582	0.204444
Pd	Pd55	0.665195	0.499023	0.204102
Pd	Pd56	0.665775	0.750055	0.202551
Pd	Pd57	0.331025	0.124730	0.235980
Pd	Pd58	0.331533	0.374692	0.235713
Pd	Pd59	0.331077	0.624677	0.235639
Pd	Pd60	0.331079	0.874617	0.236316
Pd	Pd61	0.830718	0.125228	0.236180
Pd	Pd62	0.830829	0.375506	0.236834
Pd	Pd63	0.830965	0.624932	0.236215
Pd	Pd64	0.830897	0.874888	0.236093
Pd	Pd65	0.999125	0.999594	0.268309
Pd	Pd66	0.999600	0.249658	0.268356
Pd	Pd67	0.999455	0.500027	0.268596
Pd	Pd68	0.999509	0.749987	0.268437
Pd	Pd69	0.499233	0.000213	0.268112
Pd	Pd70	0.499943	0.250832	0.269881
Pd	Pd71	0.499311	0.499730	0.270191
Pd	Pd72	0.498986	0.749203	0.268915
Pd	Pd73	0.164895	0.123268	0.307343
Pd	Pd74	0.165854	0.374284	0.306952
Pd	Pd75	0.165565	0.625324	0.307215

Pd	Pd76	0.165930	0.874140	0.307970
Pd	Pd77	0.665798	0.122260	0.307714
Pd	Pd78	0.664732	0.375679	0.313791
Pd	Pd79	0.666548	0.628744	0.306195
Pd	Pd80	0.666487	0.875583	0.307747
Pd	Pd81	0.831914	0.750652	0.338507
Pd	Pd82	0.330083	0.999055	0.338234
Pd	Pd83	0.329437	0.249740	0.337300
Pd	Pd84	0.329883	0.499853	0.336966
Pd	Pd85	0.332436	0.747556	0.337985
Pd	Pd86	0.831712	0.000017	0.338309
Pd	Pd87	0.833901	0.248430	0.338578
Pd	Pd88	0.834061	0.501595	0.340543
Pd	Pd89	0.999272	0.123991	0.368697
Pd	Pd90	0.000922	0.374579	0.368408
Pd	Pd91	0.000119	0.625895	0.368797
Pd	Pd92	0.998571	0.875158	0.368495
Pd	Pd93	0.495523	0.122853	0.368492
Pd	Pd94	0.488482	0.370771	0.375112
Pd	Pd95	0.499372	0.627826	0.371461
Pd	Pd96	0.497967	0.876221	0.367919
C	C97	0.637433	0.368302	0.400602
C	C98	0.608805	0.460122	0.440943
O	O99	0.600202	0.575777	0.434166
H	H100	0.659794	0.281601	0.419805
H	H101	0.597711	0.426068	0.484876
H	H102	0.742977	0.416437	0.374087

Transition state of R29 $\text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165952	0.999838	0.202831
Pd	Pd50	0.165997	0.249782	0.202829
Pd	Pd51	0.165935	0.499882	0.202816
Pd	Pd52	0.165974	0.749836	0.202836
Pd	Pd53	0.665942	0.000120	0.202922
Pd	Pd54	0.665246	0.250144	0.203017
Pd	Pd55	0.665447	0.500348	0.203170
Pd	Pd56	0.665435	0.750121	0.203309
Pd	Pd57	0.331268	0.124874	0.236102
Pd	Pd58	0.331398	0.375065	0.236059
Pd	Pd59	0.331316	0.624714	0.235917
Pd	Pd60	0.331288	0.874459	0.236152
Pd	Pd61	0.830530	0.125202	0.236253
Pd	Pd62	0.830706	0.375015	0.236060
Pd	Pd63	0.831345	0.625031	0.235866
Pd	Pd64	0.830769	0.875109	0.236244
Pd	Pd65	0.999043	0.000140	0.268345
Pd	Pd66	0.999007	0.249942	0.268360
Pd	Pd67	0.999707	0.500073	0.268452
Pd	Pd68	0.999652	0.749932	0.268434
Pd	Pd69	0.499611	0.999945	0.268117
Pd	Pd70	0.499157	0.251936	0.270000
Pd	Pd71	0.500120	0.500794	0.269867
Pd	Pd72	0.499473	0.748796	0.270032
Pd	Pd73	0.165173	0.124500	0.307489
Pd	Pd74	0.165231	0.374743	0.307391
Pd	Pd75	0.166565	0.624634	0.307776
Pd	Pd76	0.165080	0.874637	0.307473

Pd	Pd77	0.665948	0.125350	0.308134
Pd	Pd78	0.666423	0.375245	0.307765
Pd	Pd79	0.667739	0.626029	0.308121
Pd	Pd80	0.666162	0.876162	0.308339
Pd	Pd81	0.832060	0.750800	0.338356
Pd	Pd82	0.329473	0.999068	0.338133
Pd	Pd83	0.329185	0.248780	0.337967
Pd	Pd84	0.332382	0.499800	0.337412
Pd	Pd85	0.331547	0.748495	0.337848
Pd	Pd86	0.831137	0.000522	0.338536
Pd	Pd87	0.830909	0.250271	0.338552
Pd	Pd88	0.832003	0.500050	0.338268
Pd	Pd89	0.998055	0.125271	0.368361
Pd	Pd90	0.998146	0.374827	0.368457
Pd	Pd91	0.998739	0.625241	0.368346
Pd	Pd92	0.998353	0.875601	0.368461
Pd	Pd93	0.497140	0.121337	0.368356
Pd	Pd94	0.498790	0.366213	0.369880
Pd	Pd95	0.498437	0.629674	0.374251
Pd	Pd96	0.496662	0.877820	0.368450
C	C97	0.601641	0.589544	0.445978
C	C98	0.505311	0.537996	0.460081
O	O99	0.482700	0.423873	0.453628
H	H100	0.622453	0.673558	0.467787
H	H101	0.661584	0.522841	0.441163
H	H102	0.453818	0.592546	0.486357
H	H103	0.625314	0.626085	0.383775

Transition state of R30 CCH₂O* + H* = CHCH₂O* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165787	0.000001	0.202438
Pd	Pd50	0.165918	0.249656	0.202418
Pd	Pd51	0.165920	0.499999	0.202236
Pd	Pd52	0.165918	0.750340	0.202418
Pd	Pd53	0.666148	1.000000	0.203015
Pd	Pd54	0.665581	0.251500	0.204252
Pd	Pd55	0.665249	0.500002	0.204064
Pd	Pd56	0.665584	0.748501	0.204251
Pd	Pd57	0.331095	0.124834	0.235784
Pd	Pd58	0.331264	0.375121	0.235604
Pd	Pd59	0.331260	0.624878	0.235603
Pd	Pd60	0.331096	0.875169	0.235784
Pd	Pd61	0.830877	0.125315	0.236271
Pd	Pd62	0.830712	0.375104	0.236614
Pd	Pd63	0.830713	0.624890	0.236613
Pd	Pd64	0.830880	0.874685	0.236271
Pd	Pd65	0.999380	0.999994	0.268327
Pd	Pd66	0.999812	0.249875	0.268474
Pd	Pd67	0.998939	0.499999	0.269513
Pd	Pd68	0.999807	0.750119	0.268473
Pd	Pd69	0.499711	0.000001	0.268331
Pd	Pd70	0.499225	0.250761	0.269558
Pd	Pd71	0.499139	0.500004	0.269673
Pd	Pd72	0.499229	0.749244	0.269557
Pd	Pd73	0.165645	0.123994	0.306932
Pd	Pd74	0.166397	0.374193	0.306031
Pd	Pd75	0.166399	0.625804	0.306031
Pd	Pd76	0.165645	0.875998	0.306932

Pd	Pd77	0.666603	0.125040	0.308169
Pd	Pd78	0.665879	0.374336	0.313437
Pd	Pd79	0.665884	0.625654	0.313438
Pd	Pd80	0.666605	0.874963	0.308169
Pd	Pd81	0.834881	0.753125	0.338753
Pd	Pd82	0.330278	0.999997	0.338234
Pd	Pd83	0.329809	0.248509	0.337108
Pd	Pd84	0.328382	0.500001	0.337660
Pd	Pd85	0.329813	0.751489	0.337109
Pd	Pd86	0.832403	0.999999	0.338114
Pd	Pd87	0.834881	0.246872	0.338753
Pd	Pd88	0.842126	0.499997	0.341188
Pd	Pd89	0.001163	0.123585	0.368803
Pd	Pd90	0.005822	0.371973	0.369451
Pd	Pd91	0.005823	0.628028	0.369451
Pd	Pd92	0.001160	0.876405	0.368803
Pd	Pd93	0.497828	0.122505	0.368655
Pd	Pd94	0.490726	0.366931	0.370670
Pd	Pd95	0.490731	0.633069	0.370669
Pd	Pd96	0.497832	0.877498	0.368659
C	C97	0.701536	0.500000	0.372449
C	C98	0.650069	0.500004	0.430119
O	O99	0.544725	0.500000	0.426367
H	H100	0.674197	0.418344	0.454094
H	H101	0.674197	0.581644	0.454092
H	H102	0.796930	0.499998	0.404058

Transition state of R31 $\text{CHCH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165639	0.999717	0.202740
Pd	Pd50	0.165910	0.249989	0.202709
Pd	Pd51	0.166268	0.499985	0.202618
Pd	Pd52	0.166046	0.749957	0.202765
Pd	Pd53	0.665743	0.999903	0.202490
Pd	Pd54	0.665300	0.251059	0.203664
Pd	Pd55	0.665554	0.499500	0.204598
Pd	Pd56	0.665899	0.748301	0.204567
Pd	Pd57	0.330316	0.124973	0.236004
Pd	Pd58	0.331429	0.375289	0.236077
Pd	Pd59	0.331414	0.624853	0.235975
Pd	Pd60	0.330763	0.874755	0.236131
Pd	Pd61	0.830129	0.125818	0.236739
Pd	Pd62	0.831079	0.374598	0.236295
Pd	Pd63	0.832291	0.625610	0.235549
Pd	Pd64	0.830552	0.876012	0.236226
Pd	Pd65	0.998443	0.000444	0.268274
Pd	Pd66	0.998246	0.250152	0.268642
Pd	Pd67	0.001159	0.500395	0.268179
Pd	Pd68	0.000008	0.750660	0.268338
Pd	Pd69	0.498804	0.000102	0.268202
Pd	Pd70	0.498909	0.249824	0.268728
Pd	Pd71	0.499602	0.501528	0.269971
Pd	Pd72	0.499351	0.750684	0.269052
Pd	Pd73	0.163650	0.124210	0.307127
Pd	Pd74	0.165615	0.374330	0.307045
Pd	Pd75	0.165453	0.625575	0.307264
Pd	Pd76	0.164867	0.875272	0.307460
Pd	Pd77	0.665552	0.122593	0.307485

Pd	Pd78	0.665695	0.375582	0.310498
Pd	Pd79	0.669619	0.629360	0.309781
Pd	Pd80	0.665632	0.877960	0.308449
Pd	Pd81	0.834022	0.752462	0.337957
Pd	Pd82	0.328785	0.000434	0.337928
Pd	Pd83	0.329173	0.249789	0.337871
Pd	Pd84	0.328624	0.499334	0.338123
Pd	Pd85	0.329878	0.748586	0.337855
Pd	Pd86	0.831328	0.001304	0.338930
Pd	Pd87	0.832006	0.251117	0.341577
Pd	Pd88	0.838356	0.502406	0.336750
Pd	Pd89	0.998487	0.125550	0.368871
Pd	Pd90	0.001321	0.375514	0.368655
Pd	Pd91	0.001235	0.627285	0.368967
Pd	Pd92	0.998682	0.876971	0.368657
Pd	Pd93	0.495492	0.123974	0.368099
Pd	Pd94	0.492857	0.373735	0.370679
Pd	Pd95	0.487289	0.628780	0.372214
Pd	Pd96	0.494947	0.876510	0.368316
C	C97	0.636386	0.384430	0.400004
C	C98	0.660202	0.504541	0.428736
O	O99	0.633690	0.611666	0.398463
H	H100	0.641151	0.307075	0.429815
H	H101	0.620576	0.506618	0.470016
H	H102	0.741197	0.510108	0.437943
H	H103	0.728528	0.340112	0.374966

Transition state of R32 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165989	0.999487	0.202922
Pd	Pd50	0.166202	0.249580	0.202738
Pd	Pd51	0.165830	0.499778	0.202802
Pd	Pd52	0.165921	0.749823	0.202733
Pd	Pd53	0.665913	0.000157	0.203040
Pd	Pd54	0.665272	0.249885	0.203270
Pd	Pd55	0.666305	0.499820	0.202360
Pd	Pd56	0.665674	0.750238	0.202840
Pd	Pd57	0.331262	0.124672	0.235870
Pd	Pd58	0.330730	0.376601	0.237560
Pd	Pd59	0.330900	0.625225	0.236718
Pd	Pd60	0.331224	0.873679	0.236549
Pd	Pd61	0.830447	0.124923	0.236296
Pd	Pd62	0.830685	0.374636	0.236014
Pd	Pd63	0.831120	0.625253	0.235850
Pd	Pd64	0.830615	0.875059	0.236216
Pd	Pd65	0.998775	0.999706	0.268464
Pd	Pd66	0.998434	0.249261	0.268308
Pd	Pd67	0.998527	0.499633	0.268384
Pd	Pd68	0.998705	0.750013	0.268405
Pd	Pd69	0.499573	0.000223	0.268488
Pd	Pd70	0.499267	0.251402	0.270542
Pd	Pd71	0.500236	0.499505	0.268299
Pd	Pd72	0.499449	0.748886	0.270181
Pd	Pd73	0.164667	0.123094	0.307587
Pd	Pd74	0.163077	0.372176	0.306925
Pd	Pd75	0.162696	0.624980	0.306702
Pd	Pd76	0.164914	0.874346	0.307637
Pd	Pd77	0.666043	0.124562	0.308402

Pd	Pd78	0.666363	0.374862	0.307717
Pd	Pd79	0.668073	0.625043	0.306673
Pd	Pd80	0.666178	0.875587	0.308023
Pd	Pd81	0.830839	0.750434	0.338575
Pd	Pd82	0.330100	0.997947	0.338061
Pd	Pd83	0.328798	0.246092	0.337615
Pd	Pd84	0.326602	0.497593	0.340029
Pd	Pd85	0.328320	0.750020	0.340729
Pd	Pd86	0.831026	0.000017	0.338727
Pd	Pd87	0.830541	0.249710	0.338667
Pd	Pd88	0.830403	0.499825	0.338207
Pd	Pd89	0.997671	0.125071	0.368602
Pd	Pd90	0.996985	0.374716	0.368461
Pd	Pd91	0.996744	0.624740	0.368567
Pd	Pd92	0.997787	0.874822	0.368571
Pd	Pd93	0.497375	0.123034	0.368663
Pd	Pd94	0.496190	0.370165	0.369404
Pd	Pd95	0.501781	0.629545	0.367005
Pd	Pd96	0.498101	0.876589	0.368688
C	C97	0.301810	0.504211	0.431926
C	C98	0.397884	0.521137	0.465031
O	O99	0.488347	0.503182	0.433944
H	H100	0.278606	0.408317	0.427892
H	H101	0.239438	0.555466	0.450222
H	H102	0.400902	0.613483	0.483363
H	H103	0.398278	0.455375	0.500733
H	H104	0.302100	0.613563	0.385648

Transition state of R33 CCHOH* + H* = CHCHOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165914	0.998600	0.202750
Pd	Pd50	0.165779	0.248631	0.202736
Pd	Pd51	0.165653	0.499295	0.202661
Pd	Pd52	0.166182	0.749199	0.202707
Pd	Pd53	0.666394	0.001122	0.202893
Pd	Pd54	0.665461	0.252025	0.204313
Pd	Pd55	0.665720	0.500445	0.202833
Pd	Pd56	0.666272	0.750362	0.203204
Pd	Pd57	0.330614	0.122376	0.235920
Pd	Pd58	0.330185	0.373815	0.235857
Pd	Pd59	0.331388	0.623545	0.235927
Pd	Pd60	0.331379	0.872477	0.236321
Pd	Pd61	0.830849	0.127302	0.236742
Pd	Pd62	0.831168	0.376737	0.237266
Pd	Pd63	0.832269	0.625525	0.236677
Pd	Pd64	0.831679	0.876269	0.236182
Pd	Pd65	0.999877	0.000773	0.268409
Pd	Pd66	0.999048	0.250681	0.268760
Pd	Pd67	0.998476	0.501273	0.269800
Pd	Pd68	0.001166	0.751055	0.268617
Pd	Pd69	0.499612	0.998106	0.268239
Pd	Pd70	0.497423	0.248125	0.268765
Pd	Pd71	0.498045	0.498531	0.269345
Pd	Pd72	0.500196	0.748506	0.269101
Pd	Pd73	0.165685	0.122230	0.307607
Pd	Pd74	0.165385	0.373481	0.306857
Pd	Pd75	0.167907	0.624110	0.307213
Pd	Pd76	0.167080	0.873492	0.307722

Pd	Pd77	0.665699	0.124513	0.308310
Pd	Pd78	0.661412	0.373309	0.309627
Pd	Pd79	0.668559	0.630432	0.306700
Pd	Pd80	0.667862	0.878013	0.307990
Pd	Pd81	0.835853	0.756229	0.338618
Pd	Pd82	0.331409	0.994999	0.338383
Pd	Pd83	0.328813	0.245864	0.337248
Pd	Pd84	0.330655	0.497507	0.338327
Pd	Pd85	0.335182	0.744349	0.338627
Pd	Pd86	0.832782	0.003524	0.338224
Pd	Pd87	0.831928	0.252348	0.340674
Pd	Pd88	0.836950	0.506138	0.345702
Pd	Pd89	0.999984	0.127274	0.368758
Pd	Pd90	0.003261	0.376607	0.369265
Pd	Pd91	0.004653	0.630282	0.369344
Pd	Pd92	0.001506	0.879380	0.369000
Pd	Pd93	0.496948	0.118961	0.368373
Pd	Pd94	0.490064	0.363609	0.370961
Pd	Pd95	0.504052	0.618681	0.372364
Pd	Pd96	0.500442	0.871485	0.368725
C	C97	0.689723	0.507374	0.368481
C	C98	0.627219	0.540927	0.416184
O	O99	0.596430	0.442117	0.450813
H	H100	0.651521	0.620797	0.440884
H	H101	0.558344	0.474298	0.482821
H	H102	0.741013	0.402808	0.375800

Transition state of R34 CHCHOH* + H* = CH₂CHOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166029	0.999836	0.202930
Pd	Pd50	0.166108	0.249989	0.202826
Pd	Pd51	0.166024	0.500008	0.202856
Pd	Pd52	0.166129	0.749856	0.202900
Pd	Pd53	0.665699	0.999969	0.203084
Pd	Pd54	0.665262	0.250019	0.203307
Pd	Pd55	0.665648	0.499937	0.202989
Pd	Pd56	0.665470	0.749843	0.203171
Pd	Pd57	0.331463	0.125045	0.235811
Pd	Pd58	0.331130	0.375582	0.236700
Pd	Pd59	0.331215	0.624215	0.236549
Pd	Pd60	0.331495	0.874615	0.236088
Pd	Pd61	0.830417	0.124679	0.236283
Pd	Pd62	0.831067	0.374840	0.235655
Pd	Pd63	0.830642	0.625164	0.235975
Pd	Pd64	0.830471	0.874963	0.236380
Pd	Pd65	0.998896	0.999886	0.268430
Pd	Pd66	0.998800	0.249593	0.268357
Pd	Pd67	0.999095	0.499814	0.268411
Pd	Pd68	0.998729	0.749959	0.268367
Pd	Pd69	0.500003	0.999991	0.268955
Pd	Pd70	0.499913	0.250391	0.270447
Pd	Pd71	0.500098	0.498325	0.270030
Pd	Pd72	0.499536	0.748582	0.269510
Pd	Pd73	0.165188	0.124290	0.307467
Pd	Pd74	0.164348	0.374031	0.307242
Pd	Pd75	0.163965	0.625791	0.307496
Pd	Pd76	0.164996	0.875084	0.307595
Pd	Pd77	0.666031	0.124191	0.308536

Pd	Pd78	0.666354	0.374527	0.307708
Pd	Pd79	0.665656	0.624914	0.308167
Pd	Pd80	0.665784	0.874699	0.308351
Pd	Pd81	0.830489	0.749688	0.338627
Pd	Pd82	0.330852	0.999513	0.338001
Pd	Pd83	0.330077	0.247913	0.337412
Pd	Pd84	0.326570	0.500316	0.339776
Pd	Pd85	0.329957	0.750584	0.337836
Pd	Pd86	0.830793	0.999643	0.338811
Pd	Pd87	0.830711	0.249765	0.338322
Pd	Pd88	0.830515	0.499679	0.338070
Pd	Pd89	0.997702	0.124788	0.368431
Pd	Pd90	0.997739	0.374910	0.368457
Pd	Pd91	0.997315	0.624616	0.368627
Pd	Pd92	0.997600	0.874439	0.368450
Pd	Pd93	0.497623	0.121709	0.369582
Pd	Pd94	0.499800	0.370251	0.373641
Pd	Pd95	0.495982	0.622410	0.371173
Pd	Pd96	0.497590	0.872544	0.368562
C	C97	0.443465	0.494352	0.429349
C	C98	0.335170	0.497511	0.429155
O	O99	0.292338	0.597310	0.455092
H	H100	0.482929	0.527634	0.467504
H	H101	0.293514	0.411857	0.434131
H	H102	0.220511	0.594412	0.448578
H	H103	0.472956	0.338642	0.437834

Transition state of R35 $\text{CH}_2\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165790	0.999702	0.202954
Pd	Pd50	0.165749	0.249571	0.202978
Pd	Pd51	0.165971	0.499607	0.202902
Pd	Pd52	0.165848	0.749732	0.202881
Pd	Pd53	0.665605	0.000215	0.203143
Pd	Pd54	0.665800	0.249835	0.202952
Pd	Pd55	0.665441	0.499737	0.202933
Pd	Pd56	0.665399	0.750530	0.202925
Pd	Pd57	0.330818	0.124387	0.236251
Pd	Pd58	0.331042	0.374903	0.236163
Pd	Pd59	0.331002	0.624751	0.236016
Pd	Pd60	0.331136	0.874217	0.236206
Pd	Pd61	0.830157	0.125101	0.236573
Pd	Pd62	0.830549	0.374957	0.236307
Pd	Pd63	0.831788	0.625098	0.235435
Pd	Pd64	0.830397	0.875119	0.236267
Pd	Pd65	0.998478	0.999857	0.268426
Pd	Pd66	0.998454	0.249832	0.268474
Pd	Pd67	0.999468	0.499887	0.268502
Pd	Pd68	0.999327	0.749805	0.268534
Pd	Pd69	0.499237	0.998787	0.268694
Pd	Pd70	0.499266	0.249975	0.268233
Pd	Pd71	0.499562	0.501795	0.270245
Pd	Pd72	0.499666	0.748455	0.270328
Pd	Pd73	0.164183	0.124165	0.307740
Pd	Pd74	0.164346	0.373820	0.307674
Pd	Pd75	0.165462	0.624322	0.307704
Pd	Pd76	0.164490	0.874813	0.307561
Pd	Pd77	0.664955	0.125065	0.308704

Pd	Pd78	0.666088	0.374277	0.308153
Pd	Pd79	0.667891	0.625026	0.305872
Pd	Pd80	0.665275	0.875459	0.308514
Pd	Pd81	0.830616	0.750035	0.338184
Pd	Pd82	0.329320	0.998649	0.338354
Pd	Pd83	0.328790	0.248699	0.338261
Pd	Pd84	0.329784	0.498987	0.337853
Pd	Pd85	0.330038	0.748668	0.337776
Pd	Pd86	0.830065	0.000129	0.338732
Pd	Pd87	0.830052	0.250119	0.339150
Pd	Pd88	0.830920	0.500250	0.338160
Pd	Pd89	0.996730	0.124999	0.368525
Pd	Pd90	0.996842	0.374871	0.368580
Pd	Pd91	0.997759	0.624964	0.368472
Pd	Pd92	0.996936	0.875183	0.368488
Pd	Pd93	0.495969	0.123578	0.368284
Pd	Pd94	0.496244	0.368972	0.367549
Pd	Pd95	0.502602	0.621567	0.372273
Pd	Pd96	0.496340	0.876978	0.370233
C	C97	0.521364	0.655159	0.465939
C	C98	0.559152	0.537785	0.448588
O	O99	0.660112	0.524659	0.448987
H	H100	0.576983	0.715693	0.484769
H	H101	0.449027	0.655808	0.486945
H	H102	0.515031	0.455328	0.457833
H	H103	0.679298	0.452984	0.426302
H	H104	0.504222	0.743508	0.420674

Transition state of R36 CCH₂OH* + H* = CHCH₂OH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

1_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165768	0.999626	0.202853
Pd	Pd50	0.165970	0.249683	0.202569
Pd	Pd51	0.165536	0.500005	0.202676
Pd	Pd52	0.165970	0.750159	0.202778
Pd	Pd53	0.666390	0.999647	0.202841
Pd	Pd54	0.665671	0.250091	0.203205
Pd	Pd55	0.665888	0.500129	0.203288
Pd	Pd56	0.666335	0.749623	0.203299
Pd	Pd57	0.330388	0.124356	0.235959
Pd	Pd58	0.330899	0.374802	0.235594
Pd	Pd59	0.330910	0.624941	0.235879
Pd	Pd60	0.330905	0.874628	0.236034
Pd	Pd61	0.830979	0.126308	0.237331
Pd	Pd62	0.831842	0.375619	0.236184
Pd	Pd63	0.831261	0.624670	0.237137
Pd	Pd64	0.831451	0.875341	0.236573
Pd	Pd65	0.999842	0.000457	0.268482
Pd	Pd66	0.999751	0.250767	0.269045
Pd	Pd67	0.999284	0.500841	0.270021
Pd	Pd68	0.000454	0.750629	0.268552
Pd	Pd69	0.499230	0.998940	0.268156
Pd	Pd70	0.497697	0.249121	0.268731
Pd	Pd71	0.498704	0.499181	0.269035
Pd	Pd72	0.500055	0.749415	0.268425
Pd	Pd73	0.166012	0.124427	0.307761
Pd	Pd74	0.167706	0.374860	0.306586
Pd	Pd75	0.166992	0.625404	0.307286
Pd	Pd76	0.166742	0.875172	0.308038

Pd	Pd77	0.665082	0.121528	0.307428
Pd	Pd78	0.661947	0.371041	0.307487
Pd	Pd79	0.666332	0.625696	0.309146
Pd	Pd80	0.666843	0.874233	0.308527
Pd	Pd81	0.833976	0.751820	0.338672
Pd	Pd82	0.330838	0.999545	0.338396
Pd	Pd83	0.331033	0.249633	0.337767
Pd	Pd84	0.331031	0.499605	0.337773
Pd	Pd85	0.331235	0.749927	0.338142
Pd	Pd86	0.831727	0.001381	0.338692
Pd	Pd87	0.832260	0.252482	0.342026
Pd	Pd88	0.839449	0.502833	0.343832
Pd	Pd89	0.999094	0.125679	0.368848
Pd	Pd90	0.007424	0.374736	0.369983
Pd	Pd91	0.004257	0.629623	0.369867
Pd	Pd92	0.000149	0.877436	0.368456
Pd	Pd93	0.497101	0.123051	0.368198
Pd	Pd94	0.494718	0.373418	0.371620
Pd	Pd95	0.496287	0.625804	0.368603
Pd	Pd96	0.498230	0.874791	0.368347
C	C97	0.743409	0.377300	0.378432
C	C98	0.709070	0.344158	0.437313
O	O99	0.612531	0.399877	0.448333
H	H100	0.703006	0.244304	0.440495
H	H101	0.763602	0.377740	0.468655
H	H102	0.588162	0.369950	0.484829
H	H103	0.719667	0.496253	0.372979

Transition state of R37 CHCH₂OH* + H* = CH₂CH₂OH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166132	0.999752	0.202941
Pd	Pd50	0.166212	0.249510	0.202764
Pd	Pd51	0.165889	0.499840	0.202753
Pd	Pd52	0.166084	0.750111	0.202818
Pd	Pd53	0.665796	0.999832	0.203078
Pd	Pd54	0.665493	0.249855	0.203100
Pd	Pd55	0.665552	0.500072	0.202917
Pd	Pd56	0.665432	0.749963	0.203186
Pd	Pd57	0.331540	0.124704	0.236057
Pd	Pd58	0.331009	0.375080	0.236331
Pd	Pd59	0.331272	0.624064	0.236534
Pd	Pd60	0.331750	0.874447	0.236174
Pd	Pd61	0.830748	0.124788	0.236236
Pd	Pd62	0.831456	0.374822	0.235587
Pd	Pd63	0.830506	0.625079	0.236099
Pd	Pd64	0.830607	0.874863	0.236358
Pd	Pd65	0.999156	0.999877	0.268351
Pd	Pd66	0.999354	0.249582	0.268409
Pd	Pd67	0.999076	0.499809	0.268470
Pd	Pd68	0.998795	0.749961	0.268351
Pd	Pd69	0.499934	0.999930	0.269008
Pd	Pd70	0.499727	0.250845	0.270286
Pd	Pd71	0.499709	0.498356	0.269720
Pd	Pd72	0.499764	0.748248	0.269808
Pd	Pd73	0.165445	0.124080	0.307673
Pd	Pd74	0.164825	0.373812	0.307170
Pd	Pd75	0.164053	0.626259	0.306989
Pd	Pd76	0.165277	0.875323	0.307627

Pd	Pd77	0.666273	0.124192	0.308233
Pd	Pd78	0.667505	0.374652	0.307002
Pd	Pd79	0.666362	0.624868	0.308315
Pd	Pd80	0.665984	0.874828	0.308406
Pd	Pd81	0.830895	0.749924	0.338675
Pd	Pd82	0.331073	0.999339	0.338427
Pd	Pd83	0.330365	0.247970	0.337971
Pd	Pd84	0.326998	0.501029	0.337908
Pd	Pd85	0.330225	0.750578	0.338277
Pd	Pd86	0.831074	0.999763	0.338679
Pd	Pd87	0.831083	0.249740	0.338299
Pd	Pd88	0.830896	0.499792	0.338204
Pd	Pd89	0.997861	0.124669	0.368429
Pd	Pd90	0.997975	0.374668	0.368372
Pd	Pd91	0.997580	0.624805	0.368507
Pd	Pd92	0.997858	0.874724	0.368354
Pd	Pd93	0.498137	0.122475	0.369398
Pd	Pd94	0.500125	0.371174	0.371620
Pd	Pd95	0.497093	0.622934	0.370659
Pd	Pd96	0.497929	0.872568	0.368893
C	C97	0.487635	0.498259	0.435455
C	C98	0.393199	0.509755	0.469959
O	O99	0.303355	0.476650	0.440357
H	H100	0.553960	0.515373	0.461918
H	H101	0.399043	0.455992	0.509603
H	H102	0.382609	0.605752	0.482131
H	H103	0.303206	0.387942	0.435061
H	H104	0.503162	0.344919	0.438229

Transition state of R38 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166059	0.999995	0.202983
Pd	Pd50	0.166085	0.249667	0.202959
Pd	Pd51	0.166011	0.499616	0.202905
Pd	Pd52	0.165909	0.749903	0.202920
Pd	Pd53	0.665854	0.999993	0.203039
Pd	Pd54	0.665820	0.249698	0.202767
Pd	Pd55	0.665342	0.500004	0.202813
Pd	Pd56	0.665884	0.750322	0.202782
Pd	Pd57	0.331549	0.124613	0.236390
Pd	Pd58	0.331300	0.374912	0.236129
Pd	Pd59	0.330983	0.624727	0.236160
Pd	Pd60	0.330984	0.874646	0.236229
Pd	Pd61	0.830884	0.125110	0.236438
Pd	Pd62	0.831022	0.374997	0.236215
Pd	Pd63	0.831224	0.624803	0.235994
Pd	Pd64	0.830952	0.875006	0.236355
Pd	Pd65	0.999430	0.999813	0.268474
Pd	Pd66	0.999418	0.249806	0.268525
Pd	Pd67	0.999483	0.499785	0.268563
Pd	Pd68	0.999465	0.749797	0.268584
Pd	Pd69	0.499772	0.999099	0.268821
Pd	Pd70	0.499350	0.250594	0.269076
Pd	Pd71	0.498977	0.500914	0.270451
Pd	Pd72	0.499594	0.749758	0.268899
Pd	Pd73	0.165962	0.124817	0.308002
Pd	Pd74	0.165442	0.373734	0.307844
Pd	Pd75	0.165491	0.624156	0.307774

Pd	Pd76	0.165443	0.875018	0.307832
Pd	Pd77	0.666020	0.124954	0.308194
Pd	Pd78	0.666405	0.374330	0.306556
Pd	Pd79	0.667011	0.624963	0.306807
Pd	Pd80	0.666017	0.875085	0.308243
Pd	Pd81	0.830729	0.749655	0.338606
Pd	Pd82	0.330808	0.998761	0.338523
Pd	Pd83	0.332292	0.249747	0.338269
Pd	Pd84	0.330383	0.498210	0.338060
Pd	Pd85	0.329674	0.749320	0.338102
Pd	Pd86	0.830901	0.999896	0.338630
Pd	Pd87	0.830750	0.249995	0.338895
Pd	Pd88	0.830551	0.499796	0.338899
Pd	Pd89	0.997837	0.124807	0.368424
Pd	Pd90	0.997492	0.374867	0.368526
Pd	Pd91	0.997474	0.624604	0.368522
Pd	Pd92	0.997628	0.874837	0.368475
Pd	Pd93	0.498245	0.121730	0.368460
Pd	Pd94	0.500214	0.370175	0.371137
Pd	Pd95	0.498761	0.622534	0.369688
Pd	Pd96	0.498326	0.873760	0.370023
C	C97	0.526711	0.624232	0.460736
C	C98	0.622941	0.554798	0.468147
O	O99	0.620227	0.434764	0.442427
H	H100	0.460034	0.569630	0.469955
H	H101	0.525743	0.702787	0.489791
H	H102	0.686195	0.606647	0.450872
H	H103	0.635907	0.540805	0.514122
H	H104	0.675811	0.428282	0.415211
H	H105	0.519260	0.731970	0.417178

Transition state of R39 CCOO* + H* = CHCOO* + * on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723

Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165819	0.999637	0.202875
Pd	Pd50	0.165705	0.249888	0.202714
Pd	Pd51	0.165915	0.499912	0.202537
Pd	Pd52	0.165806	0.750033	0.202873
Pd	Pd53	0.666097	0.000138	0.202600
Pd	Pd54	0.665719	0.250707	0.203213
Pd	Pd55	0.665815	0.500118	0.203020
Pd	Pd56	0.666176	0.750184	0.202630
Pd	Pd57	0.330486	0.124969	0.235923
Pd	Pd58	0.331126	0.374705	0.235650
Pd	Pd59	0.330692	0.624591	0.236124
Pd	Pd60	0.330534	0.874861	0.236195
Pd	Pd61	0.830774	0.125828	0.237090
Pd	Pd62	0.831431	0.374771	0.236381
Pd	Pd63	0.830945	0.623747	0.237877
Pd	Pd64	0.831033	0.874992	0.236423
Pd	Pd65	0.999583	0.000290	0.268502
Pd	Pd66	0.998877	0.250147	0.269192
Pd	Pd67	0.999505	0.500164	0.269364
Pd	Pd68	0.999690	0.750563	0.268391
Pd	Pd69	0.498756	0.000318	0.268306
Pd	Pd70	0.498779	0.250441	0.269309
Pd	Pd71	0.498913	0.499728	0.269174
Pd	Pd72	0.498603	0.750600	0.268039
Pd	Pd73	0.165827	0.124615	0.307586

Pd	Pd74	0.167395	0.374703	0.307022
Pd	Pd75	0.166587	0.625104	0.307356
Pd	Pd76	0.166260	0.874843	0.308037
Pd	Pd77	0.665190	0.122712	0.306709
Pd	Pd78	0.663729	0.376563	0.308478
Pd	Pd79	0.664636	0.629926	0.306793
Pd	Pd80	0.666006	0.876137	0.308103
Pd	Pd81	0.831693	0.752063	0.338631
Pd	Pd82	0.330867	0.000169	0.338282
Pd	Pd83	0.331604	0.249782	0.337989
Pd	Pd84	0.332987	0.498091	0.337876
Pd	Pd85	0.330793	0.749573	0.338490
Pd	Pd86	0.831313	0.000727	0.338738
Pd	Pd87	0.830542	0.248683	0.343361
Pd	Pd88	0.831774	0.503880	0.342459
Pd	Pd89	0.999468	0.124426	0.368947
Pd	Pd90	0.003934	0.375290	0.369026
Pd	Pd91	0.001230	0.627766	0.368889
Pd	Pd92	0.998925	0.875969	0.368297
Pd	Pd93	0.498166	0.123041	0.368618
Pd	Pd94	0.499044	0.377548	0.372672
Pd	Pd95	0.497899	0.627031	0.368308
Pd	Pd96	0.497861	0.874774	0.368295
C	C97	0.744471	0.373398	0.379221
C	C98	0.694026	0.349281	0.436188
O	O99	0.748518	0.343129	0.478430
O	O100	0.598064	0.336065	0.437156
H	H101	0.814997	0.463303	0.407593

Transition state of R40 $\text{CHCOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COO}^* + *$ on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166001	0.999514	0.202730
Pd	Pd50	0.165963	0.249799	0.202711
Pd	Pd51	0.165307	0.499941	0.202628
Pd	Pd52	0.165888	0.750162	0.202724
Pd	Pd53	0.665962	0.000582	0.202477
Pd	Pd54	0.665694	0.250629	0.203399
Pd	Pd55	0.665605	0.498561	0.203696
Pd	Pd56	0.665630	0.750821	0.202100
Pd	Pd57	0.330911	0.124865	0.236003
Pd	Pd58	0.331059	0.375265	0.236054
Pd	Pd59	0.330777	0.624587	0.235734
Pd	Pd60	0.331426	0.874379	0.236217
Pd	Pd61	0.830749	0.125944	0.236571
Pd	Pd62	0.831579	0.376115	0.237228
Pd	Pd63	0.831163	0.625166	0.236282
Pd	Pd64	0.831029	0.875579	0.235983
Pd	Pd65	0.999339	0.000166	0.268323
Pd	Pd66	0.998970	0.250292	0.268629
Pd	Pd67	0.999046	0.500607	0.269267
Pd	Pd68	0.000125	0.750545	0.268446
Pd	Pd69	0.499507	0.999527	0.268110
Pd	Pd70	0.499261	0.249671	0.268749
Pd	Pd71	0.498978	0.501091	0.269543
Pd	Pd72	0.498882	0.749033	0.269548
Pd	Pd73	0.164985	0.123965	0.306900
Pd	Pd74	0.166878	0.374890	0.306996
Pd	Pd75	0.166760	0.625480	0.306949

Pd	Pd76	0.166688	0.874641	0.307649
Pd	Pd77	0.666148	0.121885	0.307335
Pd	Pd78	0.666902	0.375634	0.309517
Pd	Pd79	0.665933	0.630324	0.304627
Pd	Pd80	0.666847	0.876600	0.307763
Pd	Pd81	0.833142	0.752799	0.337786
Pd	Pd82	0.330450	0.999657	0.338200
Pd	Pd83	0.330155	0.249987	0.337835
Pd	Pd84	0.331489	0.500417	0.338178
Pd	Pd85	0.332910	0.748133	0.338097
Pd	Pd86	0.832334	0.000643	0.338737
Pd	Pd87	0.833207	0.250054	0.341195
Pd	Pd88	0.835277	0.505124	0.341389
Pd	Pd89	0.000160	0.125305	0.368699
Pd	Pd90	0.002696	0.375259	0.368655
Pd	Pd91	0.003239	0.627875	0.368902
Pd	Pd92	0.000101	0.876921	0.368510
Pd	Pd93	0.496422	0.123813	0.368068
Pd	Pd94	0.494319	0.373764	0.370595
Pd	Pd95	0.500439	0.627699	0.373136
Pd	Pd96	0.498466	0.876841	0.368185
C	C97	0.637279	0.383746	0.397978
C	C98	0.670947	0.505227	0.420924
O	O99	0.604074	0.579702	0.438432
O	O100	0.763659	0.529069	0.424140
H	H101	0.639495	0.311366	0.430571
H	H102	0.726347	0.321309	0.373238

Transition state of R41 $\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COO}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

1_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166241	0.000190	0.203021
Pd	Pd50	0.166193	0.249983	0.202994
Pd	Pd51	0.165686	0.499957	0.202686
Pd	Pd52	0.166156	0.750197	0.202870
Pd	Pd53	0.666222	0.999545	0.202781
Pd	Pd54	0.666339	0.249307	0.202376
Pd	Pd55	0.665769	0.499565	0.202161
Pd	Pd56	0.665936	0.750213	0.202263
Pd	Pd57	0.331427	0.125485	0.236290
Pd	Pd58	0.331256	0.375544	0.236079
Pd	Pd59	0.331180	0.624398	0.236008
Pd	Pd60	0.331369	0.874737	0.236267
Pd	Pd61	0.831208	0.125033	0.236136
Pd	Pd62	0.831282	0.377132	0.238076
Pd	Pd63	0.831047	0.624098	0.237373
Pd	Pd64	0.830969	0.873425	0.236578
Pd	Pd65	0.999707	0.999664	0.268241
Pd	Pd66	0.000282	0.249590	0.268360
Pd	Pd67	0.998917	0.499617	0.269240
Pd	Pd68	0.999677	0.749853	0.268538
Pd	Pd69	0.499697	0.999943	0.268100
Pd	Pd70	0.499384	0.250027	0.268819
Pd	Pd71	0.499215	0.499430	0.269921
Pd	Pd72	0.498792	0.749268	0.268910
Pd	Pd73	0.166771	0.125397	0.308023
Pd	Pd74	0.167337	0.375147	0.307793
Pd	Pd75	0.167205	0.624912	0.307398
Pd	Pd76	0.166305	0.875314	0.307794

Pd	Pd77	0.666565	0.122987	0.307829
Pd	Pd78	0.665635	0.371416	0.304796
Pd	Pd79	0.664466	0.626153	0.304350
Pd	Pd80	0.666300	0.875060	0.307783
Pd	Pd81	0.830475	0.749309	0.340743
Pd	Pd82	0.330883	0.000379	0.338293
Pd	Pd83	0.333513	0.252207	0.338046
Pd	Pd84	0.333365	0.500363	0.338592
Pd	Pd85	0.332119	0.749166	0.337912
Pd	Pd86	0.831839	0.998039	0.338291
Pd	Pd87	0.831914	0.247549	0.338135
Pd	Pd88	0.826777	0.498165	0.345401
Pd	Pd89	0.998908	0.123638	0.368202
Pd	Pd90	0.999933	0.373048	0.368233
Pd	Pd91	0.001656	0.624367	0.367986
Pd	Pd92	0.999113	0.874535	0.368403
Pd	Pd93	0.498406	0.123559	0.368259
Pd	Pd94	0.499497	0.370329	0.372669
Pd	Pd95	0.499074	0.630718	0.371716
Pd	Pd96	0.498111	0.877131	0.368111
C	C97	0.770684	0.520867	0.435867
C	C98	0.660317	0.508088	0.432062
O	O99	0.624761	0.400491	0.425648
O	O100	0.608605	0.606029	0.434513
H	H101	0.809551	0.436092	0.446398
H	H102	0.793218	0.595130	0.464218
H	H103	0.801434	0.616664	0.389329

Transition state of R42 CCOOH* + H* = CHCOOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165721	0.999479	0.202895
Pd	Pd50	0.165470	0.249599	0.202718
Pd	Pd51	0.165579	0.499768	0.202612
Pd	Pd52	0.165990	0.749951	0.202808
Pd	Pd53	0.666387	0.999841	0.202779
Pd	Pd54	0.665510	0.250337	0.202963
Pd	Pd55	0.665862	0.500630	0.203062
Pd	Pd56	0.666328	0.749892	0.203226
Pd	Pd57	0.330067	0.124344	0.235957
Pd	Pd58	0.330670	0.374561	0.235529
Pd	Pd59	0.330928	0.624624	0.235997
Pd	Pd60	0.330880	0.874444	0.236042
Pd	Pd61	0.830706	0.126809	0.237407
Pd	Pd62	0.831717	0.375891	0.236574
Pd	Pd63	0.831490	0.625074	0.237031
Pd	Pd64	0.831493	0.875775	0.236481
Pd	Pd65	0.999645	0.000823	0.268479
Pd	Pd66	0.998728	0.251218	0.269412
Pd	Pd67	0.000332	0.501153	0.269872
Pd	Pd68	0.000523	0.750936	0.268572
Pd	Pd69	0.499078	0.998817	0.268121
Pd	Pd70	0.497181	0.249136	0.268767
Pd	Pd71	0.498150	0.499150	0.269129
Pd	Pd72	0.500042	0.749382	0.268351
Pd	Pd73	0.165315	0.124478	0.307787
Pd	Pd74	0.167879	0.374627	0.306850
Pd	Pd75	0.167610	0.625165	0.307298
Pd	Pd76	0.166679	0.874998	0.308021

Pd	Pd77	0.664833	0.122116	0.307063
Pd	Pd78	0.661267	0.372239	0.306384
Pd	Pd79	0.666591	0.626022	0.309055
Pd	Pd80	0.666897	0.874591	0.308420
Pd	Pd81	0.834235	0.753086	0.338617
Pd	Pd82	0.330578	0.999436	0.338237
Pd	Pd83	0.331079	0.249421	0.337907
Pd	Pd84	0.332006	0.498228	0.337941
Pd	Pd85	0.331267	0.749597	0.338218
Pd	Pd86	0.831373	0.002225	0.338627
Pd	Pd87	0.830070	0.253397	0.343503
Pd	Pd88	0.841441	0.504808	0.343464
Pd	Pd89	0.998071	0.126615	0.368947
Pd	Pd90	0.007296	0.375348	0.370114
Pd	Pd91	0.005327	0.631086	0.369941
Pd	Pd92	0.000296	0.878728	0.368498
Pd	Pd93	0.496810	0.122023	0.367905
Pd	Pd94	0.497043	0.374460	0.372717
Pd	Pd95	0.496512	0.625596	0.368565
Pd	Pd96	0.498164	0.874042	0.368354
C	C97	0.741480	0.384901	0.377534
C	C98	0.699462	0.358665	0.434049
O	O99	0.608485	0.351369	0.444148
O	O100	0.766503	0.344705	0.476040
H	H101	0.729298	0.329551	0.511232
H	H102	0.717688	0.502369	0.370830

Transition state of R43 CHCOOH* + H* = CH₂COOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166186	0.000169	0.202892
Pd	Pd50	0.166189	0.249890	0.202743
Pd	Pd51	0.165951	0.500038	0.202671
Pd	Pd52	0.166199	0.750320	0.202660
Pd	Pd53	0.665737	0.000100	0.203089
Pd	Pd54	0.665275	0.249992	0.203238
Pd	Pd55	0.665702	0.499902	0.202724
Pd	Pd56	0.665477	0.750059	0.203093
Pd	Pd57	0.331822	0.125742	0.236064
Pd	Pd58	0.331135	0.376677	0.237019
Pd	Pd59	0.331097	0.624696	0.236741
Pd	Pd60	0.331664	0.875042	0.236091
Pd	Pd61	0.830414	0.125026	0.236383
Pd	Pd62	0.830636	0.374740	0.236008
Pd	Pd63	0.831426	0.625131	0.235564
Pd	Pd64	0.830548	0.875130	0.236251
Pd	Pd65	0.999029	0.000044	0.268286
Pd	Pd66	0.998762	0.249877	0.268305
Pd	Pd67	0.999167	0.500112	0.268406
Pd	Pd68	0.999179	0.750334	0.268336
Pd	Pd69	0.499938	0.000294	0.269048
Pd	Pd70	0.499623	0.252151	0.270147
Pd	Pd71	0.500056	0.501616	0.269463
Pd	Pd72	0.499950	0.749428	0.270234
Pd	Pd73	0.165248	0.124699	0.307470
Pd	Pd74	0.164105	0.373744	0.306910
Pd	Pd75	0.164917	0.626244	0.306945
Pd	Pd76	0.165355	0.875806	0.307415
Pd	Pd77	0.666079	0.125016	0.308494

Pd	Pd78	0.666969	0.375037	0.308106
Pd	Pd79	0.667786	0.625244	0.306928
Pd	Pd80	0.666258	0.875733	0.308362
Pd	Pd81	0.831189	0.750116	0.338346
Pd	Pd82	0.330970	0.000708	0.338228
Pd	Pd83	0.329965	0.248950	0.338196
Pd	Pd84	0.326717	0.499904	0.339481
Pd	Pd85	0.330353	0.752303	0.338033
Pd	Pd86	0.831182	0.999932	0.338725
Pd	Pd87	0.831019	0.249748	0.338710
Pd	Pd88	0.831137	0.500027	0.338123
Pd	Pd89	0.998016	0.125002	0.368319
Pd	Pd90	0.997725	0.374908	0.368388
Pd	Pd91	0.998153	0.625093	0.368285
Pd	Pd92	0.998099	0.875102	0.368376
Pd	Pd93	0.497947	0.126793	0.369025
Pd	Pd94	0.498035	0.375402	0.370009
Pd	Pd95	0.501193	0.629384	0.371196
Pd	Pd96	0.498227	0.878055	0.369509
C	C97	0.486550	0.503164	0.434937
C	C98	0.387259	0.484184	0.458794
O	O99	0.306206	0.502587	0.433569
O	O100	0.385642	0.442638	0.512981
H	H101	0.547034	0.489272	0.465512
H	H102	0.315617	0.429305	0.522811
H	H103	0.490817	0.660454	0.436929

Transition state of R44 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165987	0.999710	0.202894
Pd	Pd50	0.166077	0.249497	0.202908
Pd	Pd51	0.166083	0.499511	0.202854
Pd	Pd52	0.166084	0.749715	0.202885
Pd	Pd53	0.665831	0.000150	0.202981
Pd	Pd54	0.665531	0.249822	0.202997
Pd	Pd55	0.665399	0.499933	0.202847
Pd	Pd56	0.665760	0.750306	0.202770
Pd	Pd57	0.331527	0.124448	0.236267
Pd	Pd58	0.331386	0.374796	0.236077
Pd	Pd59	0.331266	0.624537	0.236047
Pd	Pd60	0.331278	0.874456	0.236194
Pd	Pd61	0.830631	0.125066	0.236380
Pd	Pd62	0.830984	0.374884	0.236037
Pd	Pd63	0.831815	0.624922	0.235523
Pd	Pd64	0.830859	0.875055	0.236263
Pd	Pd65	0.999143	0.999820	0.268380
Pd	Pd66	0.999170	0.249820	0.268443
Pd	Pd67	0.999686	0.499806	0.268492
Pd	Pd68	0.999704	0.749759	0.268496
Pd	Pd69	0.499811	0.999110	0.268585
Pd	Pd70	0.499279	0.251504	0.269682
Pd	Pd71	0.499752	0.501124	0.270499
Pd	Pd72	0.499814	0.748901	0.269403
Pd	Pd73	0.165251	0.124349	0.307657
Pd	Pd74	0.165331	0.373753	0.307693
Pd	Pd75	0.165924	0.624071	0.307704
Pd	Pd76	0.165216	0.874715	0.307622
Pd	Pd77	0.666015	0.124926	0.308189

Pd	Pd78	0.666955	0.374560	0.307284
Pd	Pd79	0.668169	0.625156	0.306192
Pd	Pd80	0.665897	0.875251	0.308199
Pd	Pd81	0.831107	0.749933	0.338255
Pd	Pd82	0.330237	0.998454	0.338354
Pd	Pd83	0.330597	0.248512	0.338104
Pd	Pd84	0.330783	0.498526	0.337635
Pd	Pd85	0.330089	0.748839	0.337884
Pd	Pd86	0.830877	0.999948	0.338650
Pd	Pd87	0.830887	0.249921	0.338837
Pd	Pd88	0.831183	0.499939	0.338258
Pd	Pd89	0.997712	0.124820	0.368427
Pd	Pd90	0.997678	0.374773	0.368498
Pd	Pd91	0.998047	0.624733	0.368403
Pd	Pd92	0.997683	0.875000	0.368407
Pd	Pd93	0.497573	0.120867	0.368252
Pd	Pd94	0.500207	0.368959	0.370181
Pd	Pd95	0.502262	0.623832	0.371203
Pd	Pd96	0.497547	0.874780	0.370059
C	C97	0.515702	0.640914	0.465576
C	C98	0.572254	0.527889	0.457584
O	O99	0.534846	0.421815	0.455907
O	O100	0.672267	0.543436	0.457771
H	H101	0.440214	0.626858	0.481260
H	H102	0.557280	0.710180	0.489122
H	H103	0.702850	0.466378	0.445650
H	H104	0.506645	0.738791	0.419728

Transition state of R45 CCHOO* + H* = CHCHOO* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165729	1.000000	0.202540
Pd	Pd50	0.165998	0.249866	0.202587
Pd	Pd51	0.165973	0.500000	0.202295
Pd	Pd52	0.166000	0.750136	0.202587
Pd	Pd53	0.666159	1.000000	0.202723
Pd	Pd54	0.665766	0.251453	0.203896
Pd	Pd55	0.664919	0.499999	0.204052
Pd	Pd56	0.665775	0.748547	0.203898
Pd	Pd57	0.331063	0.125068	0.235815
Pd	Pd58	0.331568	0.375520	0.235705
Pd	Pd59	0.331571	0.624478	0.235703
Pd	Pd60	0.331065	0.874937	0.235814
Pd	Pd61	0.830946	0.125298	0.236173
Pd	Pd62	0.830659	0.375144	0.236577
Pd	Pd63	0.830663	0.624855	0.236580
Pd	Pd64	0.830945	0.874699	0.236175
Pd	Pd65	0.999303	0.000003	0.268300
Pd	Pd66	0.999972	0.249850	0.268467
Pd	Pd67	0.998854	0.500003	0.269543
Pd	Pd68	0.999973	0.750152	0.268466
Pd	Pd69	0.499525	0.000002	0.267951
Pd	Pd70	0.499789	0.251005	0.269275
Pd	Pd71	0.499039	0.499998	0.270726
Pd	Pd72	0.499795	0.748996	0.269272
Pd	Pd73	0.165549	0.124539	0.306994
Pd	Pd74	0.167155	0.375189	0.306487
Pd	Pd75	0.167161	0.624814	0.306486
Pd	Pd76	0.165553	0.875463	0.306993

Pd	Pd77	0.666650	0.124845	0.307584
Pd	Pd78	0.665681	0.374602	0.312680
Pd	Pd79	0.665692	0.625380	0.312679
Pd	Pd80	0.666652	0.875142	0.307583
Pd	Pd81	0.834652	0.753114	0.338634
Pd	Pd82	0.329611	0.000001	0.337815
Pd	Pd83	0.330605	0.249807	0.336795
Pd	Pd84	0.331613	0.500006	0.338693
Pd	Pd85	0.330607	0.750195	0.336792
Pd	Pd86	0.832390	0.999999	0.337914
Pd	Pd87	0.834652	0.246883	0.338634
Pd	Pd88	0.840666	0.499999	0.341366
Pd	Pd89	0.001059	0.123579	0.368879
Pd	Pd90	0.005208	0.372158	0.369264
Pd	Pd91	0.005205	0.627841	0.369264
Pd	Pd92	0.001061	0.876422	0.368879
Pd	Pd93	0.497421	0.121718	0.368149
Pd	Pd94	0.490521	0.364776	0.372634
Pd	Pd95	0.490529	0.635249	0.372628
Pd	Pd96	0.497416	0.878294	0.368144
C	C97	0.699806	0.499988	0.371761
C	C98	0.642244	0.500009	0.430661
O	O99	0.587934	0.393933	0.434933
O	O100	0.587968	0.606110	0.434918
H	H101	0.697151	0.500011	0.466168
H	H102	0.796876	0.499913	0.404044

Transition state of R46 CHCHOO* + H* = CH₂CHOO* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165897	0.000323	0.202568
Pd	Pd50	0.166354	0.250505	0.202471
Pd	Pd51	0.164972	0.500291	0.203003
Pd	Pd52	0.165895	0.750352	0.202682
Pd	Pd53	0.665810	0.998760	0.202289
Pd	Pd54	0.665639	0.249806	0.202651
Pd	Pd55	0.665393	0.498757	0.204065
Pd	Pd56	0.665779	0.747356	0.204664
Pd	Pd57	0.331037	0.126193	0.235950
Pd	Pd58	0.331626	0.376140	0.235951
Pd	Pd59	0.330884	0.624881	0.235930
Pd	Pd60	0.330803	0.875448	0.235937
Pd	Pd61	0.830977	0.125491	0.236198
Pd	Pd62	0.832429	0.375271	0.236616
Pd	Pd63	0.831601	0.624199	0.236275
Pd	Pd64	0.830946	0.875593	0.235892
Pd	Pd65	0.999516	0.000491	0.268382
Pd	Pd66	0.000660	0.250351	0.268609
Pd	Pd67	0.997680	0.500235	0.270455
Pd	Pd68	0.000449	0.750506	0.268291
Pd	Pd69	0.498780	0.000607	0.267838
Pd	Pd70	0.499036	0.251334	0.269741
Pd	Pd71	0.500169	0.500922	0.270298
Pd	Pd72	0.498086	0.750546	0.269055
Pd	Pd73	0.165986	0.125573	0.306936
Pd	Pd74	0.167564	0.375627	0.307005
Pd	Pd75	0.166127	0.626277	0.307102
Pd	Pd76	0.165984	0.876660	0.307230
Pd	Pd77	0.666815	0.120621	0.306408

Pd	Pd78	0.667996	0.369638	0.306951
Pd	Pd79	0.666434	0.631117	0.308904
Pd	Pd80	0.666399	0.877917	0.308426
Pd	Pd81	0.835915	0.754591	0.337027
Pd	Pd82	0.329932	0.002060	0.338260
Pd	Pd83	0.331563	0.251699	0.337945
Pd	Pd84	0.331669	0.500392	0.337996
Pd	Pd85	0.330054	0.752087	0.337516
Pd	Pd86	0.833469	0.001015	0.338618
Pd	Pd87	0.837488	0.248616	0.339936
Pd	Pd88	0.835535	0.505735	0.343603
Pd	Pd89	0.002520	0.124738	0.369153
Pd	Pd90	0.004760	0.375501	0.369396
Pd	Pd91	0.003989	0.628470	0.369708
Pd	Pd92	0.001372	0.876948	0.368877
Pd	Pd93	0.497213	0.123303	0.367956
Pd	Pd94	0.499121	0.371328	0.374355
Pd	Pd95	0.492818	0.636587	0.370588
Pd	Pd96	0.497333	0.879336	0.368304
C	C97	0.648030	0.362046	0.394350
C	C98	0.655534	0.484633	0.424564
O	O99	0.552821	0.518050	0.429850
O	O100	0.712227	0.571683	0.396083
H	H101	0.657395	0.280458	0.420854
H	H102	0.685527	0.476474	0.468349
H	H103	0.752199	0.351495	0.368879

Transition state of R47 $\text{CH}_2\text{CHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165601	0.000077	0.202808
Pd	Pd50	0.166012	0.249786	0.202729
Pd	Pd51	0.166151	0.499930	0.202369
Pd	Pd52	0.165921	0.750197	0.202732
Pd	Pd53	0.665506	0.999809	0.202540
Pd	Pd54	0.666114	0.251842	0.204420
Pd	Pd55	0.665713	0.499785	0.203790
Pd	Pd56	0.665745	0.748182	0.203923
Pd	Pd57	0.330464	0.125311	0.236065
Pd	Pd58	0.331422	0.375337	0.235846
Pd	Pd59	0.331327	0.624591	0.235861
Pd	Pd60	0.330359	0.874811	0.236062
Pd	Pd61	0.830265	0.124503	0.235981
Pd	Pd62	0.832175	0.376315	0.237291
Pd	Pd63	0.831933	0.624584	0.236459
Pd	Pd64	0.830035	0.873922	0.236469
Pd	Pd65	0.998233	0.999602	0.268133
Pd	Pd66	0.999622	0.248887	0.268141
Pd	Pd67	0.999826	0.499482	0.268734
Pd	Pd68	0.999096	0.750163	0.268408
Pd	Pd69	0.498203	0.000060	0.268169
Pd	Pd70	0.498655	0.249598	0.268937
Pd	Pd71	0.499308	0.499710	0.270249
Pd	Pd72	0.498081	0.750278	0.268852
Pd	Pd73	0.164600	0.124476	0.307653
Pd	Pd74	0.165198	0.373955	0.306803
Pd	Pd75	0.164857	0.625539	0.306671
Pd	Pd76	0.164016	0.875840	0.307489
Pd	Pd77	0.664892	0.121480	0.308288

Pd	Pd78	0.667449	0.369877	0.308325
Pd	Pd79	0.665929	0.629201	0.307296
Pd	Pd80	0.664507	0.877017	0.308066
Pd	Pd81	0.831965	0.750172	0.339776
Pd	Pd82	0.328099	0.000142	0.337997
Pd	Pd83	0.329248	0.251244	0.337828
Pd	Pd84	0.326494	0.499858	0.337861
Pd	Pd85	0.327757	0.749295	0.337710
Pd	Pd86	0.831039	0.998048	0.338443
Pd	Pd87	0.832941	0.245961	0.337706
Pd	Pd88	0.833835	0.497123	0.341389
Pd	Pd89	0.998473	0.122923	0.368642
Pd	Pd90	0.001738	0.371532	0.368534
Pd	Pd91	0.002661	0.624962	0.368564
Pd	Pd92	0.998230	0.874992	0.368870
Pd	Pd93	0.494403	0.123847	0.368212
Pd	Pd94	0.486296	0.371848	0.372192
Pd	Pd95	0.483606	0.628556	0.372012
Pd	Pd96	0.493831	0.876016	0.368096
C	C97	0.776403	0.509530	0.428982
C	C98	0.663761	0.504325	0.423323
O	O99	0.634296	0.394763	0.396887
O	O100	0.630078	0.611709	0.396644
H	H101	0.809072	0.421617	0.441092
H	H102	0.798056	0.577852	0.460767
H	H103	0.629612	0.503289	0.466420
H	H104	0.821646	0.610338	0.388789

Transition state of R48 CCHOOH* + H* = CHCHOOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165742	0.999928	0.202477
Pd	Pd50	0.165985	0.249613	0.202498
Pd	Pd51	0.166019	0.499865	0.202258
Pd	Pd52	0.165864	0.750205	0.202454
Pd	Pd53	0.666192	0.000317	0.202998
Pd	Pd54	0.665782	0.251890	0.204392
Pd	Pd55	0.665431	0.500031	0.204177
Pd	Pd56	0.665514	0.748735	0.204163
Pd	Pd57	0.331109	0.124743	0.235785
Pd	Pd58	0.331398	0.374958	0.235597
Pd	Pd59	0.331240	0.624812	0.235603
Pd	Pd60	0.330978	0.875034	0.235759
Pd	Pd61	0.830997	0.125387	0.236276
Pd	Pd62	0.830916	0.375193	0.236726
Pd	Pd63	0.830812	0.625288	0.236363
Pd	Pd64	0.830901	0.874770	0.236276
Pd	Pd65	0.999589	0.999979	0.268372
Pd	Pd66	0.000063	0.249733	0.268482
Pd	Pd67	0.999121	0.499736	0.269481
Pd	Pd68	0.999805	0.750062	0.268477
Pd	Pd69	0.499636	1.000000	0.268276
Pd	Pd70	0.499466	0.250630	0.269372
Pd	Pd71	0.499173	0.500019	0.269627
Pd	Pd72	0.499002	0.749365	0.269470
Pd	Pd73	0.165968	0.123932	0.307106
Pd	Pd74	0.166863	0.374081	0.306217
Pd	Pd75	0.166617	0.625613	0.306079
Pd	Pd76	0.165824	0.875854	0.307074

Pd	Pd77	0.666843	0.125260	0.308180
Pd	Pd78	0.666222	0.374717	0.314181
Pd	Pd79	0.665176	0.626949	0.313052
Pd	Pd80	0.666563	0.875596	0.308023
Pd	Pd81	0.834696	0.753074	0.338851
Pd	Pd82	0.330502	0.999744	0.338209
Pd	Pd83	0.330320	0.248392	0.337125
Pd	Pd84	0.329101	0.499759	0.337631
Pd	Pd85	0.330001	0.751229	0.337078
Pd	Pd86	0.832576	0.000069	0.338023
Pd	Pd87	0.835195	0.247037	0.338913
Pd	Pd88	0.842272	0.500054	0.340841
Pd	Pd89	0.001324	0.123595	0.368884
Pd	Pd90	0.005758	0.371878	0.369448
Pd	Pd91	0.006156	0.627644	0.369343
Pd	Pd92	0.001199	0.876307	0.368838
Pd	Pd93	0.498088	0.121937	0.368568
Pd	Pd94	0.492273	0.365912	0.370415
Pd	Pd95	0.490721	0.632915	0.370998
Pd	Pd96	0.498057	0.877205	0.368702
C	C97	0.701560	0.502529	0.371732
C	C98	0.650953	0.500838	0.430346
O	O99	0.546683	0.497857	0.426305
O	O100	0.681932	0.607649	0.459389
H	H101	0.675486	0.418140	0.453501
H	H102	0.660543	0.600564	0.498896
H	H103	0.796709	0.524777	0.402406

Transition state of R49 CHCHOOH* + H* = CH₂CHOOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165986	0.999222	0.202772
Pd	Pd50	0.166082	0.249562	0.202731
Pd	Pd51	0.165278	0.499558	0.202882
Pd	Pd52	0.166130	0.749717	0.202750
Pd	Pd53	0.666038	0.000444	0.202429
Pd	Pd54	0.665782	0.251093	0.203676
Pd	Pd55	0.665633	0.498782	0.203819
Pd	Pd56	0.665727	0.750596	0.202374
Pd	Pd57	0.330828	0.124458	0.236029
Pd	Pd58	0.331188	0.374660	0.236191
Pd	Pd59	0.331053	0.623960	0.235890
Pd	Pd60	0.331320	0.873814	0.236354
Pd	Pd61	0.831006	0.126122	0.236535
Pd	Pd62	0.831219	0.376215	0.237441
Pd	Pd63	0.831564	0.625432	0.236075
Pd	Pd64	0.831164	0.875993	0.235862
Pd	Pd65	0.999459	0.000320	0.268454
Pd	Pd66	0.999494	0.250401	0.268649
Pd	Pd67	0.998602	0.500700	0.269430
Pd	Pd68	0.000544	0.750643	0.268403
Pd	Pd69	0.499195	0.999095	0.267965
Pd	Pd70	0.499380	0.249373	0.269052
Pd	Pd71	0.499923	0.499859	0.269567
Pd	Pd72	0.499040	0.748255	0.269583
Pd	Pd73	0.164983	0.123552	0.307053
Pd	Pd74	0.166856	0.374810	0.307299
Pd	Pd75	0.166860	0.625129	0.307267
Pd	Pd76	0.166414	0.874187	0.307755

Pd	Pd77	0.666345	0.121996	0.306817
Pd	Pd78	0.665775	0.376586	0.311276
Pd	Pd79	0.667550	0.630132	0.305169
Pd	Pd80	0.667069	0.876556	0.307845
Pd	Pd81	0.834094	0.753386	0.337355
Pd	Pd82	0.330194	0.998729	0.338262
Pd	Pd83	0.329563	0.248543	0.338061
Pd	Pd84	0.332342	0.499505	0.338073
Pd	Pd85	0.333185	0.747727	0.338218
Pd	Pd86	0.832407	0.001164	0.338714
Pd	Pd87	0.834126	0.250571	0.340820
Pd	Pd88	0.833807	0.505963	0.341739
Pd	Pd89	0.000261	0.125666	0.368903
Pd	Pd90	0.002197	0.375959	0.368737
Pd	Pd91	0.002562	0.628199	0.369038
Pd	Pd92	0.999986	0.877177	0.368736
Pd	Pd93	0.496279	0.121601	0.367985
Pd	Pd94	0.493832	0.369830	0.371436
Pd	Pd95	0.505101	0.628702	0.370712
Pd	Pd96	0.498854	0.876519	0.368222
C	C97	0.637727	0.364071	0.399010
C	C98	0.649992	0.472669	0.439544
O	O99	0.569445	0.549025	0.440344
O	O100	0.743026	0.538081	0.427872
H	H101	0.644710	0.275601	0.420651
H	H102	0.659016	0.436206	0.483336
H	H103	0.725076	0.624554	0.428971
H	H104	0.741632	0.343354	0.372796

Transition state of R50 $\text{CH}_2\text{CHOOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + *$ on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165887	0.000223	0.202988
Pd	Pd50	0.165822	0.250258	0.202836
Pd	Pd51	0.165839	0.500092	0.202805
Pd	Pd52	0.166074	0.749982	0.202900
Pd	Pd53	0.665976	0.999879	0.202871
Pd	Pd54	0.665802	0.250009	0.202854
Pd	Pd55	0.665694	0.499988	0.202688
Pd	Pd56	0.665280	0.749993	0.203175
Pd	Pd57	0.330732	0.126009	0.236242
Pd	Pd58	0.330701	0.375155	0.236825
Pd	Pd59	0.330573	0.622747	0.238049
Pd	Pd60	0.330846	0.874724	0.235961
Pd	Pd61	0.830563	0.125065	0.236240
Pd	Pd62	0.830902	0.374954	0.235994
Pd	Pd63	0.830183	0.625169	0.236055
Pd	Pd64	0.830480	0.875085	0.236188
Pd	Pd65	0.998800	0.000227	0.268460
Pd	Pd66	0.998656	0.249952	0.268433
Pd	Pd67	0.998393	0.500317	0.268298
Pd	Pd68	0.998130	0.750560	0.268322
Pd	Pd69	0.499235	0.000057	0.267960
Pd	Pd70	0.499200	0.250743	0.268948
Pd	Pd71	0.499404	0.499675	0.269656
Pd	Pd72	0.498780	0.748878	0.269518
Pd	Pd73	0.164508	0.125735	0.307807
Pd	Pd74	0.163117	0.375457	0.306952
Pd	Pd75	0.163091	0.627157	0.307325

Pd	Pd76	0.164469	0.876026	0.307803
Pd	Pd77	0.665765	0.124505	0.307769
Pd	Pd78	0.666518	0.374749	0.307142
Pd	Pd79	0.664757	0.624972	0.307883
Pd	Pd80	0.665711	0.875209	0.307941
Pd	Pd81	0.829765	0.749894	0.338547
Pd	Pd82	0.329443	0.001653	0.337692
Pd	Pd83	0.328936	0.249634	0.339690
Pd	Pd84	0.327535	0.502683	0.341507
Pd	Pd85	0.328841	0.753326	0.337788
Pd	Pd86	0.830479	0.000019	0.338564
Pd	Pd87	0.830139	0.249831	0.338536
Pd	Pd88	0.829850	0.500030	0.338289
Pd	Pd89	0.997042	0.125117	0.368622
Pd	Pd90	0.996573	0.375237	0.368411
Pd	Pd91	0.996450	0.625067	0.368420
Pd	Pd92	0.996866	0.874872	0.368579
Pd	Pd93	0.497954	0.122622	0.368056
Pd	Pd94	0.501843	0.369049	0.368277
Pd	Pd95	0.497802	0.631361	0.369656
Pd	Pd96	0.497076	0.878016	0.367900
C	C97	0.302293	0.488273	0.433806
C	C98	0.398662	0.512758	0.465660
O	O99	0.451010	0.613385	0.451280
O	O100	0.460285	0.399131	0.460260
H	H101	0.258818	0.415467	0.453981
H	H102	0.255743	0.570333	0.431803
H	H103	0.380974	0.518365	0.511884
H	H104	0.521442	0.416748	0.481147
H	H105	0.312956	0.385103	0.386798

Transition state of R51 CCO* + H* = CCHO* + * on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723

Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166030	0.999734	0.203100
Pd	Pd50	0.165578	0.249824	0.203050
Pd	Pd51	0.165732	0.499699	0.202886
Pd	Pd52	0.166045	0.749928	0.203021
Pd	Pd53	0.666293	0.999789	0.202681
Pd	Pd54	0.665907	0.248408	0.201517
Pd	Pd55	0.666040	0.500973	0.201888
Pd	Pd56	0.666232	0.750814	0.202770
Pd	Pd57	0.330373	0.124829	0.236414
Pd	Pd58	0.330989	0.374759	0.236090
Pd	Pd59	0.330663	0.624131	0.236254
Pd	Pd60	0.330840	0.874104	0.236471
Pd	Pd61	0.830923	0.127049	0.237882
Pd	Pd62	0.832792	0.375285	0.236577
Pd	Pd63	0.831282	0.624756	0.237122
Pd	Pd64	0.831370	0.875812	0.236571
Pd	Pd65	0.999714	0.000518	0.268509
Pd	Pd66	0.998294	0.250722	0.269728
Pd	Pd67	0.998842	0.500465	0.269606
Pd	Pd68	0.000240	0.750375	0.268542
Pd	Pd69	0.498856	0.998375	0.268082
Pd	Pd70	0.498061	0.248517	0.269001
Pd	Pd71	0.498524	0.500063	0.269375
Pd	Pd72	0.499247	0.748913	0.268809
Pd	Pd73	0.165978	0.124927	0.308184

Pd	Pd74	0.167713	0.374663	0.307603
Pd	Pd75	0.166633	0.624623	0.307934
Pd	Pd76	0.166773	0.874827	0.308192
Pd	Pd77	0.665144	0.121477	0.306755
Pd	Pd78	0.663756	0.373734	0.300928
Pd	Pd79	0.666214	0.628832	0.306126
Pd	Pd80	0.666650	0.875553	0.308342
Pd	Pd81	0.832121	0.751581	0.338557
Pd	Pd82	0.331443	0.999277	0.338694
Pd	Pd83	0.334409	0.251446	0.338868
Pd	Pd84	0.334162	0.498313	0.339013
Pd	Pd85	0.332833	0.746885	0.338694
Pd	Pd86	0.831167	0.002001	0.338885
Pd	Pd87	0.825108	0.252694	0.347578
Pd	Pd88	0.828120	0.503679	0.344778
Pd	Pd89	0.996965	0.126469	0.368787
Pd	Pd90	0.001719	0.376314	0.369027
Pd	Pd91	0.999135	0.626625	0.368926
Pd	Pd92	0.998744	0.876597	0.368123
Pd	Pd93	0.499120	0.120416	0.368446
Pd	Pd94	0.507208	0.370103	0.373320
Pd	Pd95	0.503929	0.623172	0.370756
Pd	Pd96	0.498824	0.872790	0.368530
C	C97	0.732426	0.383324	0.374042
C	C98	0.659181	0.393851	0.420646
O	O99	0.661340	0.363665	0.470122
H	H100	0.588338	0.482801	0.404315

Transition state of R52 $\text{CHCO}^* + \text{H}^* = \text{CHCHO}^* + ^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166325	0.999450	0.202946
Pd	Pd50	0.166253	0.249448	0.202870
Pd	Pd51	0.165970	0.499591	0.202807
Pd	Pd52	0.166088	0.749848	0.202791
Pd	Pd53	0.665857	0.000095	0.202977
Pd	Pd54	0.665272	0.250046	0.203323
Pd	Pd55	0.666061	0.499816	0.202654
Pd	Pd56	0.665583	0.750046	0.203023
Pd	Pd57	0.331485	0.124878	0.236079
Pd	Pd58	0.331137	0.376265	0.237374
Pd	Pd59	0.331407	0.625115	0.236444
Pd	Pd60	0.331544	0.873838	0.236704
Pd	Pd61	0.830475	0.124714	0.236249
Pd	Pd62	0.830629	0.374585	0.235970
Pd	Pd63	0.830979	0.625070	0.235870
Pd	Pd64	0.830771	0.874977	0.236224
Pd	Pd65	0.999160	0.999465	0.268338
Pd	Pd66	0.998505	0.249180	0.268300
Pd	Pd67	0.998764	0.499433	0.268386
Pd	Pd68	0.998944	0.749883	0.268368
Pd	Pd69	0.500153	0.000590	0.268708
Pd	Pd70	0.499419	0.251231	0.269993
Pd	Pd71	0.500732	0.500849	0.269143
Pd	Pd72	0.499656	0.749912	0.269839
Pd	Pd73	0.165096	0.122646	0.307741
Pd	Pd74	0.163359	0.371598	0.307210
Pd	Pd75	0.163669	0.624901	0.306647
Pd	Pd76	0.165942	0.874143	0.307861

Pd	Pd77	0.666020	0.124785	0.308411
Pd	Pd78	0.665684	0.374774	0.308329
Pd	Pd79	0.667595	0.624946	0.307460
Pd	Pd80	0.666571	0.875401	0.308036
Pd	Pd81	0.831166	0.749948	0.338454
Pd	Pd82	0.331812	0.998347	0.338169
Pd	Pd83	0.329702	0.246671	0.338188
Pd	Pd84	0.325569	0.496723	0.338331
Pd	Pd85	0.330536	0.748996	0.340003
Pd	Pd86	0.831082	0.999828	0.338684
Pd	Pd87	0.830539	0.249783	0.338467
Pd	Pd88	0.830917	0.499587	0.338108
Pd	Pd89	0.997622	0.124655	0.368419
Pd	Pd90	0.997319	0.374355	0.368555
Pd	Pd91	0.997705	0.624682	0.368499
Pd	Pd92	0.998152	0.874754	0.368339
Pd	Pd93	0.497969	0.126153	0.368891
Pd	Pd94	0.495589	0.376484	0.371494
Pd	Pd95	0.503058	0.629106	0.371084
Pd	Pd96	0.499347	0.875835	0.368950
C	C97	0.459427	0.506126	0.429134
C	C98	0.352671	0.513632	0.437239
O	O99	0.297836	0.487606	0.476432
H	H100	0.504757	0.495000	0.467907
H	H101	0.310831	0.587109	0.398999

Transition state of R53 $\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166146	0.000034	0.202942
Pd	Pd50	0.166139	0.250036	0.202913
Pd	Pd51	0.166104	0.500105	0.202855
Pd	Pd52	0.166131	0.750093	0.202915
Pd	Pd53	0.665884	0.999931	0.202940
Pd	Pd54	0.665533	0.249991	0.203071
Pd	Pd55	0.665596	0.499982	0.203045
Pd	Pd56	0.665352	0.749988	0.203192
Pd	Pd57	0.331472	0.125241	0.236354
Pd	Pd58	0.331143	0.375011	0.236244
Pd	Pd59	0.331436	0.624884	0.236230
Pd	Pd60	0.331642	0.874817	0.236260
Pd	Pd61	0.830737	0.125033	0.236258
Pd	Pd62	0.831650	0.375025	0.235613
Pd	Pd63	0.830929	0.625201	0.235966
Pd	Pd64	0.830669	0.875110	0.236270
Pd	Pd65	0.999175	0.000075	0.268420
Pd	Pd66	0.999527	0.250084	0.268469
Pd	Pd67	0.999650	0.500094	0.268473
Pd	Pd68	0.999280	0.750068	0.268427
Pd	Pd69	0.499879	0.000125	0.268578
Pd	Pd70	0.499374	0.251099	0.269814
Pd	Pd71	0.500216	0.498658	0.269909
Pd	Pd72	0.499521	0.748023	0.270122
Pd	Pd73	0.165244	0.124951	0.307603
Pd	Pd74	0.165856	0.375291	0.307813
Pd	Pd75	0.165529	0.625188	0.307739
Pd	Pd76	0.165333	0.875038	0.307616
Pd	Pd77	0.666022	0.124674	0.308153
Pd	Pd78	0.667044	0.374880	0.307128

Pd	Pd79	0.666277	0.625189	0.308012
Pd	Pd80	0.665971	0.875237	0.308207
Pd	Pd81	0.830821	0.750258	0.338406
Pd	Pd82	0.330215	0.000138	0.338335
Pd	Pd83	0.329713	0.249682	0.338625
Pd	Pd84	0.330635	0.500126	0.337641
Pd	Pd85	0.329784	0.750644	0.338509
Pd	Pd86	0.830916	0.000137	0.338655
Pd	Pd87	0.830865	0.250224	0.338232
Pd	Pd88	0.830758	0.500193	0.338103
Pd	Pd89	0.997693	0.125160	0.368450
Pd	Pd90	0.997959	0.375159	0.368398
Pd	Pd91	0.997734	0.625311	0.368428
Pd	Pd92	0.997807	0.875177	0.368411
Pd	Pd93	0.497295	0.123526	0.368721
Pd	Pd94	0.499317	0.372887	0.371623
Pd	Pd95	0.496641	0.627905	0.370817
Pd	Pd96	0.497361	0.875987	0.368455
C	C97	0.477092	0.568782	0.454193
C	C98	0.534999	0.456963	0.450975
O	O99	0.612701	0.426911	0.472846
H	H100	0.396957	0.554769	0.459104
H	H101	0.509478	0.637556	0.482547
H	H102	0.464363	0.345461	0.436369

Transition state of R54 $\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166008	0.999992	0.202933
Pd	Pd50	0.166177	0.249901	0.202946
Pd	Pd51	0.165943	0.500033	0.202924
Pd	Pd52	0.166252	0.749904	0.202957
Pd	Pd53	0.666034	0.999546	0.202882
Pd	Pd54	0.665450	0.249526	0.202689
Pd	Pd55	0.665641	0.500469	0.203230
Pd	Pd56	0.665930	0.749634	0.203527
Pd	Pd57	0.331425	0.125275	0.236274
Pd	Pd58	0.331287	0.375424	0.236009
Pd	Pd59	0.331613	0.624666	0.236322
Pd	Pd60	0.331266	0.874724	0.236295
Pd	Pd61	0.830827	0.125007	0.236205
Pd	Pd62	0.831032	0.374858	0.236011
Pd	Pd63	0.831152	0.624814	0.236192
Pd	Pd64	0.830996	0.874936	0.236364
Pd	Pd65	0.999275	0.000045	0.268326
Pd	Pd66	0.999717	0.249833	0.268420
Pd	Pd67	0.999805	0.499832	0.268499
Pd	Pd68	0.999881	0.749707	0.268441
Pd	Pd69	0.499928	0.000362	0.268090
Pd	Pd70	0.499395	0.251371	0.269765
Pd	Pd71	0.499925	0.499731	0.269868
Pd	Pd72	0.499893	0.750301	0.269057
Pd	Pd73	0.166125	0.124715	0.307879
Pd	Pd74	0.165981	0.374362	0.307729
Pd	Pd75	0.166256	0.624616	0.307962
Pd	Pd76	0.165786	0.874970	0.307599
Pd	Pd77	0.666489	0.124419	0.308028
Pd	Pd78	0.666809	0.373107	0.306597
Pd	Pd79	0.667039	0.624832	0.309321

Pd	Pd80	0.666547	0.875834	0.308603
Pd	Pd81	0.832261	0.750086	0.338491
Pd	Pd82	0.330630	0.999677	0.338353
Pd	Pd83	0.332407	0.250510	0.337922
Pd	Pd84	0.331318	0.498885	0.338285
Pd	Pd85	0.331251	0.748561	0.338380
Pd	Pd86	0.831523	0.999794	0.338658
Pd	Pd87	0.831645	0.249413	0.338457
Pd	Pd88	0.832273	0.499009	0.338421
Pd	Pd89	0.998599	0.124573	0.368410
Pd	Pd90	0.998637	0.374352	0.368529
Pd	Pd91	0.998540	0.624722	0.368484
Pd	Pd92	0.998740	0.875111	0.368430
Pd	Pd93	0.498473	0.121817	0.368540
Pd	Pd94	0.501010	0.367907	0.371715
Pd	Pd95	0.494431	0.629988	0.372124
Pd	Pd96	0.497532	0.877191	0.368362
C	C97	0.610057	0.649863	0.483153
C	C98	0.583291	0.564857	0.435497
O	O99	0.574304	0.452114	0.443499
H	H100	0.552335	0.645732	0.516203
H	H101	0.680858	0.620087	0.502131
H	H102	0.617829	0.743316	0.467445
H	H103	0.628850	0.596751	0.386136

Transition state of R55 CCHO* + H* = CCH₂O* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165900	0.999956	0.202719
Pd	Pd50	0.165957	0.249696	0.202664
Pd	Pd51	0.165961	0.499996	0.202559
Pd	Pd52	0.165930	0.750160	0.202693
Pd	Pd53	0.666091	0.000306	0.202840
Pd	Pd54	0.665550	0.251070	0.203742
Pd	Pd55	0.664977	0.500373	0.203555
Pd	Pd56	0.666052	0.749533	0.203448
Pd	Pd57	0.331259	0.124799	0.236088
Pd	Pd58	0.331082	0.374920	0.235642
Pd	Pd59	0.331135	0.624864	0.235818
Pd	Pd60	0.330941	0.875003	0.236080
Pd	Pd61	0.831075	0.125414	0.236121
Pd	Pd62	0.830624	0.375423	0.236854
Pd	Pd63	0.830706	0.624672	0.236950
Pd	Pd64	0.831224	0.874929	0.236174
Pd	Pd65	0.999756	0.999968	0.268259
Pd	Pd66	0.999752	0.249609	0.268466
Pd	Pd67	0.998175	0.500041	0.269186
Pd	Pd68	0.999932	0.750226	0.268516
Pd	Pd69	0.499753	0.000041	0.268315
Pd	Pd70	0.499295	0.250778	0.269771
Pd	Pd71	0.497565	0.499107	0.270282
Pd	Pd72	0.499308	0.750228	0.268576
Pd	Pd73	0.166580	0.124357	0.307497
Pd	Pd74	0.165725	0.374257	0.306762
Pd	Pd75	0.166009	0.625000	0.306900
Pd	Pd76	0.166054	0.875470	0.307472
Pd	Pd77	0.666828	0.125241	0.307908
Pd	Pd78	0.663848	0.373877	0.310403
Pd	Pd79	0.664668	0.629617	0.310178

Pd	Pd80	0.667019	0.876895	0.307832
Pd	Pd81	0.834336	0.753258	0.338855
Pd	Pd82	0.331079	0.999032	0.338264
Pd	Pd83	0.331975	0.250786	0.337393
Pd	Pd84	0.329709	0.499238	0.337919
Pd	Pd85	0.330967	0.748555	0.337760
Pd	Pd86	0.832495	0.000651	0.338046
Pd	Pd87	0.833635	0.247917	0.338838
Pd	Pd88	0.834719	0.500169	0.344043
Pd	Pd89	0.000911	0.124143	0.368608
Pd	Pd90	0.001470	0.373871	0.368777
Pd	Pd91	0.001435	0.626359	0.368782
Pd	Pd92	0.000729	0.876300	0.368787
Pd	Pd93	0.498054	0.121871	0.368470
Pd	Pd94	0.493251	0.367518	0.375126
Pd	Pd95	0.494938	0.629323	0.371994
Pd	Pd96	0.498562	0.874951	0.368442
C	C97	0.695379	0.501831	0.366519
C	C98	0.649389	0.504864	0.423783
O	O99	0.591955	0.416750	0.440278
H	H100	0.691430	0.553629	0.457306
H	H101	0.589328	0.629168	0.415700

Transition state of R56 CHCHO* + H* = CHCH₂O* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165885	0.999691	0.202839
Pd	Pd50	0.166051	0.249749	0.202833
Pd	Pd51	0.165774	0.499862	0.202832
Pd	Pd52	0.165911	0.749969	0.202920
Pd	Pd53	0.665778	0.000393	0.202484
Pd	Pd54	0.665415	0.251014	0.203698
Pd	Pd55	0.665489	0.499883	0.204116
Pd	Pd56	0.666026	0.749628	0.203214
Pd	Pd57	0.330924	0.125013	0.236082
Pd	Pd58	0.331307	0.375099	0.235962
Pd	Pd59	0.330918	0.624722	0.235972
Pd	Pd60	0.330857	0.874753	0.236233
Pd	Pd61	0.830754	0.125016	0.236026
Pd	Pd62	0.830861	0.374928	0.236419
Pd	Pd63	0.831754	0.624544	0.236097
Pd	Pd64	0.830836	0.875017	0.236055
Pd	Pd65	0.999134	0.999881	0.268349
Pd	Pd66	0.999644	0.249617	0.268386
Pd	Pd67	0.999075	0.499686	0.269053
Pd	Pd68	0.999790	0.750111	0.268432
Pd	Pd69	0.499092	0.000409	0.268229
Pd	Pd70	0.499708	0.250499	0.269286
Pd	Pd71	0.499452	0.500498	0.269948
Pd	Pd72	0.498766	0.750305	0.268855
Pd	Pd73	0.164992	0.123833	0.307472
Pd	Pd74	0.165967	0.374155	0.307400
Pd	Pd75	0.165010	0.624991	0.307596
Pd	Pd76	0.165469	0.874670	0.307768
Pd	Pd77	0.666005	0.123512	0.307757
Pd	Pd78	0.667209	0.374189	0.311302
Pd	Pd79	0.666678	0.629870	0.306764
Pd	Pd80	0.665772	0.877275	0.307711
Pd	Pd81	0.832567	0.751563	0.337812

Pd	Pd82	0.329898	0.999978	0.338217
Pd	Pd83	0.330680	0.250257	0.337798
Pd	Pd84	0.329707	0.499428	0.337838
Pd	Pd85	0.330438	0.748007	0.338049
Pd	Pd86	0.831743	0.000306	0.338324
Pd	Pd87	0.833456	0.248176	0.338066
Pd	Pd88	0.833485	0.499774	0.340456
Pd	Pd89	0.999340	0.124310	0.368834
Pd	Pd90	0.000350	0.374269	0.368748
Pd	Pd91	0.999163	0.625828	0.368987
Pd	Pd92	0.998622	0.875456	0.368642
Pd	Pd93	0.496375	0.123716	0.368453
Pd	Pd94	0.495199	0.374157	0.372486
Pd	Pd95	0.490661	0.627140	0.372276
Pd	Pd96	0.496103	0.875623	0.368014
C	C97	0.639527	0.388600	0.396261
C	C98	0.670376	0.503201	0.422066
O	O99	0.636718	0.610786	0.406043
H	H100	0.667547	0.308583	0.419476
H	H101	0.693573	0.498796	0.467265
H	H102	0.779711	0.502084	0.403154

Transition state of R57 $\text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + ^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447

Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165777	0.999957	0.202957
Pd	Pd50	0.165961	0.250209	0.202925
Pd	Pd51	0.165888	0.499953	0.202967
Pd	Pd52	0.165890	0.749564	0.202951
Pd	Pd53	0.665802	0.999939	0.202916
Pd	Pd54	0.665197	0.250177	0.203184
Pd	Pd55	0.665436	0.500063	0.203055
Pd	Pd56	0.665273	0.749878	0.203242
Pd	Pd57	0.330987	0.125006	0.235845
Pd	Pd58	0.330771	0.375612	0.236980
Pd	Pd59	0.330783	0.624053	0.236935
Pd	Pd60	0.330704	0.874467	0.235926
Pd	Pd61	0.830145	0.124961	0.236154
Pd	Pd62	0.830335	0.374930	0.235993
Pd	Pd63	0.830330	0.625007	0.236028
Pd	Pd64	0.830233	0.874934	0.236218
Pd	Pd65	0.998519	0.000037	0.268300
Pd	Pd66	0.998424	0.249866	0.268267
Pd	Pd67	0.998678	0.499921	0.268300
Pd	Pd68	0.998424	0.749870	0.268276
Pd	Pd69	0.499356	0.999553	0.268186
Pd	Pd70	0.498977	0.250523	0.269582
Pd	Pd71	0.499493	0.499453	0.269754
Pd	Pd72	0.498525	0.749028	0.269296
Pd	Pd73	0.164507	0.125005	0.307649
Pd	Pd74	0.164497	0.374878	0.307750
Pd	Pd75	0.164309	0.625078	0.307859
Pd	Pd76	0.164128	0.874976	0.307632
Pd	Pd77	0.665421	0.124561	0.308003
Pd	Pd78	0.664446	0.375168	0.307997
Pd	Pd79	0.664378	0.624942	0.308191
Pd	Pd80	0.665139	0.874736	0.308159
Pd	Pd81	0.829614	0.749711	0.338414
Pd	Pd82	0.329642	0.999652	0.337749

Pd	Pd83	0.329121	0.247978	0.337632
Pd	Pd84	0.329014	0.500147	0.340323
Pd	Pd85	0.328504	0.751555	0.337968
Pd	Pd86	0.830019	0.999882	0.338429
Pd	Pd87	0.829688	0.250094	0.338317
Pd	Pd88	0.829525	0.499849	0.338177
Pd	Pd89	0.996576	0.125004	0.368234
Pd	Pd90	0.996689	0.374834	0.368174
Pd	Pd91	0.996376	0.624890	0.368204
Pd	Pd92	0.996546	0.874806	0.368242
Pd	Pd93	0.497371	0.121221	0.368214
Pd	Pd94	0.498734	0.368341	0.371084
Pd	Pd95	0.493614	0.626397	0.371015
Pd	Pd96	0.496552	0.874788	0.368132
C	C97	0.434618	0.601502	0.451184
C	C98	0.379759	0.484881	0.453548
O	O99	0.427756	0.381254	0.448770
H	H100	0.506289	0.595236	0.473763
H	H101	0.390064	0.680720	0.463739
H	H102	0.315200	0.481797	0.483207
H	H103	0.305076	0.493623	0.409199

Transition state of R58 $\text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + ^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447

Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165844	0.999690	0.202931
Pd	Pd50	0.165925	0.249588	0.202884
Pd	Pd51	0.165820	0.499722	0.202849
Pd	Pd52	0.165930	0.749835	0.202916
Pd	Pd53	0.665754	0.000130	0.203041
Pd	Pd54	0.665115	0.249904	0.203258
Pd	Pd55	0.665439	0.499913	0.202941
Pd	Pd56	0.665621	0.750287	0.202908
Pd	Pd57	0.331341	0.124754	0.236158
Pd	Pd58	0.331066	0.374709	0.236035
Pd	Pd59	0.330796	0.624564	0.236208
Pd	Pd60	0.330881	0.874594	0.236274
Pd	Pd61	0.830371	0.125019	0.236270
Pd	Pd62	0.830566	0.374837	0.236034
Pd	Pd63	0.831202	0.624887	0.235731
Pd	Pd64	0.830491	0.874988	0.236316
Pd	Pd65	0.998807	0.999908	0.268430
Pd	Pd66	0.998879	0.249857	0.268417
Pd	Pd67	0.999048	0.499779	0.268449
Pd	Pd68	0.999158	0.749857	0.268449
Pd	Pd69	0.499518	0.999845	0.268535
Pd	Pd70	0.499001	0.252128	0.270631
Pd	Pd71	0.499582	0.500427	0.269382
Pd	Pd72	0.498844	0.749389	0.269013
Pd	Pd73	0.164934	0.124445	0.307638
Pd	Pd74	0.165004	0.374139	0.307566
Pd	Pd75	0.165031	0.624146	0.307759
Pd	Pd76	0.164916	0.874667	0.307744
Pd	Pd77	0.665683	0.124872	0.308299
Pd	Pd78	0.665942	0.375162	0.307855
Pd	Pd79	0.666503	0.625328	0.306840
Pd	Pd80	0.665560	0.875226	0.308331
Pd	Pd81	0.830388	0.749911	0.338310
Pd	Pd82	0.329908	0.999223	0.338338

Pd	Pd83	0.330190	0.248786	0.338069
Pd	Pd84	0.330009	0.498342	0.337435
Pd	Pd85	0.328695	0.749627	0.338553
Pd	Pd86	0.830506	0.000041	0.338645
Pd	Pd87	0.830544	0.250031	0.338468
Pd	Pd88	0.830404	0.500025	0.338257
Pd	Pd89	0.997366	0.124903	0.368472
Pd	Pd90	0.997379	0.374850	0.368496
Pd	Pd91	0.997112	0.624925	0.368404
Pd	Pd92	0.997073	0.874870	0.368444
Pd	Pd93	0.497292	0.121806	0.368643
Pd	Pd94	0.499725	0.373273	0.371130
Pd	Pd95	0.496491	0.626472	0.369008
Pd	Pd96	0.496703	0.874143	0.368662
C	C97	0.628121	0.564338	0.471493
C	C98	0.518237	0.536312	0.468541
O	O99	0.486186	0.428969	0.454375
H	H100	0.658102	0.518369	0.509566
H	H101	0.668110	0.529478	0.434048
H	H102	0.641669	0.662482	0.475494
H	H103	0.472803	0.579649	0.502352
H	H104	0.467816	0.652627	0.434145

Transition state of R59 CCOH* + H* = CCHOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166253	0.000174	0.203014
Pd	Pd50	0.166079	0.249936	0.203024
Pd	Pd51	0.165418	0.500198	0.202972
Pd	Pd52	0.166038	0.750362	0.202939
Pd	Pd53	0.666303	0.000166	0.202810
Pd	Pd54	0.665839	0.250144	0.203146
Pd	Pd55	0.665608	0.500174	0.202572
Pd	Pd56	0.666084	0.750056	0.203069
Pd	Pd57	0.331374	0.125456	0.236533
Pd	Pd58	0.330723	0.375723	0.236105
Pd	Pd59	0.330592	0.625176	0.235983
Pd	Pd60	0.331383	0.875128	0.236420
Pd	Pd61	0.831385	0.125213	0.236294
Pd	Pd62	0.831351	0.375724	0.237124
Pd	Pd63	0.831683	0.624376	0.237017
Pd	Pd64	0.831525	0.874769	0.236198
Pd	Pd65	0.000092	0.999973	0.268395
Pd	Pd66	0.999853	0.249638	0.268600
Pd	Pd67	0.997089	0.500056	0.269814
Pd	Pd68	0.000405	0.750250	0.268667
Pd	Pd69	0.499960	0.000078	0.268572
Pd	Pd70	0.499075	0.250522	0.269059
Pd	Pd71	0.497556	0.501415	0.269519
Pd	Pd72	0.499114	0.750201	0.269466
Pd	Pd73	0.166369	0.124542	0.307898
Pd	Pd74	0.165349	0.374678	0.307492
Pd	Pd75	0.165791	0.625432	0.307805
Pd	Pd76	0.166817	0.875589	0.307886
Pd	Pd77	0.667128	0.123111	0.308021
Pd	Pd78	0.665641	0.369437	0.306662
Pd	Pd79	0.665319	0.629317	0.306933
Pd	Pd80	0.667137	0.876240	0.307860
Pd	Pd81	0.833791	0.752384	0.338848

Pd	Pd82	0.332210	0.000804	0.338716
Pd	Pd83	0.333028	0.252920	0.338337
Pd	Pd84	0.330113	0.500702	0.338471
Pd	Pd85	0.333419	0.748073	0.338164
Pd	Pd86	0.832782	0.999780	0.338158
Pd	Pd87	0.833602	0.247389	0.339084
Pd	Pd88	0.827290	0.499814	0.348119
Pd	Pd89	0.000462	0.124134	0.368821
Pd	Pd90	0.998641	0.374549	0.368718
Pd	Pd91	0.998776	0.625329	0.368802
Pd	Pd92	0.000664	0.875737	0.368799
Pd	Pd93	0.499406	0.126666	0.368666
Pd	Pd94	0.500449	0.378927	0.372254
Pd	Pd95	0.497258	0.629035	0.376302
Pd	Pd96	0.499289	0.877091	0.368739
C	C97	0.682894	0.499398	0.364207
C	C98	0.606028	0.501278	0.407693
O	O99	0.632523	0.463902	0.461500
H	H100	0.574255	0.470293	0.486071
H	H101	0.588131	0.637655	0.420059

Transition state of R60 CHCOH* + H* = CHCHOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165841	0.999663	0.202772
Pd	Pd50	0.166128	0.249608	0.202795
Pd	Pd51	0.165815	0.499818	0.202743
Pd	Pd52	0.166089	0.749943	0.202780
Pd	Pd53	0.665923	0.000570	0.202882
Pd	Pd54	0.665522	0.251207	0.204152
Pd	Pd55	0.665920	0.499525	0.203481
Pd	Pd56	0.665722	0.749575	0.203596
Pd	Pd57	0.331060	0.124745	0.236149
Pd	Pd58	0.331279	0.374936	0.236052
Pd	Pd59	0.331108	0.624349	0.236113
Pd	Pd60	0.330849	0.874673	0.236228
Pd	Pd61	0.830702	0.125460	0.236367
Pd	Pd62	0.830910	0.375401	0.236827
Pd	Pd63	0.832021	0.625262	0.235978
Pd	Pd64	0.830856	0.875652	0.236329
Pd	Pd65	0.998960	0.000066	0.268372
Pd	Pd66	0.999742	0.249922	0.268403
Pd	Pd67	0.999433	0.500037	0.268745
Pd	Pd68	0.000106	0.750361	0.268482
Pd	Pd69	0.499508	0.000159	0.268395
Pd	Pd70	0.500110	0.249556	0.269186
Pd	Pd71	0.499446	0.499584	0.269043
Pd	Pd72	0.498785	0.750864	0.268868
Pd	Pd73	0.165020	0.123253	0.307307
Pd	Pd74	0.165804	0.374158	0.307003
Pd	Pd75	0.166092	0.625473	0.307239
Pd	Pd76	0.165511	0.875117	0.307584
Pd	Pd77	0.666592	0.124507	0.308811
Pd	Pd78	0.668173	0.373594	0.312641
Pd	Pd79	0.666975	0.631283	0.306433
Pd	Pd80	0.666790	0.879075	0.308548
Pd	Pd81	0.834645	0.753567	0.338761
Pd	Pd82	0.330674	0.998464	0.338329
Pd	Pd83	0.330772	0.249612	0.337497

Pd	Pd84	0.329262	0.499800	0.338636
Pd	Pd85	0.332502	0.747460	0.338155
Pd	Pd86	0.832478	0.001253	0.338826
Pd	Pd87	0.834291	0.249102	0.338865
Pd	Pd88	0.835127	0.501829	0.340084
Pd	Pd89	0.000196	0.125077	0.368946
Pd	Pd90	0.000675	0.374791	0.368782
Pd	Pd91	0.001266	0.626511	0.368844
Pd	Pd92	0.000262	0.876701	0.368946
Pd	Pd93	0.497047	0.121566	0.368751
Pd	Pd94	0.493528	0.371870	0.370751
Pd	Pd95	0.500101	0.623448	0.370797
Pd	Pd96	0.498464	0.874736	0.368677
C	C97	0.631789	0.425946	0.393002
C	C98	0.636113	0.556734	0.399548
O	O99	0.651159	0.600572	0.454071
H	H100	0.659275	0.370260	0.428687
H	H101	0.654667	0.689445	0.452029
H	H102	0.719507	0.593394	0.372364

Transition state of R61 $\text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165946	0.000039	0.202919
Pd	Pd50	0.165968	0.250237	0.202929
Pd	Pd51	0.165932	0.500026	0.202921
Pd	Pd52	0.166131	0.749785	0.202931
Pd	Pd53	0.665681	0.000070	0.203089
Pd	Pd54	0.665413	0.250106	0.203202
Pd	Pd55	0.665700	0.499883	0.202917
Pd	Pd56	0.665332	0.750016	0.203199
Pd	Pd57	0.331203	0.125524	0.235956
Pd	Pd58	0.330700	0.376320	0.236875
Pd	Pd59	0.330747	0.623821	0.237435
Pd	Pd60	0.331253	0.874588	0.235927
Pd	Pd61	0.830252	0.125016	0.236368
Pd	Pd62	0.830444	0.374832	0.236077
Pd	Pd63	0.831372	0.625147	0.235542
Pd	Pd64	0.830299	0.875224	0.236271
Pd	Pd65	0.998493	0.999986	0.268406
Pd	Pd66	0.998311	0.249987	0.268348
Pd	Pd67	0.998897	0.500126	0.268428
Pd	Pd68	0.998696	0.750363	0.268361
Pd	Pd69	0.499641	0.000401	0.268596
Pd	Pd70	0.499227	0.251768	0.269243
Pd	Pd71	0.499610	0.502003	0.269440
Pd	Pd72	0.499703	0.749635	0.270314
Pd	Pd73	0.164216	0.124591	0.307518
Pd	Pd74	0.163383	0.373998	0.307612
Pd	Pd75	0.164112	0.625826	0.307544
Pd	Pd76	0.164706	0.875595	0.307512
Pd	Pd77	0.665219	0.125356	0.308429
Pd	Pd78	0.664941	0.374934	0.308421
Pd	Pd79	0.666901	0.625295	0.307063
Pd	Pd80	0.665798	0.875886	0.308408
Pd	Pd81	0.830361	0.750172	0.338290
Pd	Pd82	0.330376	0.000851	0.337865
Pd	Pd83	0.329352	0.249532	0.337453
Pd	Pd84	0.325501	0.498928	0.341619

Pd	Pd85	0.329654	0.751896	0.337778
Pd	Pd86	0.830275	0.000438	0.338738
Pd	Pd87	0.829769	0.250382	0.338640
Pd	Pd88	0.830096	0.500203	0.338076
Pd	Pd89	0.996799	0.125375	0.368436
Pd	Pd90	0.996353	0.375189	0.368525
Pd	Pd91	0.997110	0.625344	0.368403
Pd	Pd92	0.997020	0.875273	0.368464
Pd	Pd93	0.496937	0.128342	0.368357
Pd	Pd94	0.495625	0.381255	0.370453
Pd	Pd95	0.501866	0.631830	0.372084
Pd	Pd96	0.497309	0.879786	0.369079
C	C97	0.343854	0.495889	0.429914
C	C98	0.451994	0.511795	0.432873
O	O99	0.498520	0.468402	0.480883
H	H100	0.316184	0.412730	0.450361
H	H101	0.298964	0.576809	0.439779
H	H102	0.570253	0.479667	0.476596
H	H103	0.470699	0.653756	0.437442

Transition state of R62 $\text{CH}_3\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166033	0.999502	0.202917
Pd	Pd50	0.165967	0.249497	0.202868
Pd	Pd51	0.165962	0.499727	0.202868
Pd	Pd52	0.165949	0.749770	0.202937
Pd	Pd53	0.665750	0.999960	0.203045
Pd	Pd54	0.665370	0.249743	0.202955
Pd	Pd55	0.665669	0.500199	0.202842
Pd	Pd56	0.665508	0.750186	0.203077
Pd	Pd57	0.331206	0.124625	0.236281
Pd	Pd58	0.330837	0.374588	0.236040
Pd	Pd59	0.331198	0.624519	0.236180
Pd	Pd60	0.331577	0.874259	0.236344
Pd	Pd61	0.830521	0.124898	0.236306
Pd	Pd62	0.831544	0.374915	0.235701
Pd	Pd63	0.830691	0.625019	0.236190
Pd	Pd64	0.830491	0.874933	0.236444
Pd	Pd65	0.998946	0.999693	0.268392
Pd	Pd66	0.999210	0.249646	0.268487
Pd	Pd67	0.999437	0.499782	0.268551
Pd	Pd68	0.998950	0.749696	0.268446
Pd	Pd69	0.499651	0.000007	0.268741
Pd	Pd70	0.499008	0.251565	0.270202
Pd	Pd71	0.499600	0.499040	0.269425
Pd	Pd72	0.499674	0.748247	0.269615
Pd	Pd73	0.164926	0.123515	0.307575
Pd	Pd74	0.165135	0.373768	0.307645
Pd	Pd75	0.164941	0.624938	0.307621
Pd	Pd76	0.165222	0.874530	0.307642
Pd	Pd77	0.665900	0.124633	0.308212
Pd	Pd78	0.667794	0.374725	0.306504
Pd	Pd79	0.666070	0.625343	0.307917
Pd	Pd80	0.665801	0.875146	0.308460
Pd	Pd81	0.830634	0.749849	0.338706
Pd	Pd82	0.330670	0.998646	0.338503
Pd	Pd83	0.329720	0.248737	0.338259
Pd	Pd84	0.328990	0.499159	0.337544

Pd	Pd85	0.330469	0.748356	0.338532
Pd	Pd86	0.830821	0.999892	0.338719
Pd	Pd87	0.830793	0.250020	0.338538
Pd	Pd88	0.830588	0.500011	0.338591
Pd	Pd89	0.997511	0.124735	0.368447
Pd	Pd90	0.997603	0.374814	0.368494
Pd	Pd91	0.997283	0.624778	0.368504
Pd	Pd92	0.997691	0.874725	0.368401
Pd	Pd93	0.497393	0.122626	0.368907
Pd	Pd94	0.500602	0.371481	0.370486
Pd	Pd95	0.498211	0.621168	0.371485
Pd	Pd96	0.497574	0.872742	0.368571
C	C97	0.459969	0.531890	0.484490
C	C98	0.529284	0.497158	0.436509
O	O99	0.626058	0.513573	0.452575
H	H100	0.467702	0.629584	0.494038
H	H101	0.479362	0.480874	0.523333
H	H102	0.382729	0.512204	0.472955
H	H103	0.670210	0.493928	0.420210
H	H104	0.511883	0.360218	0.438418

Transition state of R63 CCHOH* + H* = CCH₂OH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166127	0.998743	0.202872
Pd	Pd50	0.166057	0.248751	0.202875
Pd	Pd51	0.165680	0.499231	0.202792
Pd	Pd52	0.166109	0.749122	0.202721
Pd	Pd53	0.666402	0.001656	0.202903
Pd	Pd54	0.665791	0.252224	0.204403
Pd	Pd55	0.665299	0.500414	0.203097
Pd	Pd56	0.666331	0.751200	0.202612
Pd	Pd57	0.331332	0.122644	0.235992
Pd	Pd58	0.330595	0.373775	0.235949
Pd	Pd59	0.331095	0.623736	0.235859
Pd	Pd60	0.331273	0.872848	0.236354
Pd	Pd61	0.831193	0.126318	0.236367
Pd	Pd62	0.830295	0.376589	0.237586
Pd	Pd63	0.832486	0.625422	0.236469
Pd	Pd64	0.831907	0.875931	0.236128
Pd	Pd65	0.000340	0.000203	0.268443
Pd	Pd66	0.999447	0.249825	0.268505
Pd	Pd67	0.997780	0.500299	0.269421
Pd	Pd68	0.001300	0.750477	0.268670
Pd	Pd69	0.500147	0.998765	0.268518
Pd	Pd70	0.499148	0.249201	0.268999
Pd	Pd71	0.497593	0.498878	0.269938
Pd	Pd72	0.499535	0.749014	0.268952
Pd	Pd73	0.166189	0.122143	0.307716
Pd	Pd74	0.164662	0.373491	0.307272
Pd	Pd75	0.167180	0.623578	0.307755
Pd	Pd76	0.167351	0.872688	0.307957
Pd	Pd77	0.666446	0.126502	0.308675
Pd	Pd78	0.662687	0.376000	0.312509
Pd	Pd79	0.667645	0.633386	0.305289
Pd	Pd80	0.667879	0.878766	0.307640
Pd	Pd81	0.835230	0.755381	0.338610
Pd	Pd82	0.331738	0.995193	0.338442
Pd	Pd83	0.329193	0.246103	0.337124

Pd	Pd84	0.331123	0.497788	0.338033
Pd	Pd85	0.335488	0.744163	0.338648
Pd	Pd86	0.832940	0.002472	0.338251
Pd	Pd87	0.832662	0.249939	0.339104
Pd	Pd88	0.829976	0.503058	0.345668
Pd	Pd89	0.000353	0.126177	0.368755
Pd	Pd90	0.998580	0.375856	0.368692
Pd	Pd91	0.000399	0.626989	0.368697
Pd	Pd92	0.001260	0.877709	0.368912
Pd	Pd93	0.497249	0.119581	0.368613
Pd	Pd94	0.490147	0.363220	0.371556
Pd	Pd95	0.504906	0.621314	0.373291
Pd	Pd96	0.500612	0.872739	0.368897
C	C97	0.686516	0.512722	0.365937
C	C98	0.640647	0.539851	0.421054
O	O99	0.605047	0.435808	0.450129
H	H100	0.689377	0.596916	0.447558
H	H101	0.572661	0.462022	0.485215
H	H102	0.562846	0.651527	0.430378

Transition state of R64 CHCHOH* + H* = CHCH₂OH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165988	0.000204	0.202937
Pd	Pd50	0.165981	0.250351	0.203268
Pd	Pd51	0.165912	0.499836	0.203153
Pd	Pd52	0.166175	0.749996	0.202844
Pd	Pd53	0.665771	0.000005	0.203075
Pd	Pd54	0.665403	0.250060	0.203292
Pd	Pd55	0.666279	0.500051	0.202766
Pd	Pd56	0.665253	0.749986	0.203363
Pd	Pd57	0.331436	0.125072	0.235898
Pd	Pd58	0.331171	0.374877	0.236206
Pd	Pd59	0.331521	0.624082	0.236905
Pd	Pd60	0.331311	0.874733	0.236020
Pd	Pd61	0.830518	0.124919	0.236234
Pd	Pd62	0.830910	0.374857	0.235947
Pd	Pd63	0.830679	0.625312	0.236015
Pd	Pd64	0.830371	0.875153	0.236279
Pd	Pd65	0.998767	0.000250	0.268417
Pd	Pd66	0.998917	0.250155	0.268558
Pd	Pd67	0.999157	0.499978	0.268580
Pd	Pd68	0.998569	0.750342	0.268325
Pd	Pd69	0.500096	0.999857	0.268854
Pd	Pd70	0.499665	0.250484	0.270054
Pd	Pd71	0.500681	0.499927	0.269158
Pd	Pd72	0.499314	0.749351	0.269954
Pd	Pd73	0.165084	0.124448	0.307851
Pd	Pd74	0.163920	0.373807	0.308958
Pd	Pd75	0.164035	0.627445	0.307106
Pd	Pd76	0.164828	0.876101	0.307665
Pd	Pd77	0.666007	0.124771	0.308395
Pd	Pd78	0.665824	0.375060	0.308096
Pd	Pd79	0.665314	0.625143	0.308331
Pd	Pd80	0.665892	0.875072	0.308525
Pd	Pd81	0.830524	0.749844	0.338514
Pd	Pd82	0.331540	0.000457	0.337991
Pd	Pd83	0.330873	0.246949	0.337849
Pd	Pd84	0.328470	0.500816	0.337639

Pd	Pd85	0.330207	0.753113	0.338178
Pd	Pd86	0.830797	0.999969	0.338640
Pd	Pd87	0.830523	0.250184	0.338356
Pd	Pd88	0.830404	0.500170	0.338116
Pd	Pd89	0.997423	0.125147	0.368511
Pd	Pd90	0.996434	0.375327	0.369024
Pd	Pd91	0.997445	0.625141	0.368554
Pd	Pd92	0.997528	0.874859	0.368469
Pd	Pd93	0.498601	0.125039	0.369272
Pd	Pd94	0.496840	0.373773	0.372298
Pd	Pd95	0.495627	0.624856	0.372698
Pd	Pd96	0.498082	0.874412	0.369101
C	C97	0.438686	0.497890	0.425235
C	C98	0.329394	0.493553	0.433354
O	O99	0.288981	0.600976	0.454917
H	H100	0.483475	0.504814	0.464735
H	H101	0.305740	0.411364	0.456701
H	H102	0.216545	0.593837	0.455986
H	H103	0.258523	0.444835	0.387644

Transition state of R65 $\text{CH}_2\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166226	0.000086	0.203036
Pd	Pd50	0.166276	0.249967	0.203039
Pd	Pd51	0.165770	0.499993	0.202916
Pd	Pd52	0.166028	0.750260	0.202979
Pd	Pd53	0.665947	0.000125	0.202947
Pd	Pd54	0.665746	0.249614	0.203043
Pd	Pd55	0.665742	0.499720	0.203103
Pd	Pd56	0.665374	0.750513	0.202871
Pd	Pd57	0.331709	0.125081	0.236388
Pd	Pd58	0.331331	0.375337	0.236032
Pd	Pd59	0.331103	0.624895	0.236076
Pd	Pd60	0.331502	0.874605	0.236520
Pd	Pd61	0.830942	0.125022	0.236325
Pd	Pd62	0.831238	0.374993	0.236176
Pd	Pd63	0.830751	0.625058	0.236104
Pd	Pd64	0.830714	0.875082	0.236279
Pd	Pd65	0.999214	1.000000	0.268392
Pd	Pd66	0.999918	0.250100	0.268553
Pd	Pd67	0.999571	0.500062	0.268568
Pd	Pd68	0.999395	0.750071	0.268426
Pd	Pd69	0.500053	0.999565	0.268408
Pd	Pd70	0.500000	0.250432	0.269368
Pd	Pd71	0.499512	0.499755	0.269445
Pd	Pd72	0.499306	0.748304	0.269774
Pd	Pd73	0.165941	0.124916	0.307886
Pd	Pd74	0.166189	0.375005	0.307892
Pd	Pd75	0.165685	0.625702	0.307677
Pd	Pd76	0.165803	0.875681	0.307867
Pd	Pd77	0.666641	0.124450	0.308553
Pd	Pd78	0.666777	0.374555	0.307668
Pd	Pd79	0.665889	0.625953	0.307144
Pd	Pd80	0.666348	0.875574	0.308254
Pd	Pd81	0.831106	0.750489	0.338408
Pd	Pd82	0.331125	0.000057	0.338561
Pd	Pd83	0.332412	0.251830	0.337983
Pd	Pd84	0.331018	0.500575	0.338038

Pd	Pd85	0.331272	0.749065	0.338589
Pd	Pd86	0.831231	0.000271	0.338808
Pd	Pd87	0.831819	0.249979	0.338768
Pd	Pd88	0.831523	0.501010	0.338355
Pd	Pd89	0.998317	0.124982	0.368524
Pd	Pd90	0.998201	0.375090	0.368534
Pd	Pd91	0.998287	0.625547	0.368498
Pd	Pd92	0.998249	0.875271	0.368384
Pd	Pd93	0.498056	0.123008	0.368456
Pd	Pd94	0.496589	0.373554	0.372356
Pd	Pd95	0.501761	0.625052	0.372006
Pd	Pd96	0.498124	0.874666	0.368550
C	C97	0.572707	0.568779	0.446222
C	C98	0.618595	0.448139	0.442715
O	O99	0.722136	0.451348	0.447662
H	H100	0.627497	0.642128	0.451242
H	H101	0.510086	0.573751	0.476073
H	H102	0.583715	0.375779	0.468374
H	H103	0.750839	0.373541	0.435043
H	H104	0.619449	0.400568	0.385779

Transition state of R66 $\text{CH}_3\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165872	0.999909	0.203037
Pd	Pd50	0.165976	0.249791	0.203034
Pd	Pd51	0.165824	0.499889	0.203022
Pd	Pd52	0.165938	0.749891	0.203037
Pd	Pd53	0.665894	0.999859	0.203013
Pd	Pd54	0.665774	0.249513	0.202730
Pd	Pd55	0.665515	0.500000	0.202989
Pd	Pd56	0.665667	0.750102	0.203115
Pd	Pd57	0.331035	0.124723	0.236278
Pd	Pd58	0.331066	0.375053	0.235967
Pd	Pd59	0.331213	0.624674	0.235969
Pd	Pd60	0.331110	0.874454	0.236252
Pd	Pd61	0.830720	0.125113	0.236420
Pd	Pd62	0.830947	0.374886	0.236211
Pd	Pd63	0.830994	0.624758	0.236068
Pd	Pd64	0.830883	0.875022	0.236244
Pd	Pd65	0.999086	0.000115	0.268415
Pd	Pd66	0.999292	0.249882	0.268537
Pd	Pd67	0.999487	0.499941	0.268613
Pd	Pd68	0.999706	0.749812	0.268536
Pd	Pd69	0.499636	0.999718	0.268318
Pd	Pd70	0.499345	0.250262	0.268767
Pd	Pd71	0.499445	0.499766	0.269913
Pd	Pd72	0.499640	0.749159	0.269463
Pd	Pd73	0.165857	0.124752	0.308182
Pd	Pd74	0.165171	0.374354	0.307921
Pd	Pd75	0.166032	0.624793	0.308153
Pd	Pd76	0.165220	0.875128	0.307825
Pd	Pd77	0.665839	0.124771	0.308375
Pd	Pd78	0.666270	0.373315	0.306793
Pd	Pd79	0.666145	0.625090	0.307581
Pd	Pd80	0.666026	0.875969	0.308410
Pd	Pd81	0.831488	0.750086	0.338104
Pd	Pd82	0.330536	0.999147	0.338281
Pd	Pd83	0.331527	0.250587	0.337901

Pd	Pd84	0.331237	0.499743	0.337731
Pd	Pd85	0.331949	0.747895	0.337952
Pd	Pd86	0.830904	0.000109	0.338666
Pd	Pd87	0.830619	0.249948	0.338979
Pd	Pd88	0.830858	0.499502	0.338778
Pd	Pd89	0.997752	0.124903	0.368475
Pd	Pd90	0.997358	0.374758	0.368621
Pd	Pd91	0.997512	0.624789	0.368550
Pd	Pd92	0.997750	0.875174	0.368526
Pd	Pd93	0.497484	0.123422	0.368420
Pd	Pd94	0.498540	0.370586	0.370374
Pd	Pd95	0.497010	0.627919	0.374132
Pd	Pd96	0.497216	0.876490	0.368674
C	C97	0.685975	0.657166	0.465973
C	C98	0.602077	0.579015	0.443554
O	O99	0.620813	0.453285	0.442610
H	H100	0.665518	0.753765	0.462947
H	H101	0.700367	0.633755	0.510788
H	H102	0.754784	0.643697	0.441237
H	H103	0.532641	0.592141	0.467834
H	H104	0.682128	0.437761	0.420352
H	H105	0.622134	0.617806	0.381207

Transition state of R67 CCOO* + H* = CCHOO* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165795	0.000004	0.202751
Pd	Pd50	0.166024	0.250106	0.202856
Pd	Pd51	0.165321	0.500003	0.202889
Pd	Pd52	0.166030	0.749887	0.202862
Pd	Pd53	0.666502	0.999999	0.202639
Pd	Pd54	0.666270	0.249507	0.202488
Pd	Pd55	0.665319	0.500000	0.202484
Pd	Pd56	0.666266	0.750503	0.202486
Pd	Pd57	0.330877	0.125162	0.236065
Pd	Pd58	0.331038	0.375491	0.236108
Pd	Pd59	0.331042	0.624519	0.236103
Pd	Pd60	0.330871	0.874842	0.236068
Pd	Pd61	0.831700	0.125569	0.236173
Pd	Pd62	0.831589	0.376280	0.237369
Pd	Pd63	0.831591	0.623720	0.237357
Pd	Pd64	0.831709	0.874444	0.236171
Pd	Pd65	0.000272	0.000008	0.268445
Pd	Pd66	0.000493	0.250019	0.268746
Pd	Pd67	0.997762	0.499998	0.270247
Pd	Pd68	0.000490	0.749993	0.268744
Pd	Pd69	0.499384	0.000008	0.267832
Pd	Pd70	0.498838	0.249880	0.268946
Pd	Pd71	0.497974	0.500008	0.270979
Pd	Pd72	0.498849	0.750136	0.268951
Pd	Pd73	0.166634	0.125194	0.307578
Pd	Pd74	0.167192	0.375831	0.307704
Pd	Pd75	0.167187	0.624166	0.307703
Pd	Pd76	0.166636	0.874824	0.307580
Pd	Pd77	0.667106	0.123113	0.307573
Pd	Pd78	0.664611	0.368142	0.305696
Pd	Pd79	0.664608	0.631925	0.305682
Pd	Pd80	0.667120	0.876916	0.307577
Pd	Pd81	0.834420	0.752548	0.338892

Pd	Pd82	0.330347	0.000012	0.338125
Pd	Pd83	0.332218	0.250950	0.337699
Pd	Pd84	0.334229	0.500019	0.339392
Pd	Pd85	0.332226	0.749078	0.337693
Pd	Pd86	0.833291	0.000002	0.337864
Pd	Pd87	0.834415	0.247454	0.338893
Pd	Pd88	0.831937	0.500009	0.350797
Pd	Pd89	0.001346	0.123958	0.368977
Pd	Pd90	0.002270	0.373052	0.369514
Pd	Pd91	0.002270	0.626961	0.369517
Pd	Pd92	0.001347	0.876056	0.368976
Pd	Pd93	0.498407	0.121293	0.368223
Pd	Pd94	0.496066	0.362639	0.374858
Pd	Pd95	0.496068	0.637390	0.374856
Pd	Pd96	0.498402	0.878776	0.368228
C	C97	0.687867	0.500006	0.358696
C	C98	0.647103	0.500032	0.417200
O	O99	0.608064	0.395383	0.434874
O	O100	0.608073	0.604680	0.434872
H	H101	0.751378	0.500010	0.425915

Transition state of R68 $\text{CHCOO}^* + \text{H}^* = \text{CHCHOO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166079	0.999696	0.202924
Pd	Pd50	0.166066	0.249765	0.202915
Pd	Pd51	0.165999	0.499990	0.202597
Pd	Pd52	0.166061	0.749996	0.202832
Pd	Pd53	0.665680	0.000645	0.202513
Pd	Pd54	0.666280	0.250580	0.203209
Pd	Pd55	0.665757	0.499319	0.202266
Pd	Pd56	0.665750	0.750635	0.201800
Pd	Pd57	0.330658	0.124692	0.236089
Pd	Pd58	0.331209	0.375970	0.236329
Pd	Pd59	0.331619	0.624317	0.236590
Pd	Pd60	0.331066	0.873147	0.236510
Pd	Pd61	0.830543	0.125542	0.236331
Pd	Pd62	0.831679	0.376639	0.237965
Pd	Pd63	0.833766	0.623820	0.236308
Pd	Pd64	0.830547	0.874447	0.236227
Pd	Pd65	0.998533	0.999750	0.268110
Pd	Pd66	0.999228	0.249483	0.268426
Pd	Pd67	0.999560	0.499514	0.269750
Pd	Pd68	0.999783	0.750037	0.268544
Pd	Pd69	0.498187	0.998413	0.267934
Pd	Pd70	0.498028	0.249015	0.268256
Pd	Pd71	0.499212	0.500392	0.271490
Pd	Pd72	0.498272	0.747037	0.271067
Pd	Pd73	0.164693	0.123824	0.307620
Pd	Pd74	0.164941	0.373853	0.307046
Pd	Pd75	0.165413	0.625573	0.307219
Pd	Pd76	0.164556	0.875444	0.307592
Pd	Pd77	0.664824	0.122396	0.308348
Pd	Pd78	0.665398	0.368548	0.305993
Pd	Pd79	0.669496	0.629942	0.300493
Pd	Pd80	0.664641	0.877914	0.307172
Pd	Pd81	0.832326	0.751953	0.338500
Pd	Pd82	0.328454	0.998990	0.338152
Pd	Pd83	0.328826	0.250405	0.337728

Pd	Pd84	0.327099	0.500846	0.339477
Pd	Pd85	0.327993	0.748523	0.339523
Pd	Pd86	0.831063	0.999816	0.338258
Pd	Pd87	0.831861	0.248067	0.338671
Pd	Pd88	0.831974	0.499693	0.345063
Pd	Pd89	0.998352	0.123984	0.368582
Pd	Pd90	0.000805	0.372756	0.369276
Pd	Pd91	0.001385	0.625922	0.369082
Pd	Pd92	0.998141	0.875520	0.368627
Pd	Pd93	0.494708	0.122067	0.367630
Pd	Pd94	0.486859	0.367803	0.371228
Pd	Pd95	0.485877	0.625438	0.380278
Pd	Pd96	0.494365	0.875728	0.368546
C	C97	0.772310	0.512770	0.419346
C	C98	0.663214	0.520759	0.414444
O	O99	0.629124	0.410083	0.402332
O	O100	0.639311	0.627177	0.387035
H	H101	0.810513	0.500592	0.460082
H	H102	0.562427	0.556782	0.445135

Transition state of R69 $\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165969	0.000004	0.202935
Pd	Pd50	0.166003	0.249864	0.202899
Pd	Pd51	0.165684	0.500001	0.202919
Pd	Pd52	0.166005	0.750137	0.202900
Pd	Pd53	0.665625	0.000001	0.202468
Pd	Pd54	0.665867	0.250355	0.202885
Pd	Pd55	0.665877	0.500003	0.202304
Pd	Pd56	0.665873	0.749648	0.202890
Pd	Pd57	0.330792	0.125696	0.236380
Pd	Pd58	0.331266	0.375472	0.236276
Pd	Pd59	0.331265	0.624529	0.236274
Pd	Pd60	0.330794	0.874320	0.236377
Pd	Pd61	0.830414	0.125299	0.236067
Pd	Pd62	0.832644	0.376203	0.236585
Pd	Pd63	0.832637	0.623804	0.236587
Pd	Pd64	0.830417	0.874704	0.236069
Pd	Pd65	0.998325	0.000006	0.268094
Pd	Pd66	0.999465	0.249715	0.268427
Pd	Pd67	0.998320	0.500003	0.269815
Pd	Pd68	0.999463	0.750296	0.268427
Pd	Pd69	0.498327	0.000013	0.268124
Pd	Pd70	0.498220	0.251256	0.269769
Pd	Pd71	0.499590	0.500003	0.270997
Pd	Pd72	0.498218	0.748791	0.269742
Pd	Pd73	0.164246	0.124243	0.307594
Pd	Pd74	0.164144	0.374136	0.307380
Pd	Pd75	0.164141	0.625867	0.307377
Pd	Pd76	0.164247	0.875764	0.307591
Pd	Pd77	0.664495	0.122275	0.307858
Pd	Pd78	0.669250	0.369384	0.303489
Pd	Pd79	0.669235	0.630635	0.303512
Pd	Pd80	0.664496	0.877732	0.307861
Pd	Pd81	0.832585	0.751876	0.337905
Pd	Pd82	0.328121	0.000017	0.338098
Pd	Pd83	0.327723	0.251462	0.338738
Pd	Pd84	0.325642	0.499987	0.338384

Pd	Pd85	0.327708	0.748563	0.338725
Pd	Pd86	0.830864	0.000003	0.338206
Pd	Pd87	0.832585	0.248122	0.337901
Pd	Pd88	0.831592	0.500003	0.346330
Pd	Pd89	0.998109	0.124277	0.368745
Pd	Pd90	0.999286	0.374128	0.369293
Pd	Pd91	0.999285	0.625867	0.369293
Pd	Pd92	0.998114	0.875738	0.368742
Pd	Pd93	0.493734	0.124393	0.368032
Pd	Pd94	0.485314	0.373158	0.374834
Pd	Pd95	0.485268	0.627034	0.374757
Pd	Pd96	0.493738	0.875670	0.368025
C	C97	0.768892	0.499965	0.431058
C	C98	0.664234	0.499949	0.412702
O	O99	0.637220	0.390176	0.390575
O	O100	0.637139	0.609699	0.390605
H	H101	0.793358	0.416297	0.451981
H	H102	0.793334	0.583661	0.451992
H	H103	0.556917	0.499794	0.438847

Transition state of R70 $\text{CH}_3\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165746	0.000001	0.202907
Pd	Pd50	0.165923	0.249936	0.202964
Pd	Pd51	0.165765	0.499998	0.202881
Pd	Pd52	0.165922	0.750068	0.202963
Pd	Pd53	0.665560	0.000001	0.202476
Pd	Pd54	0.665851	0.250925	0.203731
Pd	Pd55	0.665660	0.500004	0.203908
Pd	Pd56	0.665852	0.749073	0.203732
Pd	Pd57	0.330574	0.125191	0.236195
Pd	Pd58	0.330901	0.375180	0.235975
Pd	Pd59	0.330901	0.624822	0.235978
Pd	Pd60	0.330576	0.874806	0.236197
Pd	Pd61	0.830493	0.124924	0.236056
Pd	Pd62	0.831817	0.375111	0.235863
Pd	Pd63	0.831818	0.624896	0.235860
Pd	Pd64	0.830496	0.875081	0.236054
Pd	Pd65	0.998889	0.999999	0.268305
Pd	Pd66	0.999672	0.249824	0.268416
Pd	Pd67	0.999523	0.500003	0.268968
Pd	Pd68	0.999672	0.750181	0.268414
Pd	Pd69	0.498590	0.000005	0.268088
Pd	Pd70	0.498886	0.249823	0.268787
Pd	Pd71	0.499253	0.500001	0.269885
Pd	Pd72	0.498881	0.750178	0.268787
Pd	Pd73	0.165168	0.124682	0.307830
Pd	Pd74	0.165058	0.374581	0.307833
Pd	Pd75	0.165058	0.625420	0.307832
Pd	Pd76	0.165165	0.875320	0.307827
Pd	Pd77	0.665378	0.122668	0.308010
Pd	Pd78	0.666670	0.371350	0.307893
Pd	Pd79	0.666667	0.628662	0.307889
Pd	Pd80	0.665382	0.877335	0.308008
Pd	Pd81	0.832532	0.751798	0.337694
Pd	Pd82	0.329278	0.000001	0.338279
Pd	Pd83	0.329976	0.251122	0.338021
Pd	Pd84	0.328465	0.500003	0.337937

Pd	Pd85	0.329969	0.748876	0.338019
Pd	Pd86	0.831629	0.000004	0.338401
Pd	Pd87	0.832529	0.248207	0.337696
Pd	Pd88	0.832834	0.500005	0.338825
Pd	Pd89	0.998518	0.124610	0.368712
Pd	Pd90	0.998713	0.374489	0.368950
Pd	Pd91	0.998714	0.625528	0.368950
Pd	Pd92	0.998519	0.875403	0.368710
Pd	Pd93	0.495695	0.123668	0.368129
Pd	Pd94	0.489307	0.371607	0.371656
Pd	Pd95	0.489305	0.628400	0.371655
Pd	Pd96	0.495695	0.876332	0.368123
C	C97	0.698063	0.500005	0.485257
C	C98	0.674399	0.500001	0.421687
O	O99	0.638276	0.394123	0.402482
O	O100	0.638277	0.605915	0.402487
H	H101	0.626934	0.499977	0.508375
H	H102	0.740133	0.418072	0.496386
H	H103	0.740112	0.581946	0.496396
H	H104	0.771143	0.500030	0.401157

Transition state of R71 CCOOH* + H* = CCHOOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165757	0.000183	0.202760
Pd	Pd50	0.165944	0.249947	0.202711
Pd	Pd51	0.166086	0.500083	0.202463
Pd	Pd52	0.165901	0.750393	0.202639
Pd	Pd53	0.666082	0.999899	0.202808
Pd	Pd54	0.666113	0.250796	0.203616
Pd	Pd55	0.665017	0.499631	0.203758
Pd	Pd56	0.665698	0.748828	0.203721
Pd	Pd57	0.330895	0.125083	0.236014
Pd	Pd58	0.331058	0.375367	0.235877
Pd	Pd59	0.330971	0.625138	0.235627
Pd	Pd60	0.330990	0.875265	0.235986
Pd	Pd61	0.831112	0.125119	0.236208
Pd	Pd62	0.830656	0.375245	0.237006
Pd	Pd63	0.830798	0.624564	0.236821
Pd	Pd64	0.830996	0.874628	0.236122
Pd	Pd65	0.999521	0.999925	0.268315
Pd	Pd66	0.999862	0.249716	0.268488
Pd	Pd67	0.998601	0.499848	0.269030
Pd	Pd68	0.999851	0.750249	0.268485
Pd	Pd69	0.499565	0.000179	0.268149
Pd	Pd70	0.499370	0.249977	0.268455
Pd	Pd71	0.497490	0.500784	0.270418
Pd	Pd72	0.498971	0.749613	0.269472
Pd	Pd73	0.165828	0.124674	0.307520
Pd	Pd74	0.165932	0.375183	0.306983
Pd	Pd75	0.165966	0.625659	0.306861
Pd	Pd76	0.166220	0.875661	0.307547
Pd	Pd77	0.666681	0.124086	0.307892
Pd	Pd78	0.664222	0.372120	0.311370
Pd	Pd79	0.663505	0.626984	0.310513
Pd	Pd80	0.666659	0.875354	0.307786
Pd	Pd81	0.833733	0.752383	0.338796
Pd	Pd82	0.330551	0.000763	0.338148
Pd	Pd83	0.330544	0.251253	0.337480

Pd	Pd84	0.329808	0.501424	0.338284
Pd	Pd85	0.331690	0.749769	0.337260
Pd	Pd86	0.832305	0.999611	0.338024
Pd	Pd87	0.834077	0.246949	0.338925
Pd	Pd88	0.835830	0.499958	0.343483
Pd	Pd89	0.000581	0.123681	0.368867
Pd	Pd90	0.001634	0.373382	0.368872
Pd	Pd91	0.001751	0.626188	0.368772
Pd	Pd92	0.000696	0.875828	0.368753
Pd	Pd93	0.497878	0.124514	0.368323
Pd	Pd94	0.492633	0.368332	0.371678
Pd	Pd95	0.493391	0.633969	0.374465
Pd	Pd96	0.497821	0.878811	0.368390
C	C97	0.697774	0.501011	0.366726
C	C98	0.651774	0.501495	0.425444
O	O99	0.593546	0.591659	0.440147
O	O100	0.715021	0.458874	0.467087
H	H101	0.686918	0.485786	0.503399
H	H102	0.590542	0.401057	0.414697

Transition state of R72 CHCOOH* + H* = CHCHOOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165840	0.999826	0.202800
Pd	Pd50	0.166018	0.249867	0.202796
Pd	Pd51	0.165656	0.499907	0.202849
Pd	Pd52	0.165881	0.750043	0.202847
Pd	Pd53	0.665724	0.000391	0.202489
Pd	Pd54	0.665367	0.251079	0.203664
Pd	Pd55	0.665513	0.499754	0.204127
Pd	Pd56	0.666011	0.749246	0.203374
Pd	Pd57	0.330871	0.125200	0.236097
Pd	Pd58	0.331371	0.375328	0.236006
Pd	Pd59	0.330862	0.624868	0.235993
Pd	Pd60	0.330779	0.874965	0.236190
Pd	Pd61	0.830684	0.125119	0.236060
Pd	Pd62	0.830808	0.374859	0.236494
Pd	Pd63	0.832089	0.624561	0.235856
Pd	Pd64	0.830713	0.875193	0.236009
Pd	Pd65	0.998964	0.999987	0.268335
Pd	Pd66	0.999583	0.249648	0.268401
Pd	Pd67	0.998918	0.499610	0.269229
Pd	Pd68	0.999759	0.750191	0.268385
Pd	Pd69	0.499077	0.000481	0.268241
Pd	Pd70	0.499622	0.250552	0.269167
Pd	Pd71	0.499517	0.500906	0.269960
Pd	Pd72	0.498663	0.750336	0.268933
Pd	Pd73	0.164872	0.124061	0.307405
Pd	Pd74	0.166029	0.374208	0.307289
Pd	Pd75	0.164914	0.625204	0.307445
Pd	Pd76	0.165161	0.875036	0.307643
Pd	Pd77	0.666118	0.123821	0.307709
Pd	Pd78	0.667615	0.374307	0.311644
Pd	Pd79	0.667169	0.629433	0.306821
Pd	Pd80	0.665658	0.877497	0.307689
Pd	Pd81	0.832674	0.751604	0.337635
Pd	Pd82	0.329693	0.000317	0.338225
Pd	Pd83	0.330547	0.250399	0.337921
Pd	Pd84	0.329215	0.499610	0.337959

Pd	Pd85	0.329728	0.748686	0.338014
Pd	Pd86	0.831660	0.000417	0.338379
Pd	Pd87	0.833701	0.248363	0.338320
Pd	Pd88	0.834710	0.500041	0.340184
Pd	Pd89	0.999460	0.124122	0.368890
Pd	Pd90	0.000983	0.374017	0.368957
Pd	Pd91	0.999736	0.626184	0.369067
Pd	Pd92	0.998436	0.875511	0.368671
Pd	Pd93	0.496378	0.123875	0.368395
Pd	Pd94	0.495188	0.374949	0.371961
Pd	Pd95	0.489213	0.627583	0.372388
Pd	Pd96	0.495818	0.875739	0.367998
C	C97	0.639084	0.387692	0.395497
C	C98	0.671949	0.504344	0.421897
O	O99	0.637884	0.611861	0.403614
O	O100	0.681917	0.495957	0.480474
H	H101	0.665458	0.308557	0.419911
H	H102	0.687093	0.579463	0.494619
H	H103	0.767661	0.503049	0.402399

Transition state of R73 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447

Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165874	0.999595	0.202926
Pd	Pd50	0.165941	0.249672	0.202934
Pd	Pd51	0.165949	0.499817	0.202737
Pd	Pd52	0.166082	0.749824	0.202884
Pd	Pd53	0.665759	0.000095	0.202728
Pd	Pd54	0.665975	0.250695	0.203365
Pd	Pd55	0.665875	0.499735	0.203311
Pd	Pd56	0.665823	0.749993	0.202985
Pd	Pd57	0.330895	0.124655	0.236077
Pd	Pd58	0.331112	0.374697	0.235872
Pd	Pd59	0.331345	0.624409	0.235912
Pd	Pd60	0.331072	0.874479	0.236185
Pd	Pd61	0.830596	0.125484	0.236133
Pd	Pd62	0.831416	0.376505	0.237068
Pd	Pd63	0.830779	0.624943	0.236726
Pd	Pd64	0.830750	0.875290	0.235990
Pd	Pd65	0.999062	0.000129	0.268224
Pd	Pd66	0.999518	0.249942	0.268301
Pd	Pd67	0.998651	0.500278	0.268893
Pd	Pd68	0.999656	0.750494	0.268218
Pd	Pd69	0.499207	0.999648	0.268343
Pd	Pd70	0.499212	0.249947	0.269112
Pd	Pd71	0.499434	0.498986	0.269663
Pd	Pd72	0.499691	0.749459	0.268735
Pd	Pd73	0.165271	0.123816	0.307748
Pd	Pd74	0.165074	0.374289	0.307457
Pd	Pd75	0.165614	0.625266	0.307408
Pd	Pd76	0.165821	0.874711	0.307847
Pd	Pd77	0.665570	0.122929	0.308050
Pd	Pd78	0.667216	0.372009	0.307589
Pd	Pd79	0.666181	0.626833	0.307229
Pd	Pd80	0.666037	0.876135	0.308192
Pd	Pd81	0.832375	0.752348	0.337825
Pd	Pd82	0.330274	0.998645	0.338334
Pd	Pd83	0.329625	0.250022	0.337606
Pd	Pd84	0.328616	0.499400	0.337533

Pd	Pd85	0.331542	0.748105	0.337986
Pd	Pd86	0.831590	0.000110	0.338358
Pd	Pd87	0.831995	0.249242	0.338141
Pd	Pd88	0.829023	0.502910	0.342974
Pd	Pd89	0.998276	0.125308	0.368423
Pd	Pd90	0.998217	0.375403	0.368250
Pd	Pd91	0.999214	0.625765	0.368139
Pd	Pd92	0.999004	0.875926	0.368460
Pd	Pd93	0.495890	0.123335	0.368255
Pd	Pd94	0.487763	0.372034	0.372669
Pd	Pd95	0.496153	0.624867	0.370498
Pd	Pd96	0.497764	0.874738	0.368471
C	C97	0.771023	0.520547	0.423109
C	C98	0.660460	0.498291	0.426382
O	O99	0.630546	0.390522	0.406602
O	O100	0.623823	0.531002	0.479655
H	H101	0.789970	0.610203	0.440480
H	H102	0.808775	0.446839	0.446425
H	H103	0.557547	0.494829	0.483259
H	H104	0.624494	0.584309	0.389404

Transition state of R74 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166153	0.000005	0.203087
Pd	Pd50	0.166062	0.250027	0.203044
Pd	Pd51	0.165431	0.500010	0.203169
Pd	Pd52	0.166091	0.750038	0.203061
Pd	Pd53	0.666035	0.000202	0.203033
Pd	Pd54	0.665778	0.249301	0.202406
Pd	Pd55	0.665720	0.500231	0.202283
Pd	Pd56	0.665869	0.750776	0.202603
Pd	Pd57	0.331418	0.125432	0.236388
Pd	Pd58	0.330996	0.375363	0.236240
Pd	Pd59	0.331035	0.624739	0.236225
Pd	Pd60	0.331363	0.874771	0.236354
Pd	Pd61	0.830986	0.125462	0.236274
Pd	Pd62	0.831190	0.375613	0.236295
Pd	Pd63	0.831090	0.625044	0.236241
Pd	Pd64	0.831067	0.875157	0.236224
Pd	Pd65	0.999736	0.000242	0.268434
Pd	Pd66	0.999924	0.250474	0.268593
Pd	Pd67	0.997833	0.500215	0.269518
Pd	Pd68	0.000012	0.750106	0.268581
Pd	Pd69	0.499864	0.000324	0.268367
Pd	Pd70	0.499236	0.250577	0.269269
Pd	Pd71	0.499654	0.500292	0.269370
Pd	Pd72	0.499207	0.749883	0.269083
Pd	Pd73	0.166515	0.125186	0.308017
Pd	Pd74	0.166476	0.375115	0.308043
Pd	Pd75	0.166374	0.625150	0.308034
Pd	Pd76	0.166565	0.875119	0.308054
Pd	Pd77	0.666620	0.124560	0.308532
Pd	Pd78	0.666570	0.372431	0.304930
Pd	Pd79	0.666492	0.628149	0.305550
Pd	Pd80	0.666590	0.876445	0.308264
Pd	Pd81	0.832085	0.751708	0.338422
Pd	Pd82	0.331324	0.000207	0.338573
Pd	Pd83	0.333079	0.251086	0.338367

Pd	Pd84	0.332781	0.500066	0.338441
Pd	Pd85	0.332930	0.749184	0.338229
Pd	Pd86	0.831928	0.000535	0.338465
Pd	Pd87	0.832004	0.249802	0.338610
Pd	Pd88	0.828649	0.500997	0.341222
Pd	Pd89	0.998829	0.125371	0.368438
Pd	Pd90	0.998464	0.375502	0.368673
Pd	Pd91	0.998656	0.625792	0.368672
Pd	Pd92	0.998878	0.875675	0.368494
Pd	Pd93	0.499170	0.122900	0.368869
Pd	Pd94	0.503073	0.368488	0.370368
Pd	Pd95	0.502003	0.631835	0.370300
Pd	Pd96	0.499007	0.877211	0.368659
C	C97	0.713284	0.601002	0.471535
C	C98	0.672380	0.494607	0.438086
O	O99	0.576231	0.499422	0.424790
O	O100	0.705688	0.384554	0.458169
H	H101	0.678167	0.601972	0.513822
H	H102	0.794003	0.591853	0.476012
H	H103	0.696265	0.685945	0.449085
H	H104	0.673057	0.319743	0.436063
H	H105	0.723220	0.509756	0.385340

Transition state of R75 CO* + H* = COH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
_cell_length_b 10.986804
_cell_length_c 23.511980
_cell_angle_alpha 90.000000
_cell_angle_beta 90.000000
_cell_angle_gamma 90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165912	0.999822	0.202846
Pd	Pd50	0.165974	0.249997	0.202684
Pd	Pd51	0.165973	0.500005	0.202686
Pd	Pd52	0.165915	0.750183	0.202845
Pd	Pd53	0.666229	0.999970	0.202802
Pd	Pd54	0.665881	0.249954	0.202858
Pd	Pd55	0.665883	0.500049	0.202858
Pd	Pd56	0.666228	0.750037	0.202801
Pd	Pd57	0.330622	0.125071	0.236142
Pd	Pd58	0.331144	0.375000	0.236251
Pd	Pd59	0.330620	0.624935	0.236143
Pd	Pd60	0.330688	0.875006	0.236173
Pd	Pd61	0.831002	0.126260	0.237289
Pd	Pd62	0.831141	0.375007	0.237171
Pd	Pd63	0.831000	0.623750	0.237292
Pd	Pd64	0.831077	0.875005	0.236313
Pd	Pd65	0.999693	0.999957	0.268454
Pd	Pd66	0.998931	0.250071	0.269170
Pd	Pd67	0.998932	0.499941	0.269172
Pd	Pd68	0.999698	0.750055	0.268451
Pd	Pd69	0.498904	0.999823	0.268349
Pd	Pd70	0.498929	0.249577	0.268893
Pd	Pd71	0.498929	0.500426	0.268892
Pd	Pd72	0.498900	0.750179	0.268351
Pd	Pd73	0.165662	0.124645	0.307443
Pd	Pd74	0.167056	0.375003	0.307075
Pd	Pd75	0.165661	0.625367	0.307445
Pd	Pd76	0.166209	0.875001	0.308011
Pd	Pd77	0.665249	0.121860	0.307072
Pd	Pd78	0.663579	0.375004	0.307401
Pd	Pd79	0.665252	0.628149	0.307071
Pd	Pd80	0.666081	0.874997	0.308210
Pd	Pd81	0.831641	0.749833	0.338338

Pd	Pd82	0.331028	0.000404	0.338376
Pd	Pd83	0.330860	0.249762	0.338659
Pd	Pd84	0.330862	0.500246	0.338656
Pd	Pd85	0.331027	0.749607	0.338374
Pd	Pd86	0.831639	0.000183	0.338333
Pd	Pd87	0.830465	0.248933	0.344337
Pd	Pd88	0.830465	0.501084	0.344338
Pd	Pd89	0.999605	0.124060	0.368918
Pd	Pd90	0.003658	0.375006	0.368968
Pd	Pd91	0.999604	0.625953	0.368916
Pd	Pd92	0.998368	0.875008	0.368264
Pd	Pd93	0.498364	0.124543	0.368780
Pd	Pd94	0.499497	0.374997	0.370775
Pd	Pd95	0.498364	0.625463	0.368778
Pd	Pd96	0.497814	0.874997	0.368387
C	C97	0.743684	0.375012	0.379647
O	O98	0.697895	0.374996	0.426466
H	H99	0.604307	0.374970	0.413332

Transition state of R76 $\text{HCO}^* + \text{H}^* = \text{HCOH}^* + *$ on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170

Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166026	0.999995	0.202924
Pd	Pd50	0.165887	0.249997	0.202960
Pd	Pd51	0.166069	0.499995	0.202770
Pd	Pd52	0.165884	0.750003	0.202959
Pd	Pd53	0.665789	0.000003	0.202963
Pd	Pd54	0.665519	0.249721	0.202836
Pd	Pd55	0.665457	0.500003	0.202776
Pd	Pd56	0.665520	0.750291	0.202835
Pd	Pd57	0.331031	0.125254	0.236311
Pd	Pd58	0.330834	0.375115	0.236261
Pd	Pd59	0.330831	0.624886	0.236259
Pd	Pd60	0.331028	0.874739	0.236311
Pd	Pd61	0.830397	0.125086	0.236266
Pd	Pd62	0.830390	0.375391	0.236554
Pd	Pd63	0.830389	0.624620	0.236553
Pd	Pd64	0.830393	0.874924	0.236264
Pd	Pd65	0.998649	0.000000	0.268300
Pd	Pd66	0.998718	0.250022	0.268395
Pd	Pd67	0.998382	0.499998	0.268560
Pd	Pd68	0.998710	0.749976	0.268386
Pd	Pd69	0.499186	0.999997	0.268469
Pd	Pd70	0.499091	0.250816	0.269286
Pd	Pd71	0.498997	0.499998	0.269105
Pd	Pd72	0.499092	0.749176	0.269290
Pd	Pd73	0.164605	0.124583	0.307536
Pd	Pd74	0.164658	0.374715	0.307626
Pd	Pd75	0.164656	0.625280	0.307624
Pd	Pd76	0.164603	0.875412	0.307535
Pd	Pd77	0.665248	0.124135	0.308257
Pd	Pd78	0.665220	0.373008	0.307034
Pd	Pd79	0.665225	0.626991	0.307033
Pd	Pd80	0.665250	0.875857	0.308256
Pd	Pd81	0.830259	0.750741	0.338576
Pd	Pd82	0.330200	0.000002	0.338354
Pd	Pd83	0.330049	0.250934	0.338422
Pd	Pd84	0.329255	0.500002	0.338297
Pd	Pd85	0.330052	0.749061	0.338421

Pd	Pd86	0.830475	0.000002	0.338480
Pd	Pd87	0.830259	0.249265	0.338586
Pd	Pd88	0.826430	0.499994	0.341107
Pd	Pd89	0.997056	0.125058	0.368352
Pd	Pd90	0.996226	0.375350	0.368140
Pd	Pd91	0.996225	0.624641	0.368136
Pd	Pd92	0.997057	0.874947	0.368354
Pd	Pd93	0.496906	0.125244	0.368528
Pd	Pd94	0.499784	0.375866	0.371489
Pd	Pd95	0.499784	0.624131	0.371482
Pd	Pd96	0.496898	0.874759	0.368525
C	C97	0.564464	0.499987	0.424355
O	O98	0.657865	0.500009	0.432123
H	H99	0.518379	0.500011	0.464002
H	H100	0.715254	0.500013	0.378991

Transition state of R77 $\text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170

Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165968	0.000029	0.203002
Pd	Pd50	0.166038	0.249939	0.202987
Pd	Pd51	0.165662	0.500040	0.202924
Pd	Pd52	0.165882	0.750145	0.202964
Pd	Pd53	0.665918	0.000258	0.202902
Pd	Pd54	0.665737	0.250074	0.203228
Pd	Pd55	0.665550	0.499418	0.203109
Pd	Pd56	0.665595	0.750195	0.202717
Pd	Pd57	0.331174	0.125035	0.236239
Pd	Pd58	0.331028	0.375404	0.235891
Pd	Pd59	0.330889	0.624919	0.236121
Pd	Pd60	0.331153	0.874678	0.236352
Pd	Pd61	0.830979	0.125021	0.236306
Pd	Pd62	0.830663	0.374983	0.236488
Pd	Pd63	0.830685	0.624719	0.236236
Pd	Pd64	0.830656	0.874823	0.236224
Pd	Pd65	0.999259	0.999815	0.268436
Pd	Pd66	0.999696	0.249931	0.268546
Pd	Pd67	0.998969	0.499944	0.268627
Pd	Pd68	0.999386	0.749800	0.268513
Pd	Pd69	0.499712	0.999677	0.268271
Pd	Pd70	0.499605	0.250714	0.269165
Pd	Pd71	0.499345	0.499340	0.269403
Pd	Pd72	0.499208	0.748911	0.269161
Pd	Pd73	0.166201	0.124938	0.307895
Pd	Pd74	0.165749	0.374750	0.307750
Pd	Pd75	0.165542	0.625315	0.307706
Pd	Pd76	0.165417	0.875635	0.307815
Pd	Pd77	0.666346	0.124306	0.308096
Pd	Pd78	0.666264	0.374314	0.309827
Pd	Pd79	0.665578	0.625785	0.306646
Pd	Pd80	0.666206	0.875240	0.308081
Pd	Pd81	0.830990	0.749794	0.338439
Pd	Pd82	0.330923	0.999518	0.338431
Pd	Pd83	0.332582	0.251283	0.337715
Pd	Pd84	0.330480	0.500483	0.338044
Pd	Pd85	0.330881	0.749123	0.338471
Pd	Pd86	0.831271	0.999886	0.338500
Pd	Pd87	0.831865	0.249423	0.338819
Pd	Pd88	0.830777	0.500217	0.339460

Pd	Pd89	0.998742	0.124494	0.368445
Pd	Pd90	0.998096	0.374911	0.368511
Pd	Pd91	0.997987	0.625120	0.368529
Pd	Pd92	0.998005	0.874879	0.368497
Pd	Pd93	0.498044	0.122268	0.368233
Pd	Pd94	0.496746	0.371219	0.372068
Pd	Pd95	0.500646	0.624924	0.371211
Pd	Pd96	0.498037	0.874330	0.368322
C	C97	0.589320	0.560491	0.437543
O	O98	0.603452	0.440796	0.432200
H	H99	0.655691	0.617977	0.430193
H	H100	0.540398	0.586895	0.473293
H	H101	0.667803	0.417017	0.377323

Transition state of R78 $\text{H}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170

Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166221	0.999999	0.203057
Pd	Pd50	0.166215	0.249865	0.202998
Pd	Pd51	0.165901	0.499999	0.202922
Pd	Pd52	0.166219	0.750134	0.202998
Pd	Pd53	0.666074	0.999998	0.202818
Pd	Pd54	0.666110	0.249558	0.202544
Pd	Pd55	0.665507	0.500001	0.202749
Pd	Pd56	0.666108	0.750434	0.202548
Pd	Pd57	0.331409	0.125209	0.236367
Pd	Pd58	0.331118	0.375289	0.236247
Pd	Pd59	0.331126	0.624713	0.236247
Pd	Pd60	0.331415	0.874790	0.236368
Pd	Pd61	0.831119	0.125056	0.236225
Pd	Pd62	0.830992	0.375283	0.236368
Pd	Pd63	0.830997	0.624718	0.236368
Pd	Pd64	0.831118	0.874939	0.236225
Pd	Pd65	0.999752	0.999994	0.268331
Pd	Pd66	0.999779	0.250016	0.268495
Pd	Pd67	0.998446	0.499996	0.268660
Pd	Pd68	0.999781	0.749975	0.268495
Pd	Pd69	0.499841	0.999995	0.268298
Pd	Pd70	0.499578	0.250036	0.268804
Pd	Pd71	0.498580	0.500002	0.270022
Pd	Pd72	0.499581	0.749956	0.268813
Pd	Pd73	0.166729	0.124946	0.308029
Pd	Pd74	0.165374	0.374729	0.307803
Pd	Pd75	0.165381	0.625264	0.307803
Pd	Pd76	0.166732	0.875047	0.308026
Pd	Pd77	0.666390	0.124102	0.308012
Pd	Pd78	0.665604	0.372170	0.306147
Pd	Pd79	0.665610	0.627823	0.306154
Pd	Pd80	0.666390	0.875895	0.308016
Pd	Pd81	0.831225	0.750819	0.338583
Pd	Pd82	0.331450	0.000000	0.338645
Pd	Pd83	0.332806	0.251596	0.338247
Pd	Pd84	0.329152	0.499994	0.338950
Pd	Pd85	0.332809	0.748395	0.338254
Pd	Pd86	0.831736	0.999993	0.338373
Pd	Pd87	0.831224	0.249171	0.338580
Pd	Pd88	0.826844	0.499992	0.340759
Pd	Pd89	0.998722	0.125019	0.368329
Pd	Pd90	0.996374	0.375579	0.368163

Pd	Pd91	0.996378	0.624395	0.368163
Pd	Pd92	0.998726	0.874965	0.368328
Pd	Pd93	0.498727	0.123501	0.368557
Pd	Pd94	0.495073	0.369837	0.372009
Pd	Pd95	0.495091	0.630144	0.372023
Pd	Pd96	0.498721	0.876495	0.368560
C	C97	0.639346	0.499838	0.466066
O	O98	0.601180	0.499934	0.408963
H	H99	0.577585	0.499782	0.496646
H	H100	0.685270	0.418038	0.472459
H	H101	0.685281	0.581566	0.472522
H	H102	0.679322	0.499968	0.364028

Transition state of R79 CCO* + H* = CCOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170

Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166216	0.000383	0.202848
Pd	Pd50	0.166156	0.250230	0.202847
Pd	Pd51	0.165606	0.500339	0.202886
Pd	Pd52	0.166052	0.750401	0.202821
Pd	Pd53	0.666282	0.999573	0.202920
Pd	Pd54	0.665796	0.249527	0.202984
Pd	Pd55	0.665768	0.499597	0.202476
Pd	Pd56	0.665646	0.749659	0.203453
Pd	Pd57	0.331388	0.125671	0.236317
Pd	Pd58	0.330879	0.375970	0.236198
Pd	Pd59	0.330888	0.625336	0.236380
Pd	Pd60	0.331038	0.875454	0.236387
Pd	Pd61	0.831350	0.124846	0.236230
Pd	Pd62	0.831806	0.375263	0.236992
Pd	Pd63	0.831525	0.623912	0.237106
Pd	Pd64	0.831210	0.874530	0.236293
Pd	Pd65	0.999842	0.999952	0.268364
Pd	Pd66	0.000141	0.249579	0.268580
Pd	Pd67	0.997202	0.499854	0.269748
Pd	Pd68	0.999833	0.750217	0.268533
Pd	Pd69	0.499792	0.000480	0.268615
Pd	Pd70	0.499165	0.250459	0.269245
Pd	Pd71	0.498179	0.500515	0.269373
Pd	Pd72	0.498736	0.751223	0.269504
Pd	Pd73	0.166220	0.125022	0.307587
Pd	Pd74	0.165790	0.375151	0.307451
Pd	Pd75	0.165454	0.625631	0.307434
Pd	Pd76	0.165911	0.876241	0.307576
Pd	Pd77	0.667251	0.122614	0.308022
Pd	Pd78	0.666681	0.368402	0.306421
Pd	Pd79	0.665639	0.629019	0.306975
Pd	Pd80	0.666733	0.876172	0.308283
Pd	Pd81	0.833290	0.751721	0.338934
Pd	Pd82	0.331883	0.001574	0.338567
Pd	Pd83	0.333001	0.252925	0.338225
Pd	Pd84	0.329904	0.500382	0.338992
Pd	Pd85	0.331073	0.750319	0.338658
Pd	Pd86	0.832685	0.999274	0.338257
Pd	Pd87	0.834226	0.246632	0.339034
Pd	Pd88	0.828078	0.498958	0.347937
Pd	Pd89	0.000693	0.123639	0.368858
Pd	Pd90	0.999531	0.374101	0.368737
Pd	Pd91	0.998804	0.625052	0.368679

Pd	Pd92	0.000220	0.875208	0.368741
Pd	Pd93	0.499490	0.126350	0.368801
Pd	Pd94	0.501714	0.378421	0.372757
Pd	Pd95	0.494953	0.629192	0.372774
Pd	Pd96	0.498405	0.877377	0.369235
C	C97	0.683786	0.496866	0.364427
C	C98	0.602589	0.505241	0.404502
O	O99	0.598779	0.534763	0.457629
H	H100	0.515443	0.613486	0.441971

Transition state of R80 $\text{CHCO}^* + \text{H}^* = \text{CHCOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894

Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165728	0.000061	0.202753
Pd	Pd50	0.166014	0.250041	0.202841
Pd	Pd51	0.165939	0.500045	0.202701
Pd	Pd52	0.166304	0.750163	0.202628
Pd	Pd53	0.666027	0.999924	0.202844
Pd	Pd54	0.665499	0.250833	0.204259
Pd	Pd55	0.665521	0.499182	0.203222
Pd	Pd56	0.665584	0.749166	0.203366
Pd	Pd57	0.330897	0.125334	0.236149
Pd	Pd58	0.331368	0.375317	0.236061
Pd	Pd59	0.331269	0.624690	0.235977
Pd	Pd60	0.330902	0.875155	0.236075
Pd	Pd61	0.830683	0.124247	0.236362
Pd	Pd62	0.830870	0.374682	0.236321
Pd	Pd63	0.831103	0.625320	0.236370
Pd	Pd64	0.830500	0.874411	0.236912
Pd	Pd65	0.998592	0.999559	0.268407
Pd	Pd66	0.999727	0.249551	0.268415
Pd	Pd67	0.000188	0.499671	0.268423
Pd	Pd68	0.999062	0.749716	0.268652
Pd	Pd69	0.499253	0.000045	0.268309
Pd	Pd70	0.499829	0.249953	0.269362
Pd	Pd71	0.499155	0.499799	0.269463
Pd	Pd72	0.499203	0.750002	0.269191
Pd	Pd73	0.164674	0.123965	0.307357
Pd	Pd74	0.166222	0.374464	0.307248
Pd	Pd75	0.165680	0.625708	0.307001
Pd	Pd76	0.164403	0.875779	0.307349
Pd	Pd77	0.666314	0.122779	0.308532
Pd	Pd78	0.667699	0.372824	0.311788
Pd	Pd79	0.666318	0.624765	0.308003
Pd	Pd80	0.666031	0.875461	0.307791
Pd	Pd81	0.830034	0.749721	0.342035
Pd	Pd82	0.330077	0.999957	0.338160
Pd	Pd83	0.331199	0.250951	0.337731
Pd	Pd84	0.329683	0.500843	0.338587
Pd	Pd85	0.330846	0.749650	0.337610
Pd	Pd86	0.831122	0.998723	0.339002
Pd	Pd87	0.833738	0.247499	0.338516
Pd	Pd88	0.836334	0.498296	0.337814
Pd	Pd89	0.999138	0.122921	0.368824
Pd	Pd90	0.000879	0.372947	0.368715
Pd	Pd91	0.999634	0.625050	0.368561
Pd	Pd92	0.998193	0.874113	0.368768
Pd	Pd93	0.497148	0.123167	0.368763
Pd	Pd94	0.494954	0.373512	0.371500

Pd	Pd95	0.497998	0.626909	0.371827
Pd	Pd96	0.497363	0.877207	0.368562
C	C97	0.631390	0.438026	0.390714
C	C98	0.640996	0.569787	0.391931
O	O99	0.685326	0.634985	0.428985
H	H100	0.664571	0.389405	0.427086
H	H101	0.758508	0.708648	0.394685

Transition state of R81 $\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + ^*$ on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894

Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166458	0.000032	0.202997
Pd	Pd50	0.166455	0.249969	0.202998
Pd	Pd51	0.165931	0.499483	0.202516
Pd	Pd52	0.165933	0.750520	0.202516
Pd	Pd53	0.665889	0.999965	0.202978
Pd	Pd54	0.665900	0.250036	0.202979
Pd	Pd55	0.665487	0.500110	0.203179
Pd	Pd56	0.665491	0.749887	0.203180
Pd	Pd57	0.331263	0.125003	0.236251
Pd	Pd58	0.331159	0.376600	0.237253
Pd	Pd59	0.331034	0.625001	0.236939
Pd	Pd60	0.331162	0.873406	0.237253
Pd	Pd61	0.830636	0.124999	0.236270
Pd	Pd62	0.830705	0.374934	0.236136
Pd	Pd63	0.830800	0.625001	0.235778
Pd	Pd64	0.830702	0.875058	0.236136
Pd	Pd65	0.999322	0.000320	0.268362
Pd	Pd66	0.999320	0.249678	0.268360
Pd	Pd67	0.998507	0.499509	0.268504
Pd	Pd68	0.998504	0.750490	0.268507
Pd	Pd69	0.499726	0.999831	0.268410
Pd	Pd70	0.499725	0.250170	0.268410
Pd	Pd71	0.499163	0.500641	0.269947
Pd	Pd72	0.499164	0.749362	0.269947
Pd	Pd73	0.165938	0.125009	0.308211
Pd	Pd74	0.165547	0.374011	0.307623
Pd	Pd75	0.162488	0.625003	0.304991
Pd	Pd76	0.165547	0.876007	0.307623
Pd	Pd77	0.666057	0.124999	0.308193
Pd	Pd78	0.665768	0.374765	0.307931
Pd	Pd79	0.664682	0.624997	0.308111
Pd	Pd80	0.665773	0.875232	0.307932
Pd	Pd81	0.830913	0.749298	0.338197
Pd	Pd82	0.330947	0.999213	0.338242
Pd	Pd83	0.330950	0.250807	0.338243
Pd	Pd84	0.326868	0.501674	0.342389
Pd	Pd85	0.326869	0.748337	0.342383
Pd	Pd86	0.830991	0.999523	0.338417
Pd	Pd87	0.830990	0.250465	0.338419
Pd	Pd88	0.830912	0.500697	0.338194
Pd	Pd89	0.997629	0.124993	0.368451
Pd	Pd90	0.998085	0.374710	0.368409
Pd	Pd91	0.002150	0.624996	0.369730
Pd	Pd92	0.998092	0.875279	0.368409
Pd	Pd93	0.497909	0.125003	0.368158
Pd	Pd94	0.497916	0.372930	0.368532
Pd	Pd95	0.496403	0.625001	0.373391
Pd	Pd96	0.497914	0.877076	0.368528

C	C97	0.393435	0.625003	0.438939
C	C98	0.297719	0.625022	0.407856
O	O99	0.211649	0.625011	0.430228
H	H100	0.405259	0.541740	0.464130
H	H101	0.405285	0.708285	0.464130
H	H102	0.135611	0.625008	0.386247

Transition state of R82 $\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + *$ on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894

Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166086	0.000002	0.202943
Pd	Pd50	0.165918	0.250032	0.202969
Pd	Pd51	0.166074	0.499999	0.202826
Pd	Pd52	0.165917	0.749965	0.202967
Pd	Pd53	0.665868	0.000002	0.203001
Pd	Pd54	0.665633	0.249785	0.202921
Pd	Pd55	0.665593	0.499999	0.202851
Pd	Pd56	0.665637	0.750214	0.202918
Pd	Pd57	0.331182	0.125235	0.236324
Pd	Pd58	0.330884	0.375033	0.236290
Pd	Pd59	0.330885	0.624952	0.236287
Pd	Pd60	0.331175	0.874761	0.236322
Pd	Pd61	0.830499	0.125101	0.236267
Pd	Pd62	0.830346	0.375354	0.236623
Pd	Pd63	0.830350	0.624644	0.236623
Pd	Pd64	0.830500	0.874900	0.236267
Pd	Pd65	0.998860	0.999994	0.268351
Pd	Pd66	0.998795	0.250010	0.268392
Pd	Pd67	0.998358	0.499996	0.268582
Pd	Pd68	0.998795	0.749984	0.268392
Pd	Pd69	0.499353	0.000005	0.268519
Pd	Pd70	0.499219	0.250726	0.269248
Pd	Pd71	0.499011	0.499994	0.268926
Pd	Pd72	0.499216	0.749279	0.269245
Pd	Pd73	0.164847	0.124657	0.307572
Pd	Pd74	0.164696	0.374717	0.307697
Pd	Pd75	0.164694	0.625276	0.307692
Pd	Pd76	0.164849	0.875337	0.307567
Pd	Pd77	0.665461	0.124247	0.308302
Pd	Pd78	0.665225	0.373212	0.307473
Pd	Pd79	0.665228	0.626787	0.307461
Pd	Pd80	0.665455	0.875753	0.308297
Pd	Pd81	0.830475	0.750795	0.338596
Pd	Pd82	0.330497	0.999999	0.338349
Pd	Pd83	0.330146	0.250878	0.338520
Pd	Pd84	0.329049	0.500005	0.338336
Pd	Pd85	0.330146	0.749126	0.338517
Pd	Pd86	0.830710	0.999998	0.338468
Pd	Pd87	0.830479	0.249211	0.338596
Pd	Pd88	0.826608	0.500006	0.341067
Pd	Pd89	0.997338	0.125092	0.368406
Pd	Pd90	0.996281	0.375371	0.368178
Pd	Pd91	0.996279	0.624624	0.368181
Pd	Pd92	0.997340	0.874908	0.368405
Pd	Pd93	0.497069	0.125342	0.368552
Pd	Pd94	0.499082	0.376107	0.371084
Pd	Pd95	0.499078	0.623925	0.371066
Pd	Pd96	0.497069	0.874663	0.368547
C	C97	0.502379	0.500167	0.482383

C	C98	0.560813	0.500058	0.426840
O	O99	0.655301	0.500017	0.430791
H	H100	0.523147	0.581281	0.507192
H	H101	0.523095	0.419146	0.507242
H	H102	0.421898	0.500175	0.475085
H	H103	0.707956	0.499962	0.376476

Transition state of R83 CCHO* + H* = CCHOH* + * on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894

Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165760	0.000742	0.202776
Pd	Pd50	0.165809	0.250195	0.202779
Pd	Pd51	0.165760	0.500250	0.202609
Pd	Pd52	0.165345	0.750456	0.202866
Pd	Pd53	0.666092	0.999482	0.202863
Pd	Pd54	0.666035	0.249280	0.202695
Pd	Pd55	0.665974	0.499905	0.203093
Pd	Pd56	0.665503	0.749468	0.203265
Pd	Pd57	0.330843	0.125943	0.236161
Pd	Pd58	0.330557	0.375246	0.235935
Pd	Pd59	0.330543	0.625404	0.235885
Pd	Pd60	0.330110	0.875920	0.235949
Pd	Pd61	0.830993	0.124049	0.236472
Pd	Pd62	0.831096	0.374450	0.236743
Pd	Pd63	0.831104	0.624664	0.236586
Pd	Pd64	0.830221	0.873536	0.237426
Pd	Pd65	0.999124	0.999611	0.268403
Pd	Pd66	0.999831	0.249441	0.268489
Pd	Pd67	0.999345	0.499198	0.269328
Pd	Pd68	0.997741	0.749485	0.269383
Pd	Pd69	0.498755	0.000952	0.268267
Pd	Pd70	0.499369	0.251007	0.268819
Pd	Pd71	0.498419	0.499808	0.268711
Pd	Pd72	0.497953	0.750745	0.268516
Pd	Pd73	0.166279	0.125496	0.307926
Pd	Pd74	0.166541	0.374507	0.307452
Pd	Pd75	0.165991	0.625558	0.306860
Pd	Pd76	0.164410	0.876675	0.307464
Pd	Pd77	0.666346	0.123777	0.308272
Pd	Pd78	0.665939	0.371024	0.306601
Pd	Pd79	0.661815	0.624396	0.308427
Pd	Pd80	0.664260	0.876973	0.307625
Pd	Pd81	0.829828	0.749097	0.344526
Pd	Pd82	0.330713	0.001474	0.338332
Pd	Pd83	0.332125	0.251887	0.338553
Pd	Pd84	0.330232	0.500256	0.338109
Pd	Pd85	0.328919	0.751598	0.337832
Pd	Pd86	0.831080	0.998023	0.338862
Pd	Pd87	0.832150	0.247475	0.338539
Pd	Pd88	0.834228	0.493684	0.341445
Pd	Pd89	0.999046	0.122781	0.368315
Pd	Pd90	0.001816	0.370976	0.369346
Pd	Pd91	0.002513	0.623381	0.369233
Pd	Pd92	0.998448	0.874497	0.369157
Pd	Pd93	0.498293	0.126873	0.368380
Pd	Pd94	0.501795	0.379107	0.370378
Pd	Pd95	0.494083	0.625765	0.369680
Pd	Pd96	0.496301	0.876408	0.368370
C	C97	0.746571	0.617955	0.375874

C	C98	0.724421	0.579723	0.433066
O	O99	0.644405	0.532423	0.451012
H	H100	0.784417	0.593106	0.464515
H	H101	0.570201	0.517062	0.406560

Transition state of R84 CHCHO* + H* = CHCHOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894

Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166397	0.000801	0.203005
Pd	Pd50	0.166105	0.250170	0.202866
Pd	Pd51	0.166006	0.500183	0.202813
Pd	Pd52	0.166134	0.750761	0.202872
Pd	Pd53	0.665810	0.999830	0.203059
Pd	Pd54	0.665535	0.249819	0.202990
Pd	Pd55	0.665905	0.500108	0.202849
Pd	Pd56	0.665152	0.749995	0.203392
Pd	Pd57	0.331475	0.126320	0.237102
Pd	Pd58	0.331113	0.374469	0.236586
Pd	Pd59	0.331178	0.625131	0.235932
Pd	Pd60	0.331556	0.875641	0.236243
Pd	Pd61	0.830854	0.124952	0.236260
Pd	Pd62	0.831223	0.374809	0.235839
Pd	Pd63	0.830613	0.625279	0.236006
Pd	Pd64	0.830445	0.875167	0.236309
Pd	Pd65	0.999348	0.000329	0.268415
Pd	Pd66	0.999301	0.250140	0.268437
Pd	Pd67	0.998921	0.500365	0.268448
Pd	Pd68	0.998780	0.750589	0.268373
Pd	Pd69	0.499848	0.999576	0.268797
Pd	Pd70	0.499103	0.250548	0.269776
Pd	Pd71	0.500186	0.500149	0.269024
Pd	Pd72	0.499112	0.748369	0.270478
Pd	Pd73	0.166004	0.126535	0.307990
Pd	Pd74	0.164224	0.375657	0.307270
Pd	Pd75	0.164314	0.626654	0.307157
Pd	Pd76	0.165332	0.877009	0.307625
Pd	Pd77	0.666202	0.124365	0.308015
Pd	Pd78	0.667538	0.374688	0.307287
Pd	Pd79	0.666000	0.625187	0.308375
Pd	Pd80	0.665880	0.875102	0.308600
Pd	Pd81	0.830691	0.750133	0.338532
Pd	Pd82	0.330987	0.002091	0.338590
Pd	Pd83	0.329543	0.253531	0.342303
Pd	Pd84	0.328401	0.501550	0.337045
Pd	Pd85	0.329047	0.751580	0.338082
Pd	Pd86	0.831065	0.000020	0.338691
Pd	Pd87	0.831081	0.249755	0.338428
Pd	Pd88	0.830602	0.500110	0.338190
Pd	Pd89	0.998108	0.125138	0.368363
Pd	Pd90	0.997507	0.375179	0.368521
Pd	Pd91	0.997467	0.625294	0.368463
Pd	Pd92	0.997793	0.875077	0.368438
Pd	Pd93	0.498316	0.125193	0.368781
Pd	Pd94	0.502259	0.372944	0.369629
Pd	Pd95	0.495384	0.625879	0.371390
Pd	Pd96	0.497088	0.875088	0.369015
C	C97	0.496146	0.494371	0.433462
C	C98	0.406461	0.491159	0.466519
O	O99	0.324301	0.442657	0.453310

H	H100	0.564933	0.509437	0.457918
H	H101	0.409146	0.535846	0.508763
H	H102	0.337075	0.385316	0.394152

Transition state of R85 $\text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165926	0.999759	0.202865
Pd	Pd50	0.165989	0.249817	0.202937
Pd	Pd51	0.165803	0.499795	0.202931
Pd	Pd52	0.165926	0.749899	0.202829
Pd	Pd53	0.665850	0.000155	0.203023
Pd	Pd54	0.665441	0.249820	0.203244
Pd	Pd55	0.665768	0.499522	0.202998
Pd	Pd56	0.665383	0.750475	0.202712
Pd	Pd57	0.331222	0.124787	0.236138
Pd	Pd58	0.330985	0.374922	0.236181
Pd	Pd59	0.330985	0.624731	0.236107
Pd	Pd60	0.331208	0.874405	0.236238
Pd	Pd61	0.830576	0.125072	0.236310
Pd	Pd62	0.830855	0.375158	0.236254
Pd	Pd63	0.831235	0.625050	0.235955
Pd	Pd64	0.830703	0.875023	0.236200
Pd	Pd65	0.999084	0.999944	0.268452
Pd	Pd66	0.999253	0.250007	0.268416
Pd	Pd67	0.999194	0.499933	0.268679
Pd	Pd68	0.999518	0.749958	0.268495
Pd	Pd69	0.499410	0.999558	0.268487
Pd	Pd70	0.499674	0.250533	0.269490
Pd	Pd71	0.500121	0.499844	0.269162
Pd	Pd72	0.499042	0.748276	0.269835
Pd	Pd73	0.164933	0.124379	0.307576
Pd	Pd74	0.165737	0.374696	0.307824
Pd	Pd75	0.165710	0.624836	0.307735
Pd	Pd76	0.165306	0.874831	0.307635
Pd	Pd77	0.665766	0.124274	0.308443
Pd	Pd78	0.666533	0.374086	0.309110
Pd	Pd79	0.666865	0.626553	0.306171
Pd	Pd80	0.665967	0.875546	0.308100
Pd	Pd81	0.831275	0.750708	0.338319
Pd	Pd82	0.330124	0.999551	0.338271
Pd	Pd83	0.330121	0.249134	0.337978
Pd	Pd84	0.331136	0.499748	0.337928
Pd	Pd85	0.330429	0.749790	0.338326
Pd	Pd86	0.831049	0.000098	0.338620
Pd	Pd87	0.831638	0.249577	0.338414
Pd	Pd88	0.831008	0.500982	0.338971
Pd	Pd89	0.998111	0.124846	0.368584
Pd	Pd90	0.998044	0.374964	0.368402
Pd	Pd91	0.998347	0.625471	0.368566
Pd	Pd92	0.998091	0.875236	0.368509
Pd	Pd93	0.497083	0.122710	0.368717
Pd	Pd94	0.497982	0.371562	0.369631
Pd	Pd95	0.499853	0.628410	0.370061
Pd	Pd96	0.497565	0.875768	0.368688
C	C97	0.520574	0.537177	0.449091
C	C98	0.626577	0.549410	0.449761
O	O99	0.687491	0.470454	0.430864
H	H100	0.492888	0.441529	0.452513

H	H101	0.478216	0.598695	0.476706
H	H102	0.658846	0.632996	0.468231
H	H103	0.640658	0.400978	0.381443

Transition state of R86 $\text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + ^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166099	0.000342	0.203104
Pd	Pd50	0.166139	0.250201	0.203062
Pd	Pd51	0.165811	0.500122	0.202987
Pd	Pd52	0.165916	0.750249	0.203061
Pd	Pd53	0.666024	0.999666	0.202859
Pd	Pd54	0.666163	0.249271	0.202483
Pd	Pd55	0.665699	0.499735	0.202389
Pd	Pd56	0.665777	0.750167	0.202650
Pd	Pd57	0.331243	0.125460	0.236500
Pd	Pd58	0.331063	0.375534	0.236172
Pd	Pd59	0.330803	0.624959	0.236303
Pd	Pd60	0.331071	0.875015	0.236398
Pd	Pd61	0.831149	0.124893	0.236203
Pd	Pd62	0.831114	0.375356	0.236827
Pd	Pd63	0.830543	0.623897	0.236909
Pd	Pd64	0.830820	0.874280	0.236285
Pd	Pd65	0.999421	0.999785	0.268377
Pd	Pd66	0.999962	0.249733	0.268545
Pd	Pd67	0.998001	0.499738	0.268830
Pd	Pd68	0.999239	0.749678	0.268515
Pd	Pd69	0.499656	0.999883	0.268264
Pd	Pd70	0.499439	0.250280	0.268812
Pd	Pd71	0.499043	0.499457	0.269392
Pd	Pd72	0.498865	0.749570	0.268945
Pd	Pd73	0.166689	0.125851	0.308210
Pd	Pd74	0.165680	0.375143	0.308010
Pd	Pd75	0.165119	0.625253	0.307942
Pd	Pd76	0.165466	0.876050	0.307904
Pd	Pd77	0.666255	0.123510	0.307904
Pd	Pd78	0.666158	0.372315	0.305528
Pd	Pd79	0.664915	0.626078	0.305852
Pd	Pd80	0.665956	0.875002	0.308205
Pd	Pd81	0.830026	0.749121	0.338769
Pd	Pd82	0.330945	0.000485	0.338598
Pd	Pd83	0.333913	0.253053	0.338464
Pd	Pd84	0.331053	0.500730	0.338509
Pd	Pd85	0.330577	0.749526	0.338669
Pd	Pd86	0.831120	0.999054	0.338376
Pd	Pd87	0.831216	0.248203	0.338598
Pd	Pd88	0.824470	0.498485	0.343187
Pd	Pd89	0.998379	0.124068	0.368306
Pd	Pd90	0.996403	0.374847	0.368202
Pd	Pd91	0.995642	0.623473	0.368149
Pd	Pd92	0.997423	0.873920	0.368304
Pd	Pd93	0.498533	0.123518	0.368325
Pd	Pd94	0.501926	0.372668	0.371577
Pd	Pd95	0.500940	0.626088	0.370943
Pd	Pd96	0.497677	0.875479	0.368313
C	C97	0.534022	0.582072	0.489254
C	C98	0.597751	0.570522	0.436773
O	O99	0.628004	0.458605	0.423061
H	H100	0.500434	0.672994	0.492440

H	H101	0.581164	0.568266	0.527179
H	H102	0.475153	0.512824	0.489855
H	H103	0.653869	0.642637	0.429401
H	H104	0.701609	0.465487	0.376073

Transition state of R87 CCH₂O* + H* = CCH₂OH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894

Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165742	0.999735	0.202673
Pd	Pd50	0.165842	0.249441	0.202658
Pd	Pd51	0.166389	0.499846	0.202300
Pd	Pd52	0.165878	0.750121	0.202569
Pd	Pd53	0.665918	0.000944	0.202943
Pd	Pd54	0.665508	0.251918	0.204266
Pd	Pd55	0.664923	0.500219	0.204086
Pd	Pd56	0.665592	0.749646	0.203629
Pd	Pd57	0.330966	0.124417	0.235955
Pd	Pd58	0.330939	0.374507	0.235942
Pd	Pd59	0.331090	0.624759	0.235412
Pd	Pd60	0.331080	0.874737	0.235890
Pd	Pd61	0.830468	0.125664	0.236294
Pd	Pd62	0.829813	0.375469	0.236885
Pd	Pd63	0.830905	0.625536	0.236291
Pd	Pd64	0.830848	0.875473	0.236035
Pd	Pd65	0.999070	0.000365	0.268332
Pd	Pd66	0.998792	0.249979	0.268335
Pd	Pd67	0.999089	0.500331	0.268591
Pd	Pd68	0.999735	0.750744	0.268422
Pd	Pd69	0.499467	0.000026	0.268464
Pd	Pd70	0.499534	0.250568	0.268924
Pd	Pd71	0.497777	0.500285	0.270286
Pd	Pd72	0.499258	0.748589	0.269737
Pd	Pd73	0.164512	0.123282	0.307229
Pd	Pd74	0.164751	0.374382	0.306468
Pd	Pd75	0.165587	0.625655	0.306538
Pd	Pd76	0.165778	0.875052	0.307453
Pd	Pd77	0.665648	0.126715	0.308512
Pd	Pd78	0.662693	0.376809	0.315120
Pd	Pd79	0.663909	0.628923	0.310874
Pd	Pd80	0.666252	0.876592	0.307678
Pd	Pd81	0.833767	0.753894	0.338417
Pd	Pd82	0.330217	0.999120	0.338177
Pd	Pd83	0.326951	0.247765	0.337708
Pd	Pd84	0.327145	0.500588	0.337705
Pd	Pd85	0.331384	0.748861	0.337114
Pd	Pd86	0.831288	0.001254	0.338078
Pd	Pd87	0.832743	0.248628	0.338984
Pd	Pd88	0.836172	0.500792	0.341085
Pd	Pd89	0.999345	0.125057	0.368737
Pd	Pd90	0.000650	0.374427	0.368572
Pd	Pd91	0.001162	0.627130	0.368589
Pd	Pd92	0.000003	0.877078	0.368731
Pd	Pd93	0.496361	0.124850	0.368532
Pd	Pd94	0.486868	0.371341	0.370797
Pd	Pd95	0.491914	0.630290	0.375331
Pd	Pd96	0.497464	0.876452	0.368473
C	C97	0.701032	0.508722	0.368955
C	C98	0.677513	0.526312	0.431181
O	O99	0.586868	0.584555	0.443257

H	H100	0.682149	0.436037	0.452220
H	H101	0.738222	0.583848	0.448560
H	H102	0.504556	0.488294	0.414651

Transition state of R88 CHCH₂O* + H* = CHCH₂OH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165940	0.999910	0.202911
Pd	Pd50	0.166221	0.250116	0.202989
Pd	Pd51	0.166008	0.500063	0.202903
Pd	Pd52	0.165988	0.750050	0.202915
Pd	Pd53	0.666051	0.000538	0.202645
Pd	Pd54	0.665513	0.250749	0.204171
Pd	Pd55	0.665851	0.498572	0.203003
Pd	Pd56	0.666126	0.750363	0.202051
Pd	Pd57	0.331153	0.125521	0.236230
Pd	Pd58	0.331795	0.375656	0.236185
Pd	Pd59	0.331238	0.625022	0.236109
Pd	Pd60	0.330790	0.875088	0.236357
Pd	Pd61	0.830871	0.124443	0.236311
Pd	Pd62	0.830282	0.374693	0.236451
Pd	Pd63	0.831908	0.625662	0.236011
Pd	Pd64	0.830623	0.874282	0.237053
Pd	Pd65	0.998996	0.999541	0.268402
Pd	Pd66	0.999752	0.249690	0.268370
Pd	Pd67	0.000452	0.499417	0.268492
Pd	Pd68	0.998566	0.749773	0.268855
Pd	Pd69	0.499231	0.000976	0.268299
Pd	Pd70	0.500400	0.250924	0.269380
Pd	Pd71	0.499884	0.500836	0.269874
Pd	Pd72	0.499053	0.750707	0.268584
Pd	Pd73	0.164883	0.124119	0.307470
Pd	Pd74	0.166651	0.375060	0.307627
Pd	Pd75	0.165795	0.625784	0.307711
Pd	Pd76	0.165215	0.874589	0.307887
Pd	Pd77	0.666361	0.123874	0.308199
Pd	Pd78	0.667866	0.375684	0.314416
Pd	Pd79	0.666149	0.626218	0.303278
Pd	Pd80	0.665380	0.877105	0.307247
Pd	Pd81	0.826717	0.747735	0.342803
Pd	Pd82	0.329930	0.000446	0.338250
Pd	Pd83	0.330717	0.250824	0.338047
Pd	Pd84	0.331291	0.501095	0.338364
Pd	Pd85	0.332295	0.748365	0.338227
Pd	Pd86	0.830910	0.998913	0.338934
Pd	Pd87	0.833643	0.248388	0.338340
Pd	Pd88	0.835844	0.499155	0.337765
Pd	Pd89	0.998828	0.123045	0.368622
Pd	Pd90	0.000381	0.373424	0.368760
Pd	Pd91	0.999169	0.625007	0.368677
Pd	Pd92	0.996863	0.873586	0.368502
Pd	Pd93	0.496595	0.124566	0.368581
Pd	Pd94	0.495381	0.375927	0.371857
Pd	Pd95	0.496243	0.630411	0.372685
Pd	Pd96	0.496843	0.876937	0.368146
C	C97	0.637001	0.391250	0.398264
C	C98	0.665260	0.501298	0.432696
O	O99	0.636660	0.617951	0.413520
H	H100	0.660635	0.307051	0.420159

H	H101	0.634244	0.487459	0.476020
H	H102	0.748052	0.500075	0.437542
H	H103	0.721081	0.669468	0.371863

Transition state of R89 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166129	0.999163	0.202892
Pd	Pd50	0.166084	0.249567	0.202669
Pd	Pd51	0.166166	0.499887	0.202847
Pd	Pd52	0.166348	0.749112	0.202935
Pd	Pd53	0.665875	0.000169	0.202982
Pd	Pd54	0.665167	0.250086	0.203305
Pd	Pd55	0.665717	0.500043	0.202855
Pd	Pd56	0.666057	0.750184	0.202821
Pd	Pd57	0.331255	0.124761	0.235862
Pd	Pd58	0.330882	0.375505	0.236984
Pd	Pd59	0.331034	0.623477	0.237816
Pd	Pd60	0.331292	0.873813	0.236202
Pd	Pd61	0.830435	0.124816	0.236217
Pd	Pd62	0.830683	0.374812	0.235803
Pd	Pd63	0.831091	0.625113	0.236049
Pd	Pd64	0.830900	0.875025	0.236259
Pd	Pd65	0.999043	0.999598	0.268428
Pd	Pd66	0.998685	0.249521	0.268299
Pd	Pd67	0.999307	0.499829	0.268377
Pd	Pd68	0.999635	0.749609	0.268427
Pd	Pd69	0.499783	0.000229	0.268382
Pd	Pd70	0.499339	0.251382	0.270308
Pd	Pd71	0.498992	0.499511	0.269612
Pd	Pd72	0.499869	0.750316	0.268189
Pd	Pd73	0.164805	0.123324	0.307334
Pd	Pd74	0.164418	0.373530	0.306636
Pd	Pd75	0.165632	0.624360	0.308032
Pd	Pd76	0.165541	0.873780	0.307765
Pd	Pd77	0.665973	0.124841	0.308238
Pd	Pd78	0.665434	0.375316	0.307830
Pd	Pd79	0.666613	0.625549	0.307443
Pd	Pd80	0.666111	0.875457	0.308052
Pd	Pd81	0.831067	0.750105	0.338373
Pd	Pd82	0.330744	0.998187	0.337812
Pd	Pd83	0.329371	0.246854	0.337257
Pd	Pd84	0.326578	0.498228	0.343731
Pd	Pd85	0.331052	0.748487	0.338860
Pd	Pd86	0.830905	0.000060	0.338658
Pd	Pd87	0.830380	0.250191	0.338293
Pd	Pd88	0.830748	0.499953	0.338043
Pd	Pd89	0.997577	0.125066	0.368408
Pd	Pd90	0.997650	0.374630	0.368312
Pd	Pd91	0.997888	0.624748	0.368385
Pd	Pd92	0.997934	0.874882	0.368446
Pd	Pd93	0.497361	0.122188	0.368530
Pd	Pd94	0.496437	0.370716	0.371431
Pd	Pd95	0.500285	0.625567	0.368708
Pd	Pd96	0.498294	0.873443	0.368232
C	C97	0.286442	0.459072	0.426591
C	C98	0.370793	0.472016	0.468502
O	O99	0.459730	0.407013	0.456117
H	H100	0.258336	0.364827	0.424358

H	H101	0.225041	0.522655	0.435124
H	H102	0.387834	0.569676	0.475147
H	H103	0.344340	0.435470	0.509936
H	H104	0.512366	0.506444	0.413626

Transition state of R90 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894

Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166073	0.999897	0.203065
Pd	Pd50	0.166079	0.249846	0.203042
Pd	Pd51	0.165756	0.499892	0.203016
Pd	Pd52	0.166082	0.749972	0.203051
Pd	Pd53	0.665885	0.999960	0.202899
Pd	Pd54	0.665970	0.249445	0.202620
Pd	Pd55	0.665454	0.499783	0.202820
Pd	Pd56	0.665995	0.750348	0.202564
Pd	Pd57	0.331230	0.125055	0.236363
Pd	Pd58	0.330968	0.375077	0.236227
Pd	Pd59	0.330938	0.624537	0.236239
Pd	Pd60	0.331215	0.874563	0.236370
Pd	Pd61	0.830954	0.124934	0.236296
Pd	Pd62	0.830948	0.375034	0.236337
Pd	Pd63	0.831013	0.624693	0.236231
Pd	Pd64	0.830928	0.874882	0.236255
Pd	Pd65	0.999531	0.999853	0.268368
Pd	Pd66	0.999624	0.249941	0.268549
Pd	Pd67	0.998541	0.499854	0.268701
Pd	Pd68	0.999685	0.749752	0.268523
Pd	Pd69	0.499650	0.999824	0.268341
Pd	Pd70	0.499519	0.249904	0.268852
Pd	Pd71	0.498398	0.499743	0.270026
Pd	Pd72	0.499453	0.749736	0.268785
Pd	Pd73	0.166517	0.124678	0.308036
Pd	Pd74	0.165263	0.374411	0.307931
Pd	Pd75	0.165315	0.625052	0.307934
Pd	Pd76	0.166465	0.874850	0.308037
Pd	Pd77	0.666187	0.123826	0.308195
Pd	Pd78	0.665497	0.372069	0.306489
Pd	Pd79	0.665537	0.627324	0.306121
Pd	Pd80	0.666197	0.875579	0.308124
Pd	Pd81	0.831255	0.750436	0.338475
Pd	Pd82	0.331227	0.999655	0.338668
Pd	Pd83	0.332621	0.251177	0.338197
Pd	Pd84	0.329067	0.499617	0.338898
Pd	Pd85	0.332527	0.748216	0.338184
Pd	Pd86	0.831500	0.999704	0.338491
Pd	Pd87	0.831185	0.248894	0.338710
Pd	Pd88	0.827736	0.499601	0.340198
Pd	Pd89	0.998580	0.124630	0.368371
Pd	Pd90	0.996525	0.375120	0.368354
Pd	Pd91	0.996564	0.624325	0.368371
Pd	Pd92	0.998536	0.874719	0.368375
Pd	Pd93	0.498501	0.123074	0.368574
Pd	Pd94	0.494596	0.369286	0.372222
Pd	Pd95	0.494601	0.630336	0.371969
Pd	Pd96	0.498602	0.876164	0.368591
C	C97	0.701336	0.619459	0.474010
C	C98	0.641653	0.503640	0.465376
O	O99	0.599304	0.500453	0.408941

H	H100	0.732896	0.621940	0.517146
H	H101	0.762934	0.624350	0.443143
H	H102	0.654324	0.700310	0.467868
H	H103	0.580377	0.496596	0.496308
H	H104	0.689064	0.422295	0.469823
H	H105	0.674801	0.495610	0.362514

Transition state of R91 CCOO* + H* = CCOOH* + * on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894

Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165887	0.000007	0.202615
Pd	Pd50	0.165892	0.249636	0.202531
Pd	Pd51	0.165990	0.500004	0.202291
Pd	Pd52	0.165893	0.750377	0.202532
Pd	Pd53	0.666462	0.000001	0.202866
Pd	Pd54	0.665855	0.250722	0.203616
Pd	Pd55	0.665519	0.500005	0.203295
Pd	Pd56	0.665855	0.749276	0.203615
Pd	Pd57	0.331099	0.124840	0.235900
Pd	Pd58	0.330903	0.375048	0.235687
Pd	Pd59	0.330903	0.624965	0.235691
Pd	Pd60	0.331092	0.875188	0.235900
Pd	Pd61	0.831382	0.125573	0.236324
Pd	Pd62	0.831182	0.375742	0.237046
Pd	Pd63	0.831182	0.624271	0.237051
Pd	Pd64	0.831371	0.874436	0.236322
Pd	Pd65	0.000242	0.000003	0.268312
Pd	Pd66	0.000167	0.249986	0.268614
Pd	Pd67	0.998844	0.500011	0.269770
Pd	Pd68	0.000162	0.750024	0.268615
Pd	Pd69	0.499794	0.000014	0.268236
Pd	Pd70	0.498869	0.250432	0.269327
Pd	Pd71	0.497732	0.500012	0.269656
Pd	Pd72	0.498860	0.749600	0.269327
Pd	Pd73	0.166659	0.124346	0.307430
Pd	Pd74	0.166281	0.374394	0.306434
Pd	Pd75	0.166273	0.625628	0.306436
Pd	Pd76	0.166648	0.875691	0.307426
Pd	Pd77	0.666936	0.124021	0.308032
Pd	Pd78	0.663749	0.370807	0.309581
Pd	Pd79	0.663741	0.629220	0.309587
Pd	Pd80	0.666927	0.876006	0.308031
Pd	Pd81	0.834451	0.751721	0.338924
Pd	Pd82	0.331104	0.000011	0.338376
Pd	Pd83	0.331123	0.249964	0.337434
Pd	Pd84	0.328690	0.500017	0.338100
Pd	Pd85	0.331110	0.750070	0.337435
Pd	Pd86	0.832906	0.000017	0.337781
Pd	Pd87	0.834461	0.248304	0.338926
Pd	Pd88	0.838828	0.500012	0.345947
Pd	Pd89	0.001160	0.123816	0.368644
Pd	Pd90	0.004502	0.372770	0.369664
Pd	Pd91	0.004496	0.627268	0.369667
Pd	Pd92	0.001159	0.876209	0.368648
Pd	Pd93	0.498511	0.123077	0.368485
Pd	Pd94	0.492255	0.370147	0.372054
Pd	Pd95	0.492232	0.629909	0.372055
Pd	Pd96	0.498498	0.876964	0.368481
C	C97	0.696632	0.500008	0.363416

C	C98	0.662210	0.500022	0.423593
O	O99	0.566382	0.500009	0.433030
O	O100	0.727914	0.500055	0.461330
H	H101	0.819778	0.500063	0.414674

Transition state of R92 CHCOO* + H* = CHCOOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894

Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165899	0.000068	0.202826
Pd	Pd50	0.166103	0.249947	0.202831
Pd	Pd51	0.165704	0.499973	0.202586
Pd	Pd52	0.165866	0.750346	0.202738
Pd	Pd53	0.666059	0.999914	0.202793
Pd	Pd54	0.665681	0.250387	0.204183
Pd	Pd55	0.665738	0.498484	0.203253
Pd	Pd56	0.665634	0.750219	0.202132
Pd	Pd57	0.331292	0.125567	0.236094
Pd	Pd58	0.331583	0.375384	0.236068
Pd	Pd59	0.330800	0.624697	0.235798
Pd	Pd60	0.330969	0.875220	0.236168
Pd	Pd61	0.830911	0.123771	0.236297
Pd	Pd62	0.830960	0.374817	0.236655
Pd	Pd63	0.831322	0.624995	0.236490
Pd	Pd64	0.830497	0.873475	0.236935
Pd	Pd65	0.998872	0.998991	0.268465
Pd	Pd66	0.000013	0.248871	0.268385
Pd	Pd67	0.000122	0.498887	0.268613
Pd	Pd68	0.998788	0.749470	0.268800
Pd	Pd69	0.499702	0.000642	0.268251
Pd	Pd70	0.500529	0.250619	0.269446
Pd	Pd71	0.499168	0.500439	0.269555
Pd	Pd72	0.498304	0.749805	0.268952
Pd	Pd73	0.165310	0.124075	0.307357
Pd	Pd74	0.167349	0.374443	0.307156
Pd	Pd75	0.165964	0.625503	0.306817
Pd	Pd76	0.165314	0.875258	0.307660
Pd	Pd77	0.666876	0.122185	0.308304
Pd	Pd78	0.668494	0.374738	0.313023
Pd	Pd79	0.664572	0.627072	0.304144
Pd	Pd80	0.666497	0.874321	0.307863
Pd	Pd81	0.829385	0.746005	0.342769
Pd	Pd82	0.330384	0.000919	0.338137
Pd	Pd83	0.331598	0.251033	0.337968
Pd	Pd84	0.330901	0.500440	0.338189
Pd	Pd85	0.330927	0.749793	0.337604
Pd	Pd86	0.831392	0.996982	0.339060
Pd	Pd87	0.834549	0.246069	0.338289
Pd	Pd88	0.836558	0.496816	0.338574
Pd	Pd89	0.999858	0.121455	0.368815
Pd	Pd90	0.002910	0.371192	0.368758
Pd	Pd91	0.002063	0.624025	0.368538
Pd	Pd92	0.998298	0.873128	0.368845
Pd	Pd93	0.497381	0.124682	0.368667
Pd	Pd94	0.496657	0.375475	0.372066
Pd	Pd95	0.495284	0.630822	0.371771
Pd	Pd96	0.497559	0.877824	0.367865
C	C97	0.638038	0.400040	0.396578
C	C98	0.666494	0.520606	0.421004
O	O99	0.601600	0.597183	0.437034

O	O100	0.761573	0.544724	0.426253
H	H101	0.666041	0.322845	0.422002
H	H102	0.788455	0.646701	0.394355

Transition state of R93 $\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COOH}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165961	0.000561	0.203145
Pd	Pd50	0.166165	0.250436	0.203048
Pd	Pd51	0.165761	0.500562	0.202886
Pd	Pd52	0.165989	0.750524	0.203092
Pd	Pd53	0.666196	0.999405	0.202886
Pd	Pd54	0.666017	0.248733	0.202451
Pd	Pd55	0.666135	0.499156	0.201789
Pd	Pd56	0.666270	0.750295	0.201932
Pd	Pd57	0.331285	0.126401	0.236395
Pd	Pd58	0.331204	0.376186	0.236077
Pd	Pd59	0.330982	0.625376	0.236063
Pd	Pd60	0.330648	0.875711	0.236296
Pd	Pd61	0.831216	0.124026	0.236137
Pd	Pd62	0.831004	0.375307	0.237116
Pd	Pd63	0.831474	0.623294	0.237849
Pd	Pd64	0.830647	0.872711	0.237154
Pd	Pd65	0.999318	0.999221	0.268404
Pd	Pd66	0.000147	0.249314	0.268381
Pd	Pd67	0.998856	0.499117	0.269228
Pd	Pd68	0.998191	0.749228	0.268841
Pd	Pd69	0.498848	0.001179	0.268087
Pd	Pd70	0.499324	0.251840	0.269422
Pd	Pd71	0.499049	0.500510	0.269595
Pd	Pd72	0.498519	0.750930	0.268482
Pd	Pd73	0.166286	0.126034	0.308175
Pd	Pd74	0.167133	0.375790	0.308000
Pd	Pd75	0.165804	0.625492	0.308034
Pd	Pd76	0.164974	0.875528	0.308210
Pd	Pd77	0.665974	0.123222	0.307938
Pd	Pd78	0.666197	0.371601	0.305133
Pd	Pd79	0.664750	0.624545	0.302701
Pd	Pd80	0.664500	0.875623	0.307500
Pd	Pd81	0.824246	0.745900	0.343170
Pd	Pd82	0.329924	0.001832	0.338408
Pd	Pd83	0.333304	0.253369	0.338312
Pd	Pd84	0.333030	0.501608	0.338351
Pd	Pd85	0.330700	0.750276	0.337946
Pd	Pd86	0.830465	0.997324	0.338523
Pd	Pd87	0.831976	0.246326	0.337779
Pd	Pd88	0.827628	0.494133	0.344995
Pd	Pd89	0.998165	0.122110	0.368292
Pd	Pd90	0.999679	0.372562	0.368303
Pd	Pd91	0.996617	0.623093	0.368061
Pd	Pd92	0.995648	0.871577	0.368278
Pd	Pd93	0.498027	0.124915	0.368445
Pd	Pd94	0.503256	0.374931	0.372178
Pd	Pd95	0.496452	0.632588	0.371632
Pd	Pd96	0.496111	0.878424	0.368076
C	C97	0.781318	0.484010	0.430285
C	C98	0.674044	0.511289	0.428279
O	O99	0.610239	0.427619	0.436083
O	O100	0.646732	0.624761	0.417820

H	H101	0.796484	0.392294	0.446225
H	H102	0.824912	0.554689	0.451739
H	H103	0.717408	0.679279	0.377977

Transition state of R94 $\text{CH}_3\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COOH}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165897	0.999854	0.202927
Pd	Pd50	0.165788	0.249909	0.202833
Pd	Pd51	0.165786	0.500065	0.202836
Pd	Pd52	0.165901	0.750127	0.202926
Pd	Pd53	0.665956	0.999960	0.202921
Pd	Pd54	0.665556	0.249938	0.202976
Pd	Pd55	0.665560	0.500052	0.202977
Pd	Pd56	0.665956	0.750029	0.202921
Pd	Pd57	0.330748	0.125064	0.236205
Pd	Pd58	0.330714	0.374986	0.235949
Pd	Pd59	0.330746	0.624916	0.236203
Pd	Pd60	0.330949	0.875001	0.236280
Pd	Pd61	0.830830	0.125418	0.236407
Pd	Pd62	0.830726	0.374997	0.236513
Pd	Pd63	0.830832	0.624571	0.236409
Pd	Pd64	0.830864	0.874988	0.236232
Pd	Pd65	0.999354	0.000004	0.268436
Pd	Pd66	0.999138	0.250100	0.268637
Pd	Pd67	0.999138	0.499897	0.268638
Pd	Pd68	0.999353	0.749972	0.268433
Pd	Pd69	0.499285	0.000124	0.268377
Pd	Pd70	0.498858	0.251086	0.269292
Pd	Pd71	0.498866	0.498905	0.269287
Pd	Pd72	0.499282	0.749866	0.268376
Pd	Pd73	0.165548	0.125005	0.307766
Pd	Pd74	0.166216	0.374979	0.307708
Pd	Pd75	0.165544	0.624957	0.307765
Pd	Pd76	0.165753	0.874990	0.307971
Pd	Pd77	0.665812	0.123855	0.307534
Pd	Pd78	0.666005	0.374994	0.308023
Pd	Pd79	0.665817	0.626133	0.307532
Pd	Pd80	0.665667	0.874990	0.308301
Pd	Pd81	0.830953	0.750002	0.338351
Pd	Pd82	0.330525	0.000206	0.338392
Pd	Pd83	0.331504	0.250372	0.338078
Pd	Pd84	0.331517	0.499596	0.338080
Pd	Pd85	0.330522	0.749761	0.338390
Pd	Pd86	0.830951	0.999987	0.338349
Pd	Pd87	0.830834	0.249420	0.339985
Pd	Pd88	0.830838	0.500567	0.339989
Pd	Pd89	0.998210	0.124785	0.368427
Pd	Pd90	0.999186	0.374992	0.368507
Pd	Pd91	0.998204	0.625204	0.368428
Pd	Pd92	0.997756	0.874995	0.368337
Pd	Pd93	0.497890	0.123505	0.368143
Pd	Pd94	0.502847	0.374950	0.370339
Pd	Pd95	0.497900	0.626439	0.368141
Pd	Pd96	0.497530	0.874988	0.368398
C	C97	0.656542	0.375722	0.534200
C	C98	0.645173	0.375345	0.469821
O	O99	0.554338	0.375202	0.452466
O	O100	0.724053	0.375093	0.440669

H	H101	0.699629	0.295451	0.547021
H	H102	0.698952	0.456686	0.546795
H	H103	0.584072	0.375458	0.555318
H	H104	0.734461	0.375029	0.371736

Transition state of R95 CCHOO* + H* = CCHOOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000	
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000	
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000	
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000	
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000	
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000	
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000	
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000	
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723	
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723	
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723	
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723	
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723	
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723	
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723	
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723	
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447	
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447	
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447	
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447	
Pd Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447	
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447	
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447	
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447	
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170	
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170	
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170	
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170	
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170	
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170	
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170	
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170	
Pd Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894	
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894	
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894	
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894	
Pd Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894	
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894	
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894	

Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165659	0.000071	0.202672
Pd	Pd50	0.165838	0.249816	0.202653
Pd	Pd51	0.166105	0.500025	0.202418
Pd	Pd52	0.165892	0.750212	0.202680
Pd	Pd53	0.665998	0.999827	0.202842
Pd	Pd54	0.665749	0.251031	0.203589
Pd	Pd55	0.664740	0.500090	0.203806
Pd	Pd56	0.665881	0.749051	0.203755
Pd	Pd57	0.330926	0.125238	0.235954
Pd	Pd58	0.331162	0.375545	0.235580
Pd	Pd59	0.331229	0.624974	0.235520
Pd	Pd60	0.330919	0.875227	0.235853
Pd	Pd61	0.830839	0.125141	0.236110
Pd	Pd62	0.830423	0.375243	0.236868
Pd	Pd63	0.831196	0.624725	0.236745
Pd	Pd64	0.830952	0.874754	0.236200
Pd	Pd65	0.999121	0.999818	0.268309
Pd	Pd66	0.999451	0.249579	0.268496
Pd	Pd67	0.998544	0.499777	0.269007
Pd	Pd68	0.999755	0.750082	0.268521
Pd	Pd69	0.499206	0.000454	0.268046
Pd	Pd70	0.499358	0.251475	0.269391
Pd	Pd71	0.498021	0.501062	0.271061
Pd	Pd72	0.499216	0.749556	0.269457
Pd	Pd73	0.165084	0.124609	0.307164
Pd	Pd74	0.165436	0.374977	0.306825
Pd	Pd75	0.165988	0.624420	0.306910
Pd	Pd76	0.165272	0.875164	0.307242
Pd	Pd77	0.666455	0.124643	0.307678
Pd	Pd78	0.663855	0.372863	0.311224
Pd	Pd79	0.664836	0.627098	0.310938
Pd	Pd80	0.665997	0.876180	0.308042
Pd	Pd81	0.833938	0.752694	0.338792
Pd	Pd82	0.329278	0.000480	0.337897
Pd	Pd83	0.330363	0.250981	0.336847
Pd	Pd84	0.330697	0.500140	0.338065
Pd	Pd85	0.330124	0.749430	0.336769
Pd	Pd86	0.832010	0.999878	0.337978
Pd	Pd87	0.833734	0.246966	0.338829
Pd	Pd88	0.834657	0.499601	0.343360
Pd	Pd89	0.000247	0.123658	0.368920
Pd	Pd90	0.000852	0.373397	0.368837
Pd	Pd91	0.001098	0.625977	0.368764
Pd	Pd92	0.000385	0.875915	0.368906
Pd	Pd93	0.496937	0.123083	0.368202
Pd	Pd94	0.490456	0.367523	0.373383
Pd	Pd95	0.488617	0.635230	0.376760
Pd	Pd96	0.496030	0.878996	0.368295
C	C97	0.698135	0.497177	0.367904
C	C98	0.651626	0.499539	0.428634
O	O99	0.589746	0.399219	0.434497

O	O100	0.604588	0.610973	0.437001
H	H101	0.711980	0.491317	0.460683
H	H102	0.617536	0.679275	0.374028

Transition state of R96 CHCHOO* + H* = CHCHOOH* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166108	0.999540	0.202774
Pd	Pd50	0.166082	0.249598	0.202839
Pd	Pd51	0.165200	0.499646	0.202870
Pd	Pd52	0.166039	0.749822	0.202671
Pd	Pd53	0.666128	0.000297	0.202472
Pd	Pd54	0.665727	0.250740	0.203542
Pd	Pd55	0.665627	0.499193	0.203311
Pd	Pd56	0.665657	0.750250	0.202282
Pd	Pd57	0.331177	0.124895	0.236105
Pd	Pd58	0.331339	0.374842	0.236107
Pd	Pd59	0.331071	0.623953	0.235842
Pd	Pd60	0.331161	0.874248	0.236318
Pd	Pd61	0.831234	0.125034	0.236137
Pd	Pd62	0.830765	0.375514	0.237309
Pd	Pd63	0.831145	0.624991	0.236583
Pd	Pd64	0.830990	0.874724	0.236249
Pd	Pd65	0.999627	0.999618	0.268399
Pd	Pd66	0.000071	0.249553	0.268429
Pd	Pd67	0.997811	0.499223	0.269861
Pd	Pd68	0.999628	0.749666	0.268500
Pd	Pd69	0.499438	0.999879	0.268049
Pd	Pd70	0.500218	0.249937	0.269297
Pd	Pd71	0.500106	0.499893	0.269691
Pd	Pd72	0.498877	0.749097	0.269169
Pd	Pd73	0.165579	0.123648	0.307345
Pd	Pd74	0.167338	0.374500	0.307308
Pd	Pd75	0.166871	0.625005	0.306998
Pd	Pd76	0.166235	0.874205	0.307488
Pd	Pd77	0.666814	0.123136	0.307361
Pd	Pd78	0.668539	0.374825	0.311417
Pd	Pd79	0.665818	0.628427	0.305739
Pd	Pd80	0.666447	0.876761	0.307193
Pd	Pd81	0.831965	0.750906	0.339867
Pd	Pd82	0.330655	0.999147	0.338255
Pd	Pd83	0.331138	0.249454	0.338011
Pd	Pd84	0.332555	0.499394	0.338288
Pd	Pd85	0.333454	0.747542	0.337935
Pd	Pd86	0.832394	0.999461	0.338344
Pd	Pd87	0.834287	0.247979	0.338561
Pd	Pd88	0.834542	0.499198	0.342480
Pd	Pd89	0.000113	0.123418	0.368741
Pd	Pd90	0.002719	0.372851	0.369039
Pd	Pd91	0.002873	0.625366	0.368759
Pd	Pd92	0.999918	0.874779	0.368579
Pd	Pd93	0.497288	0.122133	0.368462
Pd	Pd94	0.497868	0.370845	0.371887
Pd	Pd95	0.501749	0.628872	0.371472
Pd	Pd96	0.498771	0.876657	0.368214
C	C97	0.641208	0.375507	0.395304
C	C98	0.664062	0.486915	0.431958
O	O99	0.584627	0.567332	0.435944
O	O100	0.754911	0.543205	0.418211

H	H101	0.665209	0.289119	0.414951
H	H102	0.675230	0.454016	0.476474
H	H103	0.739092	0.641952	0.368314

Transition state of R97 CH₂CHOO* + H* = CH₂CHOOH* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894

Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165727	0.999413	0.202939
Pd	Pd50	0.165867	0.249325	0.202945
Pd	Pd51	0.165700	0.499472	0.202802
Pd	Pd52	0.165927	0.749649	0.202897
Pd	Pd53	0.665787	0.000658	0.202630
Pd	Pd54	0.666090	0.251981	0.204101
Pd	Pd55	0.665554	0.499719	0.203655
Pd	Pd56	0.665793	0.750511	0.202390
Pd	Pd57	0.330618	0.124539	0.236191
Pd	Pd58	0.331113	0.374446	0.235870
Pd	Pd59	0.331140	0.623810	0.235674
Pd	Pd60	0.330838	0.874022	0.236222
Pd	Pd61	0.830596	0.125611	0.236092
Pd	Pd62	0.831456	0.376756	0.237121
Pd	Pd63	0.831308	0.625090	0.236744
Pd	Pd64	0.830931	0.875217	0.235881
Pd	Pd65	0.998951	0.999823	0.268287
Pd	Pd66	0.999258	0.249751	0.268278
Pd	Pd67	0.997899	0.500299	0.269181
Pd	Pd68	0.999557	0.750285	0.268468
Pd	Pd69	0.498707	0.999642	0.268104
Pd	Pd70	0.499254	0.249965	0.269050
Pd	Pd71	0.499288	0.499609	0.270133
Pd	Pd72	0.499093	0.748993	0.269203
Pd	Pd73	0.164506	0.123259	0.307676
Pd	Pd74	0.164586	0.373971	0.307479
Pd	Pd75	0.165535	0.624191	0.307499
Pd	Pd76	0.165633	0.873572	0.307974
Pd	Pd77	0.664917	0.123886	0.307791
Pd	Pd78	0.667415	0.375686	0.309481
Pd	Pd79	0.666513	0.629557	0.306301
Pd	Pd80	0.665905	0.877234	0.307580
Pd	Pd81	0.832116	0.752493	0.338208
Pd	Pd82	0.329242	0.997698	0.338258
Pd	Pd83	0.328253	0.249363	0.337757
Pd	Pd84	0.329621	0.498731	0.337663
Pd	Pd85	0.332654	0.746224	0.337525
Pd	Pd86	0.831328	0.000689	0.338027
Pd	Pd87	0.831752	0.249966	0.337848
Pd	Pd88	0.827634	0.503274	0.344465
Pd	Pd89	0.997680	0.125571	0.368554
Pd	Pd90	0.997888	0.375443	0.368282
Pd	Pd91	0.998349	0.625880	0.368424
Pd	Pd92	0.998763	0.876182	0.368710
Pd	Pd93	0.494406	0.122312	0.368278
Pd	Pd94	0.485422	0.367904	0.372676
Pd	Pd95	0.497650	0.624646	0.373466
Pd	Pd96	0.497178	0.876073	0.368189
C	C97	0.772551	0.500958	0.426388
C	C98	0.662139	0.471673	0.434703
O	O99	0.632618	0.375044	0.397589
O	O100	0.599795	0.571597	0.436315

H	H101	0.818819	0.431013	0.447008
H	H102	0.788852	0.591404	0.444103
H	H103	0.655038	0.431619	0.478256
H	H104	0.634923	0.645144	0.373270

Transition state of R98 $\text{CH}_3\text{CHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + ^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894

Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166189	0.000211	0.202975
Pd	Pd50	0.166121	0.250074	0.202994
Pd	Pd51	0.164970	0.500170	0.203160
Pd	Pd52	0.166024	0.750105	0.202945
Pd	Pd53	0.665974	0.000033	0.202805
Pd	Pd54	0.666007	0.249282	0.202339
Pd	Pd55	0.666106	0.500202	0.202239
Pd	Pd56	0.665739	0.750752	0.202402
Pd	Pd57	0.331355	0.125721	0.236465
Pd	Pd58	0.330781	0.375683	0.236236
Pd	Pd59	0.330808	0.624790	0.236224
Pd	Pd60	0.331054	0.874924	0.236400
Pd	Pd61	0.831210	0.125033	0.236166
Pd	Pd62	0.831378	0.375310	0.236946
Pd	Pd63	0.831155	0.624568	0.236793
Pd	Pd64	0.830895	0.874643	0.236327
Pd	Pd65	0.999799	0.999646	0.268436
Pd	Pd66	0.000282	0.249620	0.268539
Pd	Pd67	0.997284	0.499372	0.270031
Pd	Pd68	0.999472	0.749470	0.268589
Pd	Pd69	0.499413	0.000391	0.268260
Pd	Pd70	0.499331	0.250707	0.269006
Pd	Pd71	0.499518	0.500331	0.268892
Pd	Pd72	0.498677	0.750192	0.269166
Pd	Pd73	0.167115	0.125110	0.307895
Pd	Pd74	0.166993	0.374978	0.307948
Pd	Pd75	0.166719	0.625368	0.307790
Pd	Pd76	0.166841	0.875273	0.307783
Pd	Pd77	0.666742	0.123810	0.308046
Pd	Pd78	0.666980	0.372165	0.304755
Pd	Pd79	0.665346	0.626943	0.305288
Pd	Pd80	0.666098	0.876999	0.307648
Pd	Pd81	0.830821	0.750437	0.339927
Pd	Pd82	0.331689	0.000531	0.338748
Pd	Pd83	0.333906	0.252125	0.338544
Pd	Pd84	0.333037	0.500631	0.338678
Pd	Pd85	0.333626	0.749059	0.338585
Pd	Pd86	0.832211	0.999270	0.338407
Pd	Pd87	0.832395	0.247526	0.338429
Pd	Pd88	0.828928	0.495623	0.343207
Pd	Pd89	0.999726	0.123651	0.368443
Pd	Pd90	0.000565	0.372862	0.368918
Pd	Pd91	0.999537	0.624060	0.368468
Pd	Pd92	0.999564	0.874116	0.368376
Pd	Pd93	0.499496	0.123671	0.368759
Pd	Pd94	0.504601	0.369731	0.369669
Pd	Pd95	0.503345	0.632320	0.370778
Pd	Pd96	0.499249	0.877855	0.368835
C	C97	0.693570	0.369486	0.464451
C	C98	0.667409	0.499103	0.446826
O	O99	0.569476	0.500176	0.422123

O	O100	0.744209	0.552614	0.415796
H	H101	0.701922	0.313132	0.425832
H	H102	0.634932	0.330485	0.491289
H	H103	0.764264	0.369600	0.487707
H	H104	0.658648	0.557926	0.484966
H	H105	0.730296	0.655053	0.369471

Transition state of R99 CCOOH* + H* = CCOHOH* + * on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894

Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165859	0.999545	0.202764
Pd	Pd50	0.165858	0.249833	0.202751
Pd	Pd51	0.166107	0.499889	0.202610
Pd	Pd52	0.165894	0.749983	0.202800
Pd	Pd53	0.666164	0.000372	0.202903
Pd	Pd54	0.665864	0.250653	0.203572
Pd	Pd55	0.666178	0.499587	0.203524
Pd	Pd56	0.666160	0.750233	0.202841
Pd	Pd57	0.330648	0.124542	0.236004
Pd	Pd58	0.331240	0.374877	0.236024
Pd	Pd59	0.330906	0.625013	0.235961
Pd	Pd60	0.330870	0.874583	0.236183
Pd	Pd61	0.830715	0.125859	0.237232
Pd	Pd62	0.831390	0.375091	0.236674
Pd	Pd63	0.831250	0.625243	0.236877
Pd	Pd64	0.831118	0.875537	0.236548
Pd	Pd65	0.999559	0.000049	0.268475
Pd	Pd66	0.998901	0.250262	0.269318
Pd	Pd67	0.999926	0.500429	0.269202
Pd	Pd68	0.000020	0.750389	0.268511
Pd	Pd69	0.499147	0.999514	0.268360
Pd	Pd70	0.499123	0.249579	0.268700
Pd	Pd71	0.499430	0.500459	0.268730
Pd	Pd72	0.499557	0.749466	0.268682
Pd	Pd73	0.165103	0.123460	0.307210
Pd	Pd74	0.166786	0.374771	0.306890
Pd	Pd75	0.166599	0.625632	0.307475
Pd	Pd76	0.166549	0.874533	0.307984
Pd	Pd77	0.665140	0.122536	0.307767
Pd	Pd78	0.662996	0.375276	0.310631
Pd	Pd79	0.666127	0.628551	0.307336
Pd	Pd80	0.666505	0.875645	0.308334
Pd	Pd81	0.832402	0.751591	0.338707
Pd	Pd82	0.331047	0.999266	0.338379
Pd	Pd83	0.329355	0.248533	0.337996
Pd	Pd84	0.330330	0.500444	0.338182
Pd	Pd85	0.332058	0.748973	0.338494
Pd	Pd86	0.831865	0.000758	0.338933
Pd	Pd87	0.832835	0.248154	0.343416
Pd	Pd88	0.834842	0.504984	0.341358
Pd	Pd89	0.000395	0.123917	0.369333
Pd	Pd90	0.003812	0.375763	0.369398
Pd	Pd91	0.001895	0.627965	0.369303
Pd	Pd92	0.999524	0.875942	0.368487
Pd	Pd93	0.497041	0.124358	0.368563
Pd	Pd94	0.493955	0.376213	0.369249
Pd	Pd95	0.500095	0.623350	0.369824
Pd	Pd96	0.498361	0.874117	0.368406
C	C97	0.752472	0.378315	0.376458

C	C98	0.727149	0.399895	0.435992
O	O99	0.646541	0.444591	0.454094
O	O100	0.797751	0.369476	0.473764
H	H101	0.772755	0.389708	0.511801
H	H102	0.576810	0.454059	0.411314

Transition state of R100 CHCOOH* + H* = CHCOHOH* + * on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894

Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166471	0.000531	0.202976
Pd	Pd50	0.166113	0.250000	0.202900
Pd	Pd51	0.166044	0.500047	0.202843
Pd	Pd52	0.166201	0.750524	0.202890
Pd	Pd53	0.665829	0.999855	0.203068
Pd	Pd54	0.665545	0.249846	0.203048
Pd	Pd55	0.665967	0.500121	0.202884
Pd	Pd56	0.665204	0.749997	0.203405
Pd	Pd57	0.331610	0.125963	0.236965
Pd	Pd58	0.331152	0.374331	0.236532
Pd	Pd59	0.331286	0.625127	0.235797
Pd	Pd60	0.331691	0.875337	0.236269
Pd	Pd61	0.830853	0.124893	0.236281
Pd	Pd62	0.831247	0.374816	0.235896
Pd	Pd63	0.830661	0.625264	0.236058
Pd	Pd64	0.830519	0.875128	0.236318
Pd	Pd65	0.999440	0.000181	0.268381
Pd	Pd66	0.999228	0.249978	0.268404
Pd	Pd67	0.999092	0.500251	0.268459
Pd	Pd68	0.998996	0.750402	0.268380
Pd	Pd69	0.499987	0.999432	0.268839
Pd	Pd70	0.499139	0.250656	0.269954
Pd	Pd71	0.500346	0.500184	0.268988
Pd	Pd72	0.499262	0.748219	0.270557
Pd	Pd73	0.165987	0.125881	0.307953
Pd	Pd74	0.164204	0.375029	0.307362
Pd	Pd75	0.164695	0.626012	0.307324
Pd	Pd76	0.165517	0.876443	0.307602
Pd	Pd77	0.666254	0.124424	0.308102
Pd	Pd78	0.667647	0.374817	0.307425
Pd	Pd79	0.665946	0.625276	0.308542
Pd	Pd80	0.665974	0.875134	0.308631
Pd	Pd81	0.830765	0.750171	0.338525
Pd	Pd82	0.331187	0.001406	0.338560
Pd	Pd83	0.329457	0.252493	0.341770
Pd	Pd84	0.328654	0.500043	0.336884
Pd	Pd85	0.329301	0.750641	0.338107
Pd	Pd86	0.831166	0.999978	0.338709
Pd	Pd87	0.831107	0.249760	0.338472
Pd	Pd88	0.830748	0.500181	0.338213
Pd	Pd89	0.998081	0.125089	0.368332
Pd	Pd90	0.997471	0.375055	0.368555
Pd	Pd91	0.997520	0.625259	0.368451
Pd	Pd92	0.997932	0.875021	0.368392
Pd	Pd93	0.498278	0.124849	0.368846
Pd	Pd94	0.501939	0.372444	0.369631
Pd	Pd95	0.494802	0.624433	0.371705
Pd	Pd96	0.497270	0.874073	0.369047
C	C97	0.496133	0.494206	0.433353
C	C98	0.407759	0.480806	0.468472

O	O99	0.416323	0.523652	0.521987
O	O100	0.326001	0.431851	0.454504
H	H101	0.564589	0.507738	0.458153
H	H102	0.352695	0.509259	0.541187
H	H103	0.333359	0.391767	0.396135

Transition state of R101 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COHOH}^* + *$ on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894

Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166187	0.000238	0.202938
Pd	Pd50	0.166211	0.250264	0.202951
Pd	Pd51	0.165999	0.500436	0.202924
Pd	Pd52	0.166137	0.750571	0.202882
Pd	Pd53	0.665572	0.999714	0.203284
Pd	Pd54	0.665739	0.249291	0.202750
Pd	Pd55	0.666038	0.500062	0.202550
Pd	Pd56	0.665219	0.750398	0.203270
Pd	Pd57	0.331625	0.125110	0.236309
Pd	Pd58	0.331131	0.375535	0.236281
Pd	Pd59	0.331206	0.625768	0.236233
Pd	Pd60	0.331997	0.875190	0.236477
Pd	Pd61	0.830413	0.124793	0.236371
Pd	Pd62	0.831713	0.374898	0.235673
Pd	Pd63	0.830757	0.625263	0.236139
Pd	Pd64	0.830629	0.875043	0.236389
Pd	Pd65	0.999118	0.000269	0.268427
Pd	Pd66	0.999639	0.250182	0.268471
Pd	Pd67	0.999499	0.500299	0.268554
Pd	Pd68	0.999315	0.750220	0.268438
Pd	Pd69	0.500202	0.000100	0.269260
Pd	Pd70	0.499650	0.249492	0.269073
Pd	Pd71	0.499731	0.500810	0.268619
Pd	Pd72	0.499811	0.748497	0.270704
Pd	Pd73	0.165564	0.124956	0.307648
Pd	Pd74	0.165423	0.375878	0.307717
Pd	Pd75	0.165458	0.626669	0.307708
Pd	Pd76	0.165689	0.875912	0.307593
Pd	Pd77	0.665557	0.124855	0.309287
Pd	Pd78	0.667829	0.374497	0.305843
Pd	Pd79	0.666246	0.625168	0.307936
Pd	Pd80	0.666271	0.875242	0.308728
Pd	Pd81	0.831078	0.750152	0.338568
Pd	Pd82	0.331659	0.001570	0.338703
Pd	Pd83	0.329537	0.250810	0.338079
Pd	Pd84	0.329030	0.502161	0.338328
Pd	Pd85	0.331555	0.751148	0.338656
Pd	Pd86	0.831069	0.000229	0.338802
Pd	Pd87	0.831318	0.249774	0.338274
Pd	Pd88	0.830919	0.500027	0.338262
Pd	Pd89	0.997978	0.125187	0.368495
Pd	Pd90	0.997771	0.375131	0.368458
Pd	Pd91	0.997790	0.625271	0.368512
Pd	Pd92	0.998105	0.875223	0.368393
Pd	Pd93	0.499052	0.129392	0.371993
Pd	Pd94	0.498137	0.378449	0.366602
Pd	Pd95	0.500297	0.624500	0.372277
Pd	Pd96	0.498075	0.877707	0.369212
C	C97	0.532531	0.542492	0.452018
C	C98	0.569462	0.417511	0.451678

O	O99	0.516022	0.323669	0.467883
O	O100	0.669495	0.405061	0.446492
H	H101	0.462271	0.551213	0.475085
H	H102	0.590258	0.608165	0.464264
H	H103	0.685849	0.318367	0.442699
H	H104	0.512959	0.239044	0.426449

Transition state of R102 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COHOH}^* + *$ on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894

Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165790	0.999937	0.203034
Pd	Pd50	0.165814	0.249946	0.203028
Pd	Pd51	0.166042	0.499922	0.202920
Pd	Pd52	0.165788	0.749932	0.203043
Pd	Pd53	0.665872	0.000116	0.203058
Pd	Pd54	0.665983	0.250146	0.202911
Pd	Pd55	0.665838	0.500204	0.202883
Pd	Pd56	0.665983	0.750045	0.203038
Pd	Pd57	0.330548	0.124814	0.236182
Pd	Pd58	0.330615	0.374896	0.236227
Pd	Pd59	0.330656	0.625071	0.236171
Pd	Pd60	0.330641	0.874984	0.236189
Pd	Pd61	0.830707	0.125219	0.236080
Pd	Pd62	0.830468	0.375590	0.236648
Pd	Pd63	0.830566	0.624815	0.236742
Pd	Pd64	0.830784	0.874913	0.236256
Pd	Pd65	0.999254	0.000151	0.268472
Pd	Pd66	0.999158	0.250188	0.268519
Pd	Pd67	0.998632	0.500094	0.268707
Pd	Pd68	0.999111	0.750128	0.268535
Pd	Pd69	0.499163	0.000002	0.268532
Pd	Pd70	0.498939	0.249626	0.268261
Pd	Pd71	0.498974	0.500325	0.268400
Pd	Pd72	0.499096	0.750182	0.268521
Pd	Pd73	0.165121	0.124726	0.308170
Pd	Pd74	0.164823	0.374911	0.308050
Pd	Pd75	0.164925	0.624948	0.308011
Pd	Pd76	0.165298	0.874867	0.308176
Pd	Pd77	0.665294	0.125566	0.308196
Pd	Pd78	0.664468	0.374790	0.307543
Pd	Pd79	0.664595	0.625795	0.307783
Pd	Pd80	0.665276	0.875605	0.308112
Pd	Pd81	0.830065	0.750837	0.338692
Pd	Pd82	0.330333	0.999819	0.338366
Pd	Pd83	0.329574	0.249544	0.338402
Pd	Pd84	0.329677	0.500037	0.338338
Pd	Pd85	0.330276	0.749809	0.338322
Pd	Pd86	0.830316	0.000634	0.338139
Pd	Pd87	0.830384	0.250540	0.338275
Pd	Pd88	0.827903	0.500921	0.341494
Pd	Pd89	0.996838	0.125540	0.368474
Pd	Pd90	0.996378	0.375582	0.368597
Pd	Pd91	0.996515	0.625165	0.368443
Pd	Pd92	0.996971	0.875412	0.368397
Pd	Pd93	0.497009	0.125258	0.368527
Pd	Pd94	0.495500	0.374462	0.367745
Pd	Pd95	0.496551	0.624698	0.368707
Pd	Pd96	0.497066	0.875023	0.368479
C	C97	0.596433	0.440009	0.509270

C	C98	0.677042	0.455413	0.466192
O	O99	0.726300	0.354999	0.454123
O	O100	0.692195	0.556399	0.442669
H	H101	0.529476	0.410713	0.485620
H	H102	0.615052	0.368683	0.540015
H	H103	0.580054	0.526677	0.530147
H	H104	0.769824	0.366596	0.419257
H	H105	0.748055	0.547873	0.392533

Transition state of R103 CO₂* + * = CO* + O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894

Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165749	0.999891	0.202664
Pd	Pd50	0.165953	0.249815	0.202756
Pd	Pd51	0.165927	0.500028	0.202703
Pd	Pd52	0.166119	0.750125	0.202734
Pd	Pd53	0.665771	0.000179	0.202770
Pd	Pd54	0.665325	0.251059	0.203837
Pd	Pd55	0.665361	0.499704	0.203852
Pd	Pd56	0.665696	0.748362	0.204617
Pd	Pd57	0.330766	0.125092	0.236067
Pd	Pd58	0.331346	0.375521	0.235973
Pd	Pd59	0.331495	0.625042	0.236056
Pd	Pd60	0.330841	0.874851	0.236239
Pd	Pd61	0.830610	0.125298	0.236191
Pd	Pd62	0.830503	0.374894	0.236246
Pd	Pd63	0.831759	0.625237	0.236092
Pd	Pd64	0.830663	0.875468	0.236255
Pd	Pd65	0.998650	0.000271	0.268260
Pd	Pd66	0.999526	0.250117	0.268425
Pd	Pd67	0.000094	0.499989	0.268343
Pd	Pd68	0.999838	0.750449	0.268341
Pd	Pd69	0.499170	0.000682	0.268296
Pd	Pd70	0.499835	0.250164	0.269028
Pd	Pd71	0.499675	0.500729	0.269654
Pd	Pd72	0.499666	0.751041	0.269093
Pd	Pd73	0.164554	0.123696	0.307235
Pd	Pd74	0.165503	0.374412	0.306993
Pd	Pd75	0.165671	0.626008	0.307069
Pd	Pd76	0.165464	0.875567	0.307486
Pd	Pd77	0.666580	0.124560	0.308246
Pd	Pd78	0.667662	0.374316	0.311796
Pd	Pd79	0.669590	0.627367	0.309958
Pd	Pd80	0.665967	0.877737	0.308234
Pd	Pd81	0.833972	0.752255	0.338541
Pd	Pd82	0.330211	0.000766	0.338107
Pd	Pd83	0.330277	0.250679	0.337535
Pd	Pd84	0.327991	0.499904	0.338156
Pd	Pd85	0.331698	0.748743	0.338110
Pd	Pd86	0.831780	0.000757	0.338631
Pd	Pd87	0.834003	0.249327	0.338547
Pd	Pd88	0.836704	0.500813	0.337775
Pd	Pd89	0.999637	0.124729	0.368868
Pd	Pd90	0.000460	0.375029	0.368793
Pd	Pd91	0.001025	0.626615	0.368789
Pd	Pd92	0.999642	0.876407	0.368684
Pd	Pd93	0.497147	0.124156	0.368629
Pd	Pd94	0.494055	0.373735	0.371189
Pd	Pd95	0.490540	0.628861	0.371601

Pd	Pd96	0.496693	0.877856	0.368577
C	C97	0.635169	0.411802	0.395778
O	O98	0.676217	0.386034	0.438951
O	O99	0.629673	0.586773	0.389763

Transition state of R104 CO* + * = C* + O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894

Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165939	0.999999	0.202492
Pd	Pd50	0.165738	0.249777	0.202484
Pd	Pd51	0.165547	0.500002	0.202652
Pd	Pd52	0.165740	0.750233	0.202485
Pd	Pd53	0.665905	0.000003	0.202829
Pd	Pd54	0.665508	0.250762	0.204083
Pd	Pd55	0.665836	0.500002	0.202837
Pd	Pd56	0.665503	0.749264	0.204070
Pd	Pd57	0.330796	0.125136	0.235897
Pd	Pd58	0.330754	0.375286	0.236031
Pd	Pd59	0.330749	0.624726	0.236031
Pd	Pd60	0.330797	0.874869	0.235899
Pd	Pd61	0.831018	0.125028	0.236188
Pd	Pd62	0.831105	0.375571	0.236637
Pd	Pd63	0.831083	0.624435	0.236639
Pd	Pd64	0.831018	0.874975	0.236188
Pd	Pd65	0.999525	0.000002	0.268271
Pd	Pd66	0.999923	0.249838	0.268429
Pd	Pd67	0.998025	0.499994	0.269744
Pd	Pd68	0.999923	0.750160	0.268425
Pd	Pd69	0.499204	0.999999	0.268251
Pd	Pd70	0.498017	0.248216	0.269270
Pd	Pd71	0.498170	0.499992	0.270425
Pd	Pd72	0.498028	0.751787	0.269272
Pd	Pd73	0.165713	0.123966	0.307123
Pd	Pd74	0.165958	0.374162	0.306526
Pd	Pd75	0.165953	0.625856	0.306523
Pd	Pd76	0.165718	0.876038	0.307120
Pd	Pd77	0.666696	0.121829	0.308224
Pd	Pd78	0.666922	0.367491	0.309733
Pd	Pd79	0.666909	0.632488	0.309719
Pd	Pd80	0.666700	0.878113	0.308222
Pd	Pd81	0.835398	0.752494	0.338384
Pd	Pd82	0.330896	0.000006	0.338065
Pd	Pd83	0.329608	0.250068	0.337908
Pd	Pd84	0.327310	0.500009	0.339212
Pd	Pd85	0.329627	0.749932	0.337909
Pd	Pd86	0.833336	0.999985	0.338361
Pd	Pd87	0.835405	0.247490	0.338384
Pd	Pd88	0.840296	0.500017	0.342845
Pd	Pd89	0.001509	0.123900	0.368949
Pd	Pd90	0.004870	0.373290	0.369424
Pd	Pd91	0.004855	0.626678	0.369425
Pd	Pd92	0.001512	0.876082	0.368946
Pd	Pd93	0.497919	0.122993	0.368875
Pd	Pd94	0.492875	0.370208	0.375517
Pd	Pd95	0.492878	0.629843	0.375537
Pd	Pd96	0.497917	0.877030	0.368875
C	C97	0.576484	0.500033	0.344029
O	O98	0.705019	0.499599	0.379444

Transition state of R105 $\text{H}_2\text{COO}^* + ^* = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{O}^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617

Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166107	0.999653	0.203018
Pd	Pd50	0.165987	0.249925	0.202934
Pd	Pd51	0.165835	0.500026	0.202764
Pd	Pd52	0.165583	0.750218	0.202791
Pd	Pd53	0.665780	0.000441	0.202995
Pd	Pd54	0.664859	0.250262	0.203437
Pd	Pd55	0.665839	0.499907	0.202817
Pd	Pd56	0.665922	0.750255	0.202593
Pd	Pd57	0.330911	0.124776	0.236041
Pd	Pd58	0.330271	0.376491	0.237323
Pd	Pd59	0.331092	0.626166	0.235656
Pd	Pd60	0.330370	0.873090	0.238102
Pd	Pd61	0.830119	0.125118	0.236239
Pd	Pd62	0.830086	0.374985	0.236038
Pd	Pd63	0.830973	0.625067	0.235983
Pd	Pd64	0.830422	0.875141	0.236162
Pd	Pd65	0.998450	0.000109	0.268232
Pd	Pd66	0.998113	0.249707	0.268192
Pd	Pd67	0.998182	0.499742	0.268258
Pd	Pd68	0.998258	0.750233	0.268308
Pd	Pd69	0.499213	0.001135	0.268385
Pd	Pd70	0.498666	0.251828	0.270623
Pd	Pd71	0.500539	0.499600	0.268535
Pd	Pd72	0.499226	0.750880	0.268357
Pd	Pd73	0.164187	0.124340	0.307816
Pd	Pd74	0.162764	0.373202	0.307596
Pd	Pd75	0.163200	0.624818	0.306613
Pd	Pd76	0.163469	0.875659	0.307945
Pd	Pd77	0.665479	0.125347	0.308343
Pd	Pd78	0.664569	0.375348	0.308536
Pd	Pd79	0.665734	0.626212	0.306939
Pd	Pd80	0.665436	0.875797	0.307619
Pd	Pd81	0.829314	0.750241	0.338438
Pd	Pd82	0.329845	0.000153	0.338346
Pd	Pd83	0.328307	0.247269	0.338293
Pd	Pd84	0.328778	0.496407	0.335555
Pd	Pd85	0.327151	0.752690	0.341096
Pd	Pd86	0.829987	0.000097	0.338484
Pd	Pd87	0.829617	0.250553	0.338400
Pd	Pd88	0.829001	0.500391	0.338283
Pd	Pd89	0.996326	0.125185	0.368318
Pd	Pd90	0.995870	0.375124	0.368364
Pd	Pd91	0.996030	0.624962	0.368153
Pd	Pd92	0.996274	0.874966	0.368363
Pd	Pd93	0.497272	0.123105	0.368816
Pd	Pd94	0.495300	0.370895	0.371288
Pd	Pd95	0.506807	0.627285	0.367943
Pd	Pd96	0.498329	0.877228	0.368191
C	C97	0.379092	0.501267	0.461881
O	O98	0.460465	0.443903	0.452514
O	O99	0.364599	0.611760	0.401387
H	H100	0.306775	0.457649	0.453384
H	H101	0.380333	0.569743	0.496165

Transition state of R106 COH* + * = C* + OH* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha    90.000000
_cell_angle_beta     90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.166667      -0.000000      0.000000
Pd Pd2      0.166667      0.250000      0.000000
Pd Pd3      0.166667      0.500000      0.000000
Pd Pd4      0.166667      0.750000      0.000000
Pd Pd5      0.666667      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.666667      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.666667      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.666667      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.333333      0.125000      0.033723
Pd Pd10     0.333333      0.375000      0.033723
Pd Pd11     0.333333      0.625000      0.033723
Pd Pd12     0.333333      0.875000      0.033723
Pd Pd13     0.833333      0.125000      0.033723
Pd Pd14     0.833333      0.375000      0.033723
Pd Pd15     0.833333      0.625000      0.033723
Pd Pd16     0.833333      0.875000      0.033723
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.067447
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.067447
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.067447
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.067447
Pd Pd21     0.500000      -0.000000      0.067447
Pd Pd22     0.500000      0.250000      0.067447
Pd Pd23     0.500000      0.500000      0.067447
Pd Pd24     0.500000      0.750000      0.067447
Pd Pd25     0.166667      0.125000      0.101170
Pd Pd26     0.166667      0.375000      0.101170
Pd Pd27     0.166667      0.625000      0.101170
Pd Pd28     0.166667      0.875000      0.101170
Pd Pd29     0.666667      0.125000      0.101170
Pd Pd30     0.666667      0.375000      0.101170
Pd Pd31     0.666667      0.625000      0.101170
Pd Pd32     0.666667      0.875000      0.101170
Pd Pd33     0.333333      -0.000000      0.134894
Pd Pd34     0.333333      0.250000      0.134894
Pd Pd35     0.333333      0.500000      0.134894
Pd Pd36     0.333333      0.750000      0.134894
Pd Pd37     0.833333      -0.000000      0.134894
Pd Pd38     0.833333      0.250000      0.134894
Pd Pd39     0.833333      0.500000      0.134894
Pd Pd40     0.833333      0.750000      0.134894
Pd Pd41     0.000000      0.125000      0.168617
Pd Pd42     0.000000      0.375000      0.168617
Pd Pd43     0.000000      0.625000      0.168617
Pd Pd44     0.000000      0.875000      0.168617
Pd Pd45     0.500000      0.125000      0.168617
Pd Pd46     0.500000      0.375000      0.168617

```

Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165718	0.000005	0.202743
Pd	Pd50	0.165906	0.249624	0.202621
Pd	Pd51	0.165416	0.500007	0.202564
Pd	Pd52	0.165913	0.750383	0.202620
Pd	Pd53	0.666227	0.000000	0.202804
Pd	Pd54	0.665937	0.250691	0.203470
Pd	Pd55	0.665277	0.500007	0.203544
Pd	Pd56	0.665945	0.749324	0.203470
Pd	Pd57	0.330767	0.124795	0.236032
Pd	Pd58	0.330702	0.375058	0.235790
Pd	Pd59	0.330709	0.624983	0.235792
Pd	Pd60	0.330771	0.875233	0.236033
Pd	Pd61	0.831372	0.125402	0.236161
Pd	Pd62	0.831143	0.375672	0.237258
Pd	Pd63	0.831161	0.624307	0.237257
Pd	Pd64	0.831382	0.874600	0.236158
Pd	Pd65	0.000208	0.000005	0.268394
Pd	Pd66	0.000262	0.249832	0.268666
Pd	Pd67	0.998053	0.499996	0.270046
Pd	Pd68	0.000257	0.750172	0.268668
Pd	Pd69	0.499314	0.000001	0.268146
Pd	Pd70	0.498350	0.249502	0.268792
Pd	Pd71	0.497098	0.500009	0.270001
Pd	Pd72	0.498363	0.750496	0.268795
Pd	Pd73	0.167114	0.124615	0.307675
Pd	Pd74	0.166614	0.374613	0.306710
Pd	Pd75	0.166611	0.625389	0.306701
Pd	Pd76	0.167107	0.875401	0.307667
Pd	Pd77	0.666990	0.122969	0.307972
Pd	Pd78	0.662879	0.367791	0.309399
Pd	Pd79	0.662875	0.632230	0.309390
Pd	Pd80	0.666995	0.877023	0.307972
Pd	Pd81	0.835093	0.752767	0.338902
Pd	Pd82	0.331263	0.000018	0.338604
Pd	Pd83	0.332156	0.250634	0.337789
Pd	Pd84	0.329060	0.500017	0.338489
Pd	Pd85	0.332158	0.749393	0.337783
Pd	Pd86	0.833416	0.999999	0.337823
Pd	Pd87	0.835090	0.247234	0.338905
Pd	Pd88	0.839027	0.499991	0.347328
Pd	Pd89	0.001976	0.123558	0.368985
Pd	Pd90	0.004980	0.372027	0.369804
Pd	Pd91	0.004980	0.627975	0.369807
Pd	Pd92	0.001973	0.876451	0.368991
Pd	Pd93	0.498722	0.123056	0.368437
Pd	Pd94	0.491892	0.368361	0.373433
Pd	Pd95	0.491883	0.631665	0.373430
Pd	Pd96	0.498730	0.876983	0.368439
C	C97	0.700723	0.499986	0.356190
O	O98	0.587529	0.500017	0.414618
H	H99	0.603308	0.500012	0.455284

Transition state of R107 HCOH* + * = CH* + OH* on Pd(211)

data	
_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980

_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd Pd49	0.165325	0.999999	0.202637
Pd Pd50	0.165847	0.249821	0.202587

Pd	Pd51	0.166103	0.499996	0.202438
Pd	Pd52	0.165846	0.750175	0.202587
Pd	Pd53	0.665845	0.000004	0.202965
Pd	Pd54	0.665523	0.251725	0.204422
Pd	Pd55	0.664635	0.500000	0.204909
Pd	Pd56	0.665523	0.748279	0.204422
Pd	Pd57	0.330589	0.124708	0.235714
Pd	Pd58	0.331016	0.374957	0.235743
Pd	Pd59	0.331014	0.625037	0.235740
Pd	Pd60	0.330590	0.875291	0.235712
Pd	Pd61	0.830420	0.125029	0.236114
Pd	Pd62	0.830162	0.374882	0.236455
Pd	Pd63	0.830161	0.625119	0.236454
Pd	Pd64	0.830424	0.874972	0.236114
Pd	Pd65	0.998754	0.000000	0.268283
Pd	Pd66	0.999284	0.249722	0.268330
Pd	Pd67	0.999416	0.500001	0.268201
Pd	Pd68	0.999280	0.750274	0.268330
Pd	Pd69	0.499093	0.000003	0.268077
Pd	Pd70	0.499133	0.250193	0.269027
Pd	Pd71	0.497913	0.500000	0.270341
Pd	Pd72	0.499127	0.749803	0.269025
Pd	Pd73	0.165134	0.124404	0.307276
Pd	Pd74	0.165075	0.374552	0.306693
Pd	Pd75	0.165077	0.625449	0.306689
Pd	Pd76	0.165131	0.875591	0.307276
Pd	Pd77	0.665768	0.124721	0.308234
Pd	Pd78	0.663693	0.372509	0.315368
Pd	Pd79	0.663690	0.627491	0.315367
Pd	Pd80	0.665767	0.875283	0.308229
Pd	Pd81	0.833710	0.753451	0.338540
Pd	Pd82	0.329220	0.000000	0.338131
Pd	Pd83	0.329316	0.248951	0.337026
Pd	Pd84	0.327620	0.499998	0.337981
Pd	Pd85	0.329312	0.751049	0.337025
Pd	Pd86	0.831514	0.000003	0.338140
Pd	Pd87	0.833705	0.246551	0.338543
Pd	Pd88	0.836258	0.499998	0.339069
Pd	Pd89	0.000065	0.123899	0.368818
Pd	Pd90	0.000609	0.373517	0.368583
Pd	Pd91	0.000611	0.626484	0.368584
Pd	Pd92	0.000065	0.876105	0.368816
Pd	Pd93	0.496646	0.121816	0.368412
Pd	Pd94	0.487618	0.365146	0.372194
Pd	Pd95	0.487613	0.634850	0.372190
Pd	Pd96	0.496646	0.878175	0.368410
C	C97	0.691619	0.500005	0.372505
O	O98	0.578960	0.500004	0.415732
H	H99	0.737366	0.500004	0.412070
H	H100	0.594925	0.500010	0.456408

Transition state of R108 $\text{CH}_2\text{OH}^* + ^* = \text{CH}_2^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

```

data
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.166667 -0.000000 0.000000
Pd Pd2 0.166667 0.250000 0.000000
Pd Pd3 0.166667 0.500000 0.000000
Pd Pd4 0.166667 0.750000 0.000000
Pd Pd5 0.666667 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.666667 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.666667 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.666667 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.333333 0.125000 0.033723
Pd Pd10 0.333333 0.375000 0.033723
Pd Pd11 0.333333 0.625000 0.033723
Pd Pd12 0.333333 0.875000 0.033723
Pd Pd13 0.833333 0.125000 0.033723
Pd Pd14 0.833333 0.375000 0.033723
Pd Pd15 0.833333 0.625000 0.033723
Pd Pd16 0.833333 0.875000 0.033723
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.067447
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.067447
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.067447
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.067447
Pd Pd21 0.500000 -0.000000 0.067447
Pd Pd22 0.500000 0.250000 0.067447
Pd Pd23 0.500000 0.500000 0.067447
Pd Pd24 0.500000 0.750000 0.067447
Pd Pd25 0.166667 0.125000 0.101170
Pd Pd26 0.166667 0.375000 0.101170
Pd Pd27 0.166667 0.625000 0.101170
Pd Pd28 0.166667 0.875000 0.101170
Pd Pd29 0.666667 0.125000 0.101170
Pd Pd30 0.666667 0.375000 0.101170
Pd Pd31 0.666667 0.625000 0.101170
Pd Pd32 0.666667 0.875000 0.101170
Pd Pd33 0.333333 -0.000000 0.134894
Pd Pd34 0.333333 0.250000 0.134894
Pd Pd35 0.333333 0.500000 0.134894
Pd Pd36 0.333333 0.750000 0.134894
Pd Pd37 0.833333 -0.000000 0.134894
Pd Pd38 0.833333 0.250000 0.134894
Pd Pd39 0.833333 0.500000 0.134894
Pd Pd40 0.833333 0.750000 0.134894
Pd Pd41 0.000000 0.125000 0.168617
Pd Pd42 0.000000 0.375000 0.168617
Pd Pd43 0.000000 0.625000 0.168617
Pd Pd44 0.000000 0.875000 0.168617
Pd Pd45 0.500000 0.125000 0.168617
Pd Pd46 0.500000 0.375000 0.168617
Pd Pd47 0.500000 0.625000 0.168617
Pd Pd48 0.500000 0.875000 0.168617
Pd Pd49 0.166161 0.000119 0.202814
Pd Pd50 0.165959 0.249937 0.202822
Pd Pd51 0.166006 0.499944 0.202791
Pd Pd52 0.166070 0.750176 0.202823
Pd Pd53 0.665897 0.000162 0.202882

```

Pd	Pd54	0.665664	0.249961	0.203088
Pd	Pd55	0.665323	0.499850	0.203140
Pd	Pd56	0.665689	0.750061	0.202933
Pd	Pd57	0.331545	0.125429	0.236222
Pd	Pd58	0.331444	0.375209	0.236130
Pd	Pd59	0.331052	0.624994	0.235991
Pd	Pd60	0.331403	0.875132	0.236110
Pd	Pd61	0.830685	0.124889	0.236337
Pd	Pd62	0.830463	0.374894	0.236177
Pd	Pd63	0.831410	0.624993	0.235620
Pd	Pd64	0.830869	0.875073	0.236189
Pd	Pd65	0.999259	0.999978	0.268372
Pd	Pd66	0.998997	0.249976	0.268358
Pd	Pd67	0.999406	0.499956	0.268460
Pd	Pd68	0.999394	0.750091	0.268398
Pd	Pd69	0.499871	0.999935	0.268627
Pd	Pd70	0.499850	0.251670	0.269148
Pd	Pd71	0.499799	0.502059	0.270757
Pd	Pd72	0.499764	0.749174	0.269527
Pd	Pd73	0.165428	0.124685	0.307558
Pd	Pd74	0.165083	0.374315	0.307424
Pd	Pd75	0.165312	0.625416	0.307529
Pd	Pd76	0.165368	0.875566	0.307554
Pd	Pd77	0.665996	0.124866	0.308332
Pd	Pd78	0.665902	0.374616	0.308612
Pd	Pd79	0.667244	0.625378	0.306988
Pd	Pd80	0.666388	0.875587	0.307898
Pd	Pd81	0.831093	0.749912	0.338230
Pd	Pd82	0.330895	0.000215	0.338261
Pd	Pd83	0.330379	0.250074	0.338378
Pd	Pd84	0.328646	0.499231	0.337484
Pd	Pd85	0.330263	0.750137	0.337694
Pd	Pd86	0.831149	0.000003	0.338646
Pd	Pd87	0.831048	0.249869	0.338539
Pd	Pd88	0.830967	0.499859	0.338115
Pd	Pd89	0.998100	0.124951	0.368372
Pd	Pd90	0.997836	0.374879	0.368452
Pd	Pd91	0.997977	0.624969	0.368433
Pd	Pd92	0.997920	0.874910	0.368398
Pd	Pd93	0.497839	0.125898	0.368416
Pd	Pd94	0.498221	0.372731	0.371752
Pd	Pd95	0.499011	0.623148	0.371449
Pd	Pd96	0.498054	0.876801	0.368531
C	C97	0.510826	0.499550	0.435986
O	O98	0.499531	0.670833	0.458229
H	H99	0.448682	0.473231	0.463616
H	H100	0.584747	0.492985	0.455236
H	H101	0.428745	0.679425	0.467126

Transition state of R109 $\text{CH}_3\text{OH}^* + * = \text{CH}_3^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma    90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_

```

_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165875	0.000095	0.202889
Pd	Pd50	0.166039	0.250101	0.202893
Pd	Pd51	0.166300	0.500037	0.202937
Pd	Pd52	0.166024	0.750038	0.202880
Pd	Pd53	0.665964	0.000134	0.202968
Pd	Pd54	0.665791	0.249901	0.202920
Pd	Pd55	0.665839	0.499852	0.202640

Pd	Pd56	0.665570	0.750196	0.202976
Pd	Pd57	0.330971	0.125162	0.236138
Pd	Pd58	0.331673	0.375164	0.236110
Pd	Pd59	0.331564	0.625377	0.236071
Pd	Pd60	0.331134	0.874867	0.236158
Pd	Pd61	0.830752	0.125068	0.236282
Pd	Pd62	0.831326	0.374980	0.236001
Pd	Pd63	0.831447	0.625038	0.235777
Pd	Pd64	0.830780	0.874968	0.236243
Pd	Pd65	0.999075	0.000126	0.268434
Pd	Pd66	0.999455	0.250191	0.268475
Pd	Pd67	0.999960	0.500144	0.268516
Pd	Pd68	0.999499	0.749977	0.268473
Pd	Pd69	0.499358	0.999989	0.268208
Pd	Pd70	0.499512	0.250989	0.269304
Pd	Pd71	0.500666	0.501090	0.269724
Pd	Pd72	0.499792	0.748852	0.270221
Pd	Pd73	0.165070	0.125153	0.307720
Pd	Pd74	0.165933	0.375189	0.307823
Pd	Pd75	0.166170	0.625171	0.307838
Pd	Pd76	0.164870	0.875403	0.307634
Pd	Pd77	0.665917	0.124959	0.308141
Pd	Pd78	0.667312	0.374852	0.307296
Pd	Pd79	0.667593	0.625076	0.306687
Pd	Pd80	0.666098	0.875590	0.308115
Pd	Pd81	0.830942	0.750102	0.338479
Pd	Pd82	0.329450	0.000000	0.338315
Pd	Pd83	0.329685	0.249392	0.338139
Pd	Pd84	0.331807	0.500755	0.337444
Pd	Pd85	0.329884	0.750810	0.338115
Pd	Pd86	0.830893	0.000071	0.338592
Pd	Pd87	0.831037	0.249925	0.338587
Pd	Pd88	0.831342	0.500114	0.338301
Pd	Pd89	0.997671	0.125083	0.368456
Pd	Pd90	0.997936	0.375024	0.368403
Pd	Pd91	0.998011	0.625214	0.368385
Pd	Pd92	0.997535	0.875124	0.368470
Pd	Pd93	0.497108	0.123157	0.368307
Pd	Pd94	0.498769	0.367847	0.368240
Pd	Pd95	0.501203	0.630482	0.372195
Pd	Pd96	0.496951	0.878484	0.368217
C	C97	0.586004	0.635782	0.457186
O	O98	0.511046	0.494594	0.441932
H	H99	0.445519	0.508653	0.458995
H	H100	0.656490	0.587570	0.453952
H	H101	0.554896	0.642626	0.499906
H	H102	0.587347	0.726447	0.435716

Transition state of R110 COH* + H* = C* + H₂O* on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol

```

_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd Pd49	0.165902	0.000005	0.202768
Pd Pd50	0.165952	0.249777	0.202814
Pd Pd51	0.166330	0.500029	0.202573
Pd Pd52	0.165968	0.750230	0.202805
Pd Pd53	0.666185	0.000003	0.203138
Pd Pd54	0.665519	0.250897	0.203962
Pd Pd55	0.665947	0.499968	0.203087
Pd Pd56	0.665558	0.749216	0.203814

Pd	Pd57	0.331164	0.124904	0.236193
Pd	Pd58	0.330917	0.374808	0.236055
Pd	Pd59	0.330953	0.625251	0.236089
Pd	Pd60	0.331118	0.875182	0.236212
Pd	Pd61	0.831007	0.125189	0.236421
Pd	Pd62	0.830848	0.374998	0.236795
Pd	Pd63	0.830863	0.624855	0.236740
Pd	Pd64	0.830945	0.874684	0.236426
Pd	Pd65	0.999308	0.999838	0.268327
Pd	Pd66	0.999684	0.249890	0.268514
Pd	Pd67	0.000918	0.499862	0.268501
Pd	Pd68	0.999652	0.749848	0.268504
Pd	Pd69	0.500204	0.000102	0.268761
Pd	Pd70	0.499886	0.249584	0.269354
Pd	Pd71	0.497190	0.499857	0.268130
Pd	Pd72	0.499791	0.750773	0.269173
Pd	Pd73	0.165611	0.123893	0.307551
Pd	Pd74	0.165992	0.373924	0.307241
Pd	Pd75	0.166043	0.625963	0.307248
Pd	Pd76	0.165568	0.876014	0.307552
Pd	Pd77	0.666981	0.125267	0.308391
Pd	Pd78	0.666377	0.377089	0.310739
Pd	Pd79	0.666205	0.623158	0.310215
Pd	Pd80	0.666957	0.874651	0.308499
Pd	Pd81	0.832865	0.750220	0.339049
Pd	Pd82	0.331893	0.000035	0.338416
Pd	Pd83	0.331854	0.251099	0.338012
Pd	Pd84	0.328530	0.499902	0.338592
Pd	Pd85	0.331812	0.748996	0.338097
Pd	Pd86	0.831704	0.999809	0.338366
Pd	Pd87	0.832906	0.249388	0.339052
Pd	Pd88	0.836951	0.499741	0.340152
Pd	Pd89	0.999546	0.124046	0.368597
Pd	Pd90	0.000449	0.373711	0.368936
Pd	Pd91	0.000456	0.625873	0.368920
Pd	Pd92	0.999490	0.875394	0.368604
Pd	Pd93	0.498598	0.124460	0.369022
Pd	Pd94	0.497637	0.375685	0.371861
Pd	Pd95	0.497395	0.624841	0.371337
Pd	Pd96	0.498630	0.875505	0.369060
C	C97	0.609651	0.500181	0.369761
O	O98	0.676948	0.499683	0.422847
H	H99	0.672202	0.582380	0.439156
H	H100	0.758213	0.494034	0.400140

Transition state of R111 $\text{HCOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

```

data_
_cell_length_a      13.456032
_cell_length_b      10.986804
_cell_length_c      23.511980
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract	_z		
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000	
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000	
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000	
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000	
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723	
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723	
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723	
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723	
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723	
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723	
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723	
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447	
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447	
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447	
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447	
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447	
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170	
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170	
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170	
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170	
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170	
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170	
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170	
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170	
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894	
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894	
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894	
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894	
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894	
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894	
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894	
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894	
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617	
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617	
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617	
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617	
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617	
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617	
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617	
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617	
Pd	Pd49	0.166439	0.999982	0.202892	
Pd	Pd50	0.166187	0.249956	0.202968	
Pd	Pd51	0.166252	0.499985	0.202821	
Pd	Pd52	0.166141	0.750048	0.202959	
Pd	Pd53	0.665988	0.000108	0.203063	
Pd	Pd54	0.665818	0.249557	0.202721	
Pd	Pd55	0.665779	0.500087	0.202660	
Pd	Pd56	0.665685	0.750578	0.202818	
Pd	Pd57	0.331645	0.125231	0.236435	
Pd	Pd58	0.331266	0.375385	0.236382	
Pd	Pd59	0.331261	0.624713	0.236313	

Pd	Pd60	0.331699	0.874700	0.236449
Pd	Pd61	0.830895	0.125276	0.236410
Pd	Pd62	0.830948	0.375480	0.236527
Pd	Pd63	0.830862	0.624870	0.236544
Pd	Pd64	0.830957	0.875095	0.236345
Pd	Pd65	0.999290	0.000201	0.268354
Pd	Pd66	0.999300	0.250247	0.268490
Pd	Pd67	0.999024	0.500181	0.268608
Pd	Pd68	0.999376	0.750155	0.268494
Pd	Pd69	0.500035	0.999973	0.268783
Pd	Pd70	0.499563	0.250602	0.269405
Pd	Pd71	0.499759	0.500291	0.269315
Pd	Pd72	0.499585	0.749205	0.269761
Pd	Pd73	0.165464	0.124520	0.307504
Pd	Pd74	0.165408	0.374838	0.307742
Pd	Pd75	0.165506	0.625512	0.307716
Pd	Pd76	0.165570	0.875552	0.307490
Pd	Pd77	0.666329	0.124370	0.308517
Pd	Pd78	0.666167	0.373110	0.306504
Pd	Pd79	0.666218	0.627004	0.306817
Pd	Pd80	0.666410	0.876125	0.308392
Pd	Pd81	0.830890	0.750684	0.338740
Pd	Pd82	0.331514	0.000002	0.338534
Pd	Pd83	0.331210	0.251144	0.338444
Pd	Pd84	0.330396	0.500237	0.338704
Pd	Pd85	0.331722	0.748821	0.338457
Pd	Pd86	0.831461	0.000377	0.338648
Pd	Pd87	0.830751	0.250140	0.338912
Pd	Pd88	0.827027	0.500482	0.340876
Pd	Pd89	0.997903	0.125597	0.368355
Pd	Pd90	0.996469	0.375865	0.368237
Pd	Pd91	0.996671	0.624812	0.368234
Pd	Pd92	0.998052	0.875213	0.368331
Pd	Pd93	0.498303	0.125929	0.368889
Pd	Pd94	0.501723	0.373982	0.371347
Pd	Pd95	0.502520	0.626373	0.372107
Pd	Pd96	0.498507	0.874703	0.369017
C	C97	0.556172	0.499347	0.423051
O	O98	0.666008	0.500430	0.432039
H	H99	0.524192	0.496200	0.466317
H	H100	0.686816	0.421891	0.448389
H	H101	0.713737	0.508106	0.386818

Transition state of R112 $\text{CH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'
loop_	
_atom_site_type_symbol	
_atom_site_label	
_atom_site_fract_x	
_atom_site_fract_y	
_atom_site_fract_z	
Pd	Pd1

0.166667	-0.000000	0.000000

Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166076	0.999853	0.202903
Pd	Pd50	0.166136	0.249944	0.203002
Pd	Pd51	0.166253	0.499917	0.202955
Pd	Pd52	0.166008	0.749856	0.202959
Pd	Pd53	0.665986	0.000136	0.203061
Pd	Pd54	0.665858	0.249898	0.203000
Pd	Pd55	0.665572	0.499696	0.202936
Pd	Pd56	0.665604	0.750401	0.202761
Pd	Pd57	0.331203	0.124900	0.236318
Pd	Pd58	0.331444	0.375173	0.236591
Pd	Pd59	0.331302	0.624855	0.236361
Pd	Pd60	0.331196	0.874561	0.236386
Pd	Pd61	0.830797	0.125111	0.236401

Pd	Pd62	0.830624	0.375148	0.236432
Pd	Pd63	0.830647	0.624967	0.236369
Pd	Pd64	0.830844	0.874908	0.236349
Pd	Pd65	0.999096	0.999954	0.268401
Pd	Pd66	0.999148	0.250112	0.268438
Pd	Pd67	0.999609	0.500057	0.268490
Pd	Pd68	0.999397	0.749864	0.268542
Pd	Pd69	0.499667	0.999803	0.268560
Pd	Pd70	0.499906	0.249766	0.268613
Pd	Pd71	0.500037	0.500740	0.269555
Pd	Pd72	0.499457	0.749519	0.269374
Pd	Pd73	0.164797	0.124182	0.307564
Pd	Pd74	0.165655	0.374738	0.307817
Pd	Pd75	0.166078	0.625032	0.307932
Pd	Pd76	0.165384	0.874850	0.307694
Pd	Pd77	0.666062	0.124728	0.308473
Pd	Pd78	0.666468	0.374232	0.308160
Pd	Pd79	0.666503	0.626271	0.306970
Pd	Pd80	0.666340	0.875879	0.308242
Pd	Pd81	0.831008	0.750078	0.338850
Pd	Pd82	0.330820	0.999427	0.338354
Pd	Pd83	0.329868	0.249461	0.338444
Pd	Pd84	0.331799	0.500592	0.338752
Pd	Pd85	0.331679	0.748999	0.338737
Pd	Pd86	0.831064	0.000104	0.338661
Pd	Pd87	0.830936	0.250327	0.338817
Pd	Pd88	0.830846	0.500538	0.339100
Pd	Pd89	0.997664	0.125224	0.368460
Pd	Pd90	0.997690	0.375252	0.368454
Pd	Pd91	0.997852	0.625003	0.368524
Pd	Pd92	0.997904	0.875137	0.368465
Pd	Pd93	0.497624	0.124953	0.368668
Pd	Pd94	0.499185	0.374147	0.369009
Pd	Pd95	0.503948	0.626872	0.372070
Pd	Pd96	0.497969	0.875101	0.368647
C	C97	0.592276	0.611353	0.441425
O	O98	0.652716	0.501734	0.439451
H	H99	0.541062	0.600958	0.477436
H	H100	0.641078	0.690856	0.444977
H	H101	0.706614	0.513998	0.410018
H	H102	0.596050	0.423197	0.408179

Transition state of R113 $\text{CH}_3\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000

Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165807	0.999920	0.202881
Pd	Pd50	0.165702	0.249807	0.202910
Pd	Pd51	0.165865	0.499866	0.202870
Pd	Pd52	0.165783	0.749881	0.202865
Pd	Pd53	0.665850	0.000138	0.203031
Pd	Pd54	0.665782	0.250125	0.203086
Pd	Pd55	0.665188	0.499862	0.203104
Pd	Pd56	0.665310	0.750328	0.202934
Pd	Pd57	0.330452	0.124927	0.236162
Pd	Pd58	0.330771	0.375271	0.236213
Pd	Pd59	0.330656	0.624754	0.236040
Pd	Pd60	0.330811	0.874484	0.236114
Pd	Pd61	0.830290	0.125098	0.236405
Pd	Pd62	0.830256	0.375088	0.236232

Pd	Pd63	0.831062	0.625169	0.235717
Pd	Pd64	0.830388	0.874978	0.236298
Pd	Pd65	0.998601	0.999948	0.268285
Pd	Pd66	0.998506	0.249962	0.268324
Pd	Pd67	0.998949	0.500073	0.268404
Pd	Pd68	0.998890	0.749886	0.268416
Pd	Pd69	0.498923	0.999791	0.268094
Pd	Pd70	0.498938	0.250087	0.268032
Pd	Pd71	0.499331	0.501555	0.270130
Pd	Pd72	0.498856	0.748660	0.269569
Pd	Pd73	0.164156	0.124483	0.307661
Pd	Pd74	0.164182	0.374637	0.307580
Pd	Pd75	0.165216	0.624930	0.307743
Pd	Pd76	0.164365	0.874826	0.307578
Pd	Pd77	0.664711	0.125104	0.308429
Pd	Pd78	0.664746	0.374432	0.308498
Pd	Pd79	0.666021	0.626029	0.306540
Pd	Pd80	0.665133	0.875542	0.308179
Pd	Pd81	0.829696	0.749837	0.338738
Pd	Pd82	0.328964	0.999557	0.338080
Pd	Pd83	0.328274	0.249543	0.338224
Pd	Pd84	0.329564	0.499998	0.338230
Pd	Pd85	0.330201	0.749293	0.338027
Pd	Pd86	0.829767	0.000012	0.338502
Pd	Pd87	0.829685	0.250390	0.338639
Pd	Pd88	0.830625	0.500391	0.338313
Pd	Pd89	0.996365	0.124960	0.368134
Pd	Pd90	0.996604	0.374995	0.368283
Pd	Pd91	0.997147	0.625200	0.368267
Pd	Pd92	0.996440	0.874978	0.368202
Pd	Pd93	0.495862	0.125024	0.368117
Pd	Pd94	0.494949	0.371164	0.367841
Pd	Pd95	0.501559	0.625173	0.372760
Pd	Pd96	0.496081	0.878220	0.367790
C	C97	0.562418	0.614732	0.459866
O	O98	0.666702	0.524274	0.435980
H	H99	0.552320	0.556229	0.497057
H	H100	0.479286	0.636918	0.446277
H	H101	0.604334	0.697089	0.469652
H	H102	0.634404	0.454314	0.414762
H	H103	0.698732	0.569192	0.402503

Transition state of R114 COOH* + * = CO* + OH* on Pd(211)

data

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000

Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166003	0.999913	0.202872
Pd	Pd50	0.166071	0.249834	0.202890
Pd	Pd51	0.165989	0.499806	0.202846
Pd	Pd52	0.166038	0.749822	0.202875
Pd	Pd53	0.665803	0.999929	0.202941
Pd	Pd54	0.665211	0.250045	0.203156
Pd	Pd55	0.665572	0.500062	0.203000
Pd	Pd56	0.665234	0.749909	0.203224
Pd	Pd57	0.331448	0.124866	0.236173
Pd	Pd58	0.331135	0.374882	0.236243
Pd	Pd59	0.330942	0.624777	0.236280
Pd	Pd60	0.331286	0.874504	0.236232
Pd	Pd61	0.830462	0.124902	0.236221
Pd	Pd62	0.830878	0.374819	0.235931

Pd	Pd63	0.831091	0.625030	0.235767
Pd	Pd64	0.830572	0.875001	0.236208
Pd	Pd65	0.999071	0.999944	0.268390
Pd	Pd66	0.999057	0.249899	0.268364
Pd	Pd67	0.999314	0.499918	0.268391
Pd	Pd68	0.999237	0.749814	0.268400
Pd	Pd69	0.499445	0.999575	0.268402
Pd	Pd70	0.498968	0.252001	0.270372
Pd	Pd71	0.499990	0.500484	0.269451
Pd	Pd72	0.498990	0.748186	0.270088
Pd	Pd73	0.165039	0.124968	0.307511
Pd	Pd74	0.165250	0.374872	0.307747
Pd	Pd75	0.165556	0.624033	0.307883
Pd	Pd76	0.164851	0.874625	0.307425
Pd	Pd77	0.665719	0.124544	0.308041
Pd	Pd78	0.666466	0.374881	0.307617
Pd	Pd79	0.666329	0.624927	0.307855
Pd	Pd80	0.665802	0.875306	0.308094
Pd	Pd81	0.830591	0.749968	0.338232
Pd	Pd82	0.329388	0.999307	0.338260
Pd	Pd83	0.329215	0.248474	0.338457
Pd	Pd84	0.331271	0.498909	0.337827
Pd	Pd85	0.328675	0.750456	0.338550
Pd	Pd86	0.830869	0.999932	0.338540
Pd	Pd87	0.830680	0.249696	0.338357
Pd	Pd88	0.830523	0.499940	0.338120
Pd	Pd89	0.997641	0.124953	0.368398
Pd	Pd90	0.997545	0.374816	0.368338
Pd	Pd91	0.997571	0.624853	0.368316
Pd	Pd92	0.997574	0.874741	0.368392
Pd	Pd93	0.496985	0.121519	0.368486
Pd	Pd94	0.498003	0.369001	0.369539
Pd	Pd95	0.497508	0.629920	0.370766
Pd	Pd96	0.496927	0.876041	0.368623
C	C97	0.480565	0.599709	0.450876
O	O98	0.463109	0.634922	0.496845
O	O99	0.500076	0.426443	0.453146
H	H100	0.439445	0.399507	0.472509

Transition state of R115 $\text{HCOOH}^* + * = \text{HCO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.166667 -0.000000 0.000000
 Pd Pd2 0.166667 0.250000 0.000000
 Pd Pd3 0.166667 0.500000 0.000000
 Pd Pd4 0.166667 0.750000 0.000000
 Pd Pd5 0.666667 0.000000 0.000000

Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166076	0.999863	0.202945
Pd	Pd50	0.166091	0.249775	0.202911
Pd	Pd51	0.165968	0.499888	0.202874
Pd	Pd52	0.165963	0.749920	0.202921
Pd	Pd53	0.665933	0.000042	0.202978
Pd	Pd54	0.665356	0.250048	0.203143
Pd	Pd55	0.665544	0.500152	0.203077
Pd	Pd56	0.665502	0.750044	0.203174
Pd	Pd57	0.331399	0.125034	0.236144
Pd	Pd58	0.331181	0.375043	0.236075
Pd	Pd59	0.331040	0.624941	0.236226
Pd	Pd60	0.331359	0.874652	0.236161
Pd	Pd61	0.830787	0.124964	0.236202
Pd	Pd62	0.830970	0.374904	0.235912
Pd	Pd63	0.830720	0.625037	0.236119
Pd	Pd64	0.830784	0.874943	0.236242
Pd	Pd65	0.999323	0.999890	0.268433

Pd	Pd66	0.999302	0.249805	0.268411
Pd	Pd67	0.999472	0.499962	0.268465
Pd	Pd68	0.999365	0.749807	0.268451
Pd	Pd69	0.499677	0.999934	0.268347
Pd	Pd70	0.499317	0.252125	0.270246
Pd	Pd71	0.499683	0.500581	0.269504
Pd	Pd72	0.499461	0.749046	0.269510
Pd	Pd73	0.165483	0.124584	0.307726
Pd	Pd74	0.165323	0.374519	0.307683
Pd	Pd75	0.165975	0.624490	0.307834
Pd	Pd76	0.165383	0.874631	0.307700
Pd	Pd77	0.666113	0.124824	0.307920
Pd	Pd78	0.666517	0.375257	0.307659
Pd	Pd79	0.665785	0.625188	0.308390
Pd	Pd80	0.665978	0.875162	0.308164
Pd	Pd81	0.830885	0.749931	0.338402
Pd	Pd82	0.330542	0.999157	0.338172
Pd	Pd83	0.329778	0.249086	0.338125
Pd	Pd84	0.330807	0.499825	0.337908
Pd	Pd85	0.330644	0.749462	0.338284
Pd	Pd86	0.830979	0.999874	0.338520
Pd	Pd87	0.830854	0.249912	0.338349
Pd	Pd88	0.830931	0.500045	0.338212
Pd	Pd89	0.997832	0.124927	0.368407
Pd	Pd90	0.997700	0.374819	0.368437
Pd	Pd91	0.997977	0.624955	0.368380
Pd	Pd92	0.997842	0.874858	0.368426
Pd	Pd93	0.497479	0.123026	0.368269
Pd	Pd94	0.497630	0.372811	0.369653
Pd	Pd95	0.498040	0.625691	0.372549
Pd	Pd96	0.497886	0.875043	0.368398
C	C97	0.499834	0.609976	0.456525
O	O98	0.432541	0.647325	0.485419
O	O99	0.493106	0.415671	0.453248
H	H100	0.424193	0.405853	0.465809
H	H101	0.578761	0.596056	0.468656

Transition state of R116 $\text{H}_2\text{COOH}^* + * = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000

Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165870	0.999800	0.202861
Pd	Pd50	0.166034	0.249498	0.202826
Pd	Pd51	0.166041	0.499449	0.202819
Pd	Pd52	0.165853	0.749771	0.202914
Pd	Pd53	0.665687	0.000273	0.203074
Pd	Pd54	0.665317	0.249928	0.203147
Pd	Pd55	0.665482	0.499790	0.202733
Pd	Pd56	0.666158	0.750213	0.202538
Pd	Pd57	0.331526	0.124847	0.236266
Pd	Pd58	0.331270	0.374337	0.236082
Pd	Pd59	0.330855	0.624404	0.236031
Pd	Pd60	0.330623	0.875262	0.236034
Pd	Pd61	0.830687	0.124959	0.236219
Pd	Pd62	0.831048	0.374849	0.235993
Pd	Pd63	0.831232	0.624736	0.235912
Pd	Pd64	0.831001	0.874972	0.236163
Pd	Pd65	0.999311	0.999722	0.268442
Pd	Pd66	0.999449	0.249733	0.268469
Pd	Pd67	0.999435	0.499716	0.268491

Pd	Pd68	0.999379	0.749732	0.268509
Pd	Pd69	0.499359	0.999668	0.269276
Pd	Pd70	0.499257	0.251940	0.270500
Pd	Pd71	0.499233	0.500828	0.269872
Pd	Pd72	0.499447	0.751429	0.267833
Pd	Pd73	0.165433	0.124086	0.307686
Pd	Pd74	0.165656	0.373763	0.307630
Pd	Pd75	0.165024	0.623904	0.307690
Pd	Pd76	0.165244	0.874379	0.307865
Pd	Pd77	0.665967	0.124952	0.308244
Pd	Pd78	0.667215	0.374991	0.307228
Pd	Pd79	0.667424	0.625341	0.306720
Pd	Pd80	0.666242	0.875338	0.307650
Pd	Pd81	0.830768	0.749848	0.338416
Pd	Pd82	0.330306	0.998842	0.338424
Pd	Pd83	0.330708	0.248168	0.338450
Pd	Pd84	0.329729	0.497338	0.337883
Pd	Pd85	0.328952	0.749633	0.337478
Pd	Pd86	0.830930	0.999895	0.338468
Pd	Pd87	0.831175	0.249707	0.338502
Pd	Pd88	0.830909	0.499667	0.338540
Pd	Pd89	0.997826	0.124635	0.368425
Pd	Pd90	0.998044	0.374731	0.368445
Pd	Pd91	0.997378	0.624698	0.368520
Pd	Pd92	0.997611	0.874700	0.368473
Pd	Pd93	0.497829	0.121082	0.368994
Pd	Pd94	0.501930	0.369973	0.370584
Pd	Pd95	0.496196	0.624407	0.364801
Pd	Pd96	0.498576	0.873788	0.369772
C	C97	0.569888	0.505493	0.476216
O	O98	0.513638	0.422991	0.458744
O	O99	0.508619	0.688510	0.446391
H	H100	0.635182	0.536422	0.451897
H	H101	0.562867	0.535748	0.520780
H	H102	0.441500	0.691678	0.462304

Transition state of R117 COOH* + H* = CO* + H₂O* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165986	0.999909	0.202870
Pd	Pd50	0.165936	0.249918	0.202912
Pd	Pd51	0.165978	0.499974	0.202796
Pd	Pd52	0.165898	0.750079	0.202904
Pd	Pd53	0.665763	0.000207	0.202996
Pd	Pd54	0.665524	0.250079	0.203194
Pd	Pd55	0.665488	0.499815	0.202981
Pd	Pd56	0.665353	0.750257	0.202968
Pd	Pd57	0.331166	0.125178	0.236279
Pd	Pd58	0.330996	0.375062	0.236182
Pd	Pd59	0.330885	0.624906	0.236185
Pd	Pd60	0.331147	0.874548	0.236330
Pd	Pd61	0.830372	0.125117	0.236328
Pd	Pd62	0.830205	0.375271	0.236569
Pd	Pd63	0.830454	0.624817	0.236276
Pd	Pd64	0.830346	0.875022	0.236251
Pd	Pd65	0.998752	0.999973	0.268296
Pd	Pd66	0.998774	0.249987	0.268410
Pd	Pd67	0.998454	0.499930	0.268594
Pd	Pd68	0.998835	0.749940	0.268381

Pd	Pd69	0.499323	0.999924	0.268509
Pd	Pd70	0.499378	0.250934	0.269241
Pd	Pd71	0.499210	0.500111	0.269655
Pd	Pd72	0.498971	0.748837	0.269553
Pd	Pd73	0.164781	0.124339	0.307460
Pd	Pd74	0.164701	0.374613	0.307425
Pd	Pd75	0.164769	0.625442	0.307487
Pd	Pd76	0.164857	0.875368	0.307549
Pd	Pd77	0.665371	0.124560	0.308478
Pd	Pd78	0.665212	0.374133	0.308565
Pd	Pd79	0.665087	0.626810	0.307015
Pd	Pd80	0.665377	0.875782	0.308262
Pd	Pd81	0.830314	0.750293	0.338404
Pd	Pd82	0.330375	0.999722	0.338352
Pd	Pd83	0.329757	0.250390	0.338205
Pd	Pd84	0.328720	0.500058	0.338284
Pd	Pd85	0.330303	0.749068	0.338406
Pd	Pd86	0.830557	0.000079	0.338457
Pd	Pd87	0.830617	0.249342	0.338766
Pd	Pd88	0.828293	0.499764	0.340285
Pd	Pd89	0.997536	0.124884	0.368369
Pd	Pd90	0.996859	0.374933	0.368322
Pd	Pd91	0.996819	0.624814	0.368300
Pd	Pd92	0.997292	0.874890	0.368242
Pd	Pd93	0.496837	0.124686	0.368409
Pd	Pd94	0.497621	0.374490	0.371268
Pd	Pd95	0.499111	0.624569	0.372131
Pd	Pd96	0.497210	0.874742	0.368580
C	C97	0.547735	0.498978	0.431188
O	O98	0.514294	0.491000	0.479079
O	O99	0.663124	0.500941	0.429021
H	H100	0.688727	0.458966	0.463065
H	H101	0.710886	0.478744	0.379058

Transition state of R118 HCOOH* + H* = HCO* + H₂O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723

Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165995	0.999689	0.202857
Pd	Pd50	0.165984	0.249566	0.202834
Pd	Pd51	0.165919	0.499764	0.202774
Pd	Pd52	0.166039	0.749809	0.202876
Pd	Pd53	0.666049	0.999872	0.202970
Pd	Pd54	0.665402	0.249986	0.203054
Pd	Pd55	0.665787	0.500463	0.203239
Pd	Pd56	0.665562	0.750051	0.203221
Pd	Pd57	0.331277	0.124614	0.236223
Pd	Pd58	0.330966	0.374717	0.235965
Pd	Pd59	0.331313	0.624329	0.236153
Pd	Pd60	0.331419	0.874250	0.236213
Pd	Pd61	0.830723	0.125034	0.236292
Pd	Pd62	0.831044	0.374842	0.236000
Pd	Pd63	0.830409	0.625217	0.236389
Pd	Pd64	0.830873	0.874935	0.236440
Pd	Pd65	0.999158	0.999911	0.268401
Pd	Pd66	0.999363	0.249883	0.268455
Pd	Pd67	0.999641	0.499876	0.268456
Pd	Pd68	0.999388	0.749727	0.268484
Pd	Pd69	0.499824	0.999513	0.268236
Pd	Pd70	0.499003	0.251545	0.270216

Pd	Pd71	0.500196	0.499423	0.269143
Pd	Pd72	0.499956	0.748181	0.269597
Pd	Pd73	0.165417	0.124101	0.307700
Pd	Pd74	0.165657	0.373968	0.307492
Pd	Pd75	0.166085	0.624383	0.307541
Pd	Pd76	0.165327	0.874771	0.307458
Pd	Pd77	0.666224	0.124798	0.308046
Pd	Pd78	0.666481	0.374560	0.307332
Pd	Pd79	0.666538	0.625563	0.310669
Pd	Pd80	0.666398	0.875446	0.308402
Pd	Pd81	0.832047	0.750571	0.339049
Pd	Pd82	0.330501	0.998396	0.338365
Pd	Pd83	0.330619	0.248647	0.337981
Pd	Pd84	0.331124	0.498500	0.337904
Pd	Pd85	0.330527	0.748696	0.338296
Pd	Pd86	0.831161	0.000150	0.338681
Pd	Pd87	0.831031	0.250245	0.338660
Pd	Pd88	0.832619	0.499628	0.338308
Pd	Pd89	0.997912	0.125040	0.368419
Pd	Pd90	0.998527	0.374598	0.368538
Pd	Pd91	0.998837	0.625066	0.368454
Pd	Pd92	0.998473	0.875412	0.368460
Pd	Pd93	0.497734	0.121096	0.368312
Pd	Pd94	0.499695	0.368947	0.370881
Pd	Pd95	0.497985	0.623417	0.371379
Pd	Pd96	0.497783	0.874144	0.368413
C	C97	0.559424	0.550599	0.444635
O	O98	0.530452	0.441179	0.452972
O	O99	0.670894	0.563368	0.436485
H	H100	0.537617	0.623648	0.474634
H	H101	0.695122	0.478667	0.432791
H	H102	0.687110	0.599262	0.382872

Transition state of R119 $\text{H}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723

Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165784	0.999979	0.202895
Pd	Pd50	0.165965	0.249920	0.202909
Pd	Pd51	0.166213	0.499948	0.202774
Pd	Pd52	0.165933	0.750000	0.202902
Pd	Pd53	0.665803	0.999814	0.203094
Pd	Pd54	0.665713	0.249562	0.202844
Pd	Pd55	0.666046	0.499986	0.202445
Pd	Pd56	0.665615	0.750225	0.202957
Pd	Pd57	0.330980	0.124861	0.236197
Pd	Pd58	0.331156	0.374808	0.236039
Pd	Pd59	0.331218	0.625042	0.236040
Pd	Pd60	0.331112	0.874827	0.236252
Pd	Pd61	0.830676	0.125003	0.236255
Pd	Pd62	0.831170	0.375347	0.236399
Pd	Pd63	0.830887	0.624670	0.236576
Pd	Pd64	0.830692	0.874607	0.236385
Pd	Pd65	0.999044	0.999882	0.268389
Pd	Pd66	0.999448	0.250098	0.268493
Pd	Pd67	0.998923	0.499905	0.268733
Pd	Pd68	0.999167	0.749655	0.268531
Pd	Pd69	0.499223	0.999664	0.268493
Pd	Pd70	0.498982	0.250774	0.269791
Pd	Pd71	0.500192	0.499578	0.268689

Pd	Pd72	0.499133	0.748492	0.269993
Pd	Pd73	0.165240	0.124661	0.307639
Pd	Pd74	0.165513	0.375022	0.307756
Pd	Pd75	0.165337	0.625024	0.307652
Pd	Pd76	0.165279	0.875015	0.307637
Pd	Pd77	0.665951	0.124073	0.308441
Pd	Pd78	0.666418	0.373734	0.306140
Pd	Pd79	0.667045	0.625569	0.306849
Pd	Pd80	0.665950	0.875219	0.308370
Pd	Pd81	0.830797	0.749814	0.338936
Pd	Pd82	0.329999	0.999731	0.338559
Pd	Pd83	0.330293	0.249289	0.338147
Pd	Pd84	0.331159	0.499994	0.337431
Pd	Pd85	0.330568	0.749971	0.338237
Pd	Pd86	0.831200	0.999750	0.338467
Pd	Pd87	0.831125	0.249037	0.338469
Pd	Pd88	0.827639	0.499634	0.341716
Pd	Pd89	0.997909	0.124871	0.368413
Pd	Pd90	0.996827	0.375184	0.368339
Pd	Pd91	0.996993	0.624384	0.368471
Pd	Pd92	0.997821	0.874582	0.368379
Pd	Pd93	0.497821	0.122342	0.368803
Pd	Pd94	0.499693	0.367847	0.369300
Pd	Pd95	0.501292	0.629499	0.368829
Pd	Pd96	0.497657	0.876608	0.368794
C	C97	0.615092	0.500323	0.465366
O	O98	0.528267	0.501470	0.434019
O	O99	0.694547	0.423681	0.441406
H	H100	0.599504	0.461336	0.507749
H	H101	0.649228	0.590994	0.468928
H	H102	0.662648	0.351718	0.423273
H	H103	0.747223	0.467009	0.393991

Transition state of R120 HOCOH* + * = COH* + OH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723

Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166340	0.999689	0.202955
Pd	Pd50	0.166357	0.250078	0.202963
Pd	Pd51	0.165902	0.499992	0.203056
Pd	Pd52	0.165935	0.749753	0.203075
Pd	Pd53	0.665854	0.000079	0.202932
Pd	Pd54	0.665890	0.249916	0.202910
Pd	Pd55	0.665630	0.499928	0.202856
Pd	Pd56	0.665697	0.750097	0.202834
Pd	Pd57	0.331112	0.124868	0.236271
Pd	Pd58	0.330994	0.376414	0.237444
Pd	Pd59	0.330875	0.624889	0.236615
Pd	Pd60	0.331026	0.873336	0.237393
Pd	Pd61	0.830707	0.124993	0.236191
Pd	Pd62	0.830600	0.374795	0.236032
Pd	Pd63	0.830468	0.625005	0.235914
Pd	Pd64	0.830622	0.875176	0.236061
Pd	Pd65	0.999073	0.000010	0.268352
Pd	Pd66	0.999027	0.249761	0.268358
Pd	Pd67	0.998601	0.499773	0.268417
Pd	Pd68	0.998636	0.750050	0.268412
Pd	Pd69	0.499676	0.999883	0.268429
Pd	Pd70	0.499645	0.249924	0.268312
Pd	Pd71	0.498938	0.500733	0.269687

Pd	Pd72	0.499332	0.749505	0.269583
Pd	Pd73	0.165596	0.124648	0.308080
Pd	Pd74	0.164249	0.373016	0.307688
Pd	Pd75	0.162629	0.625095	0.307508
Pd	Pd76	0.164688	0.876292	0.307746
Pd	Pd77	0.666042	0.125046	0.308080
Pd	Pd78	0.665951	0.374851	0.307588
Pd	Pd79	0.664536	0.625161	0.307299
Pd	Pd80	0.666024	0.875343	0.307670
Pd	Pd81	0.829887	0.749898	0.338129
Pd	Pd82	0.330974	0.999410	0.338265
Pd	Pd83	0.330831	0.249985	0.338260
Pd	Pd84	0.327099	0.497985	0.342242
Pd	Pd85	0.328878	0.750726	0.342006
Pd	Pd86	0.830681	0.999975	0.338409
Pd	Pd87	0.830634	0.250115	0.338393
Pd	Pd88	0.829817	0.500213	0.338095
Pd	Pd89	0.997481	0.124955	0.368408
Pd	Pd90	0.996998	0.374950	0.368468
Pd	Pd91	0.995581	0.624984	0.368722
Pd	Pd92	0.997163	0.874951	0.368422
Pd	Pd93	0.498092	0.125210	0.368131
Pd	Pd94	0.498867	0.372982	0.368263
Pd	Pd95	0.505552	0.625354	0.372117
Pd	Pd96	0.499200	0.877396	0.368591
C	C97	0.289507	0.624606	0.395076
O	O98	0.228489	0.628458	0.438961
O	O99	0.415089	0.625945	0.445880
H	H100	0.267198	0.659305	0.471606
H	H101	0.417753	0.540292	0.457669

Transition state of R121 HOCOH* + * = CO* + H₂O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723

Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166128	0.000005	0.202900
Pd	Pd50	0.166001	0.249930	0.202907
Pd	Pd51	0.165952	0.499996	0.202891
Pd	Pd52	0.166057	0.750036	0.202951
Pd	Pd53	0.665814	0.999979	0.203016
Pd	Pd54	0.665373	0.249836	0.203094
Pd	Pd55	0.665791	0.500164	0.202940
Pd	Pd56	0.665498	0.750312	0.203012
Pd	Pd57	0.331450	0.125405	0.236356
Pd	Pd58	0.331194	0.375226	0.236238
Pd	Pd59	0.331293	0.624654	0.236237
Pd	Pd60	0.331461	0.874707	0.236298
Pd	Pd61	0.830533	0.124940	0.236320
Pd	Pd62	0.830897	0.374888	0.235941
Pd	Pd63	0.830824	0.625305	0.236152
Pd	Pd64	0.830506	0.874967	0.236458
Pd	Pd65	0.998875	0.000012	0.268368
Pd	Pd66	0.999175	0.250088	0.268426
Pd	Pd67	0.999569	0.500049	0.268538
Pd	Pd68	0.999074	0.749950	0.268490
Pd	Pd69	0.499638	0.000152	0.268525
Pd	Pd70	0.499428	0.251342	0.269925
Pd	Pd71	0.500056	0.499795	0.269594
Pd	Pd72	0.499672	0.748921	0.269482
Pd	Pd73	0.165143	0.124430	0.307535

Pd	Pd74	0.165523	0.374419	0.307634
Pd	Pd75	0.165580	0.625447	0.307650
Pd	Pd76	0.165080	0.875593	0.307528
Pd	Pd77	0.665923	0.124548	0.308338
Pd	Pd78	0.666184	0.374473	0.307600
Pd	Pd79	0.666445	0.625874	0.307859
Pd	Pd80	0.665990	0.875453	0.308461
Pd	Pd81	0.830730	0.749879	0.339028
Pd	Pd82	0.330960	0.999970	0.338364
Pd	Pd83	0.330764	0.250554	0.338396
Pd	Pd84	0.329706	0.499809	0.338450
Pd	Pd85	0.330735	0.749398	0.338201
Pd	Pd86	0.830863	0.999953	0.338726
Pd	Pd87	0.830829	0.250192	0.338363
Pd	Pd88	0.831317	0.500083	0.338068
Pd	Pd89	0.997707	0.125024	0.368368
Pd	Pd90	0.997873	0.374867	0.368477
Pd	Pd91	0.997873	0.625199	0.368510
Pd	Pd92	0.997688	0.875024	0.368427
Pd	Pd93	0.497777	0.125021	0.368676
Pd	Pd94	0.499553	0.374582	0.372600
Pd	Pd95	0.499895	0.625010	0.371405
Pd	Pd96	0.497749	0.874873	0.368491
C	C97	0.543409	0.500166	0.429497
O	O98	0.517155	0.511980	0.481766
O	O99	0.658105	0.496589	0.441489
H	H100	0.696209	0.552860	0.416143
H	H101	0.614380	0.521274	0.485741

Transition state of R122 HOCHOH* + * = HCOH* + OH* on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165928	0.999952	0.202924
Pd	Pd50	0.166139	0.250135	0.202834
Pd	Pd51	0.165919	0.499991	0.202971
Pd	Pd52	0.166212	0.749925	0.202831
Pd	Pd53	0.665949	0.999952	0.203035
Pd	Pd54	0.665580	0.249862	0.203079
Pd	Pd55	0.666322	0.500003	0.202460
Pd	Pd56	0.665677	0.750035	0.203093
Pd	Pd57	0.331387	0.125318	0.235807
Pd	Pd58	0.330702	0.375849	0.237219
Pd	Pd59	0.330825	0.624245	0.237094
Pd	Pd60	0.331331	0.875098	0.235652
Pd	Pd61	0.830687	0.124861	0.236235
Pd	Pd62	0.831066	0.374678	0.235932
Pd	Pd63	0.831072	0.625131	0.235947
Pd	Pd64	0.830822	0.875054	0.236218
Pd	Pd65	0.999181	0.999846	0.268463
Pd	Pd66	0.998898	0.249739	0.268410
Pd	Pd67	0.998964	0.499938	0.268436
Pd	Pd68	0.999027	0.750078	0.268427
Pd	Pd69	0.499944	0.000003	0.268401
Pd	Pd70	0.499872	0.250869	0.270002
Pd	Pd71	0.500034	0.499812	0.268520
Pd	Pd72	0.499846	0.749056	0.269950
Pd	Pd73	0.164948	0.124492	0.307583
Pd	Pd74	0.163567	0.373766	0.307524
Pd	Pd75	0.163788	0.625864	0.307389

Pd	Pd76	0.165022	0.875047	0.307736
Pd	Pd77	0.666300	0.124469	0.308325
Pd	Pd78	0.666897	0.374940	0.307453
Pd	Pd79	0.666645	0.624922	0.307494
Pd	Pd80	0.666318	0.875372	0.308280
Pd	Pd81	0.830927	0.750072	0.338489
Pd	Pd82	0.330154	0.999749	0.337751
Pd	Pd83	0.329465	0.247975	0.337639
Pd	Pd84	0.326112	0.498954	0.340949
Pd	Pd85	0.329382	0.752135	0.337671
Pd	Pd86	0.831312	0.999862	0.338571
Pd	Pd87	0.830909	0.249700	0.338533
Pd	Pd88	0.830753	0.499986	0.338169
Pd	Pd89	0.997833	0.124914	0.368577
Pd	Pd90	0.997160	0.374814	0.368625
Pd	Pd91	0.997315	0.624941	0.368689
Pd	Pd92	0.997946	0.874733	0.368636
Pd	Pd93	0.497602	0.123017	0.368430
Pd	Pd94	0.498909	0.370269	0.368476
Pd	Pd95	0.497829	0.629448	0.368151
Pd	Pd96	0.497558	0.876798	0.368446
C	C97	0.309469	0.504500	0.423150
O	O98	0.275710	0.600334	0.450300
O	O99	0.459373	0.500622	0.435729
H	H100	0.301966	0.420952	0.448254
H	H101	0.275075	0.671588	0.423455
H	H102	0.487830	0.504361	0.473969

Transition state of R123 HOCHOH* + * = HCO* + H₂O* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166109	0.000278	0.202975
Pd	Pd50	0.166093	0.250163	0.202973
Pd	Pd51	0.165992	0.500205	0.202952
Pd	Pd52	0.166237	0.750341	0.202986
Pd	Pd53	0.666020	0.000161	0.203076
Pd	Pd54	0.665475	0.249844	0.203177
Pd	Pd55	0.665962	0.500018	0.202856
Pd	Pd56	0.665543	0.750256	0.203135
Pd	Pd57	0.331508	0.125710	0.236359
Pd	Pd58	0.331251	0.375351	0.236288
Pd	Pd59	0.331222	0.625219	0.236138
Pd	Pd60	0.331594	0.875347	0.236264
Pd	Pd61	0.830890	0.125106	0.236356
Pd	Pd62	0.831153	0.374953	0.236039
Pd	Pd63	0.831552	0.625202	0.235918
Pd	Pd64	0.830899	0.875143	0.236336
Pd	Pd65	0.999505	0.000154	0.268502
Pd	Pd66	0.999621	0.250265	0.268500
Pd	Pd67	0.999882	0.500118	0.268537
Pd	Pd68	0.999768	0.750235	0.268463
Pd	Pd69	0.499957	0.000495	0.268421
Pd	Pd70	0.499483	0.251957	0.270074
Pd	Pd71	0.500297	0.500383	0.268755
Pd	Pd72	0.499445	0.748390	0.270314
Pd	Pd73	0.165624	0.125520	0.307762
Pd	Pd74	0.166127	0.375692	0.307933
Pd	Pd75	0.166081	0.625561	0.307901
Pd	Pd76	0.165774	0.875672	0.307839

Pd	Pd77	0.666379	0.125007	0.308454
Pd	Pd78	0.667033	0.375264	0.307864
Pd	Pd79	0.667484	0.625191	0.307142
Pd	Pd80	0.666334	0.875579	0.308302
Pd	Pd81	0.831394	0.750271	0.338445
Pd	Pd82	0.330710	0.001267	0.338489
Pd	Pd83	0.330539	0.250973	0.338725
Pd	Pd84	0.331842	0.500899	0.337805
Pd	Pd85	0.330799	0.751135	0.338294
Pd	Pd86	0.831266	0.000199	0.338757
Pd	Pd87	0.831300	0.250196	0.338585
Pd	Pd88	0.831419	0.500143	0.338279
Pd	Pd89	0.998073	0.125240	0.368518
Pd	Pd90	0.998250	0.375090	0.368495
Pd	Pd91	0.998353	0.625255	0.368472
Pd	Pd92	0.998128	0.875169	0.368503
Pd	Pd93	0.497783	0.126177	0.368646
Pd	Pd94	0.499806	0.375241	0.370620
Pd	Pd95	0.500445	0.629242	0.369908
Pd	Pd96	0.497865	0.878221	0.368545
C	C97	0.515868	0.436791	0.448787
O	O98	0.416970	0.415353	0.486958
O	O99	0.512073	0.560301	0.455886
H	H100	0.577676	0.389948	0.470742
H	H101	0.435110	0.381519	0.524158
H	H102	0.433728	0.522658	0.484155

Transition state of R124 HO₂COH* + H* = COH* + H₂O* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166346	0.000025	0.202948
Pd	Pd50	0.166300	0.250029	0.203010
Pd	Pd51	0.166358	0.500018	0.202826
Pd	Pd52	0.166279	0.750004	0.202968
Pd	Pd53	0.666002	0.000008	0.203043
Pd	Pd54	0.665731	0.249612	0.202829
Pd	Pd55	0.665900	0.500043	0.202734
Pd	Pd56	0.665623	0.750324	0.202953
Pd	Pd57	0.331673	0.125384	0.236501
Pd	Pd58	0.331448	0.375410	0.236422
Pd	Pd59	0.331427	0.624749	0.236400
Pd	Pd60	0.331698	0.874666	0.236497
Pd	Pd61	0.830860	0.125141	0.236420
Pd	Pd62	0.831090	0.375128	0.236346
Pd	Pd63	0.830950	0.624868	0.236406
Pd	Pd64	0.830884	0.874993	0.236397
Pd	Pd65	0.999174	0.000114	0.268352
Pd	Pd66	0.999436	0.250224	0.268483
Pd	Pd67	0.999353	0.500081	0.268586
Pd	Pd68	0.999496	0.749981	0.268441
Pd	Pd69	0.499932	0.999962	0.268643
Pd	Pd70	0.499682	0.250991	0.269605
Pd	Pd71	0.500039	0.500379	0.269378
Pd	Pd72	0.499687	0.749014	0.269933
Pd	Pd73	0.165399	0.124539	0.307607
Pd	Pd74	0.165713	0.374737	0.307784
Pd	Pd75	0.165742	0.625417	0.307738
Pd	Pd76	0.165423	0.875649	0.307538
Pd	Pd77	0.666321	0.124332	0.308455

Pd	Pd78	0.666499	0.373446	0.306751
Pd	Pd79	0.666252	0.626339	0.307266
Pd	Pd80	0.666330	0.875822	0.308375
Pd	Pd81	0.830993	0.750339	0.338724
Pd	Pd82	0.331289	0.000106	0.338600
Pd	Pd83	0.331206	0.251015	0.338553
Pd	Pd84	0.330318	0.500208	0.338973
Pd	Pd85	0.331403	0.749155	0.338491
Pd	Pd86	0.831221	0.000144	0.338704
Pd	Pd87	0.830901	0.249950	0.338924
Pd	Pd88	0.828418	0.500211	0.340171
Pd	Pd89	0.997834	0.125353	0.368340
Pd	Pd90	0.997001	0.375489	0.368316
Pd	Pd91	0.997116	0.624819	0.368265
Pd	Pd92	0.997941	0.875052	0.368312
Pd	Pd93	0.498201	0.125406	0.368794
Pd	Pd94	0.501308	0.374417	0.371264
Pd	Pd95	0.501361	0.626281	0.372364
Pd	Pd96	0.498252	0.875253	0.368875
C	C97	0.554763	0.499738	0.425108
O	O98	0.524855	0.494028	0.480393
O	O99	0.665589	0.503244	0.431337
H	H100	0.452283	0.487174	0.480192
H	H101	0.688684	0.427043	0.449341
H	H102	0.706675	0.509288	0.385891

Transition state of R125 HOCHOH* + H* = HCOH* + H₂O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166030	0.000125	0.202960
Pd	Pd50	0.166022	0.250144	0.202999
Pd	Pd51	0.166211	0.500024	0.202986
Pd	Pd52	0.166087	0.749963	0.203044
Pd	Pd53	0.666002	0.999866	0.203109
Pd	Pd54	0.665634	0.249519	0.202753
Pd	Pd55	0.665575	0.500308	0.202785
Pd	Pd56	0.665834	0.750234	0.202986
Pd	Pd57	0.331153	0.125357	0.236396
Pd	Pd58	0.331310	0.375100	0.236367
Pd	Pd59	0.331442	0.624746	0.236528
Pd	Pd60	0.331108	0.875000	0.236308
Pd	Pd61	0.830822	0.125172	0.236390
Pd	Pd62	0.830788	0.375123	0.236397
Pd	Pd63	0.830627	0.624779	0.236518
Pd	Pd64	0.830703	0.874869	0.236448
Pd	Pd65	0.999072	0.000048	0.268425
Pd	Pd66	0.999485	0.250136	0.268561
Pd	Pd67	0.999501	0.499968	0.268565
Pd	Pd68	0.999087	0.749921	0.268485
Pd	Pd69	0.499652	0.999950	0.268503
Pd	Pd70	0.499549	0.250286	0.269330
Pd	Pd71	0.500055	0.499303	0.269644
Pd	Pd72	0.499811	0.750056	0.268644
Pd	Pd73	0.165310	0.125117	0.307762
Pd	Pd74	0.166178	0.374976	0.308020
Pd	Pd75	0.165611	0.625123	0.307834
Pd	Pd76	0.164859	0.875601	0.307646
Pd	Pd77	0.666158	0.124138	0.308363
Pd	Pd78	0.666635	0.374107	0.306503

Pd	Pd79	0.666291	0.625997	0.307873
Pd	Pd80	0.665890	0.875262	0.308574
Pd	Pd81	0.830768	0.749690	0.338882
Pd	Pd82	0.330692	0.000361	0.338347
Pd	Pd83	0.331885	0.251037	0.338752
Pd	Pd84	0.332124	0.499236	0.338712
Pd	Pd85	0.330038	0.750107	0.338439
Pd	Pd86	0.830903	0.999945	0.338678
Pd	Pd87	0.830721	0.250085	0.338875
Pd	Pd88	0.830298	0.499578	0.339573
Pd	Pd89	0.997674	0.124958	0.368438
Pd	Pd90	0.997614	0.375059	0.368467
Pd	Pd91	0.997473	0.624744	0.368438
Pd	Pd92	0.997538	0.874891	0.368463
Pd	Pd93	0.497594	0.124081	0.368627
Pd	Pd94	0.504712	0.372993	0.372149
Pd	Pd95	0.499746	0.625630	0.369383
Pd	Pd96	0.497532	0.874795	0.368695
C	C97	0.595770	0.384659	0.440232
O	O98	0.540176	0.393846	0.489407
O	O99	0.652469	0.497600	0.438209
H	H100	0.648678	0.308103	0.439051
H	H101	0.500262	0.319971	0.492879
H	H102	0.705508	0.487883	0.407194
H	H103	0.596130	0.569334	0.411968

Transition state of R126 CCOOH* + * = CCO* + OH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166113	0.999621	0.203044
Pd	Pd50	0.165890	0.249886	0.202983
Pd	Pd51	0.165827	0.499655	0.202968
Pd	Pd52	0.166167	0.749730	0.202977
Pd	Pd53	0.666540	0.999867	0.202675
Pd	Pd54	0.666070	0.248875	0.201764
Pd	Pd55	0.665943	0.501339	0.201637
Pd	Pd56	0.666426	0.751089	0.202461
Pd	Pd57	0.330708	0.125096	0.236273
Pd	Pd58	0.331489	0.374870	0.236157
Pd	Pd59	0.330807	0.624009	0.236296
Pd	Pd60	0.331038	0.874174	0.236433
Pd	Pd61	0.831231	0.126777	0.237683
Pd	Pd62	0.833162	0.375647	0.236495
Pd	Pd63	0.831663	0.624298	0.237538
Pd	Pd64	0.831700	0.875380	0.236607
Pd	Pd65	0.000118	0.000475	0.268515
Pd	Pd66	0.998826	0.250766	0.269634
Pd	Pd67	0.998970	0.500310	0.269740
Pd	Pd68	0.000631	0.750144	0.268598
Pd	Pd69	0.499175	0.999316	0.267950
Pd	Pd70	0.498756	0.249499	0.269569
Pd	Pd71	0.498755	0.500325	0.269775
Pd	Pd72	0.499083	0.749270	0.268863
Pd	Pd73	0.166138	0.124987	0.307983
Pd	Pd74	0.168562	0.374838	0.307720
Pd	Pd75	0.167168	0.624379	0.308114
Pd	Pd76	0.167176	0.874460	0.308090
Pd	Pd77	0.665823	0.121628	0.306785
Pd	Pd78	0.664855	0.376002	0.300555

Pd	Pd79	0.666861	0.630074	0.305269
Pd	Pd80	0.667161	0.876009	0.308248
Pd	Pd81	0.832464	0.751228	0.338766
Pd	Pd82	0.331158	0.999922	0.338594
Pd	Pd83	0.334525	0.250652	0.338711
Pd	Pd84	0.336059	0.497611	0.339136
Pd	Pd85	0.333403	0.747553	0.338499
Pd	Pd86	0.832007	0.001525	0.338825
Pd	Pd87	0.826835	0.251168	0.346077
Pd	Pd88	0.826901	0.502730	0.346974
Pd	Pd89	0.998036	0.126236	0.368841
Pd	Pd90	0.001947	0.376174	0.368892
Pd	Pd91	0.998805	0.626174	0.368891
Pd	Pd92	0.999396	0.876322	0.368148
Pd	Pd93	0.499424	0.120073	0.368565
Pd	Pd94	0.513170	0.365315	0.373945
Pd	Pd95	0.503614	0.631186	0.370563
Pd	Pd96	0.498968	0.875855	0.368264
C	C97	0.732231	0.377528	0.373980
C	C98	0.660110	0.361803	0.420180
O	O99	0.658393	0.309455	0.465001
O	O100	0.588570	0.515347	0.427399
H	H101	0.562363	0.508207	0.466104

Transition state of R127 CHCOOH* + * = CHCO* + OH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447

Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166301	0.999602	0.202932
Pd	Pd50	0.166370	0.249949	0.202854
Pd	Pd51	0.166234	0.500004	0.202751
Pd	Pd52	0.166277	0.750077	0.202670
Pd	Pd53	0.665903	0.000356	0.202977
Pd	Pd54	0.665233	0.250035	0.203240
Pd	Pd55	0.666073	0.499985	0.202540
Pd	Pd56	0.666093	0.750294	0.202577
Pd	Pd57	0.331283	0.124967	0.236167
Pd	Pd58	0.331124	0.376602	0.237443
Pd	Pd59	0.331650	0.625516	0.236776
Pd	Pd60	0.330940	0.873146	0.238010
Pd	Pd61	0.830305	0.125090	0.236299
Pd	Pd62	0.830543	0.374795	0.236033
Pd	Pd63	0.831938	0.625103	0.235508
Pd	Pd64	0.830858	0.875246	0.236151
Pd	Pd65	0.998856	0.000204	0.268311
Pd	Pd66	0.998555	0.249661	0.268271
Pd	Pd67	0.998631	0.499577	0.268294
Pd	Pd68	0.998964	0.750305	0.268308
Pd	Pd69	0.499379	0.001358	0.268253
Pd	Pd70	0.499389	0.252202	0.270278
Pd	Pd71	0.500745	0.500954	0.269248
Pd	Pd72	0.500224	0.751167	0.269450
Pd	Pd73	0.164900	0.123932	0.307620
Pd	Pd74	0.163464	0.373624	0.307255
Pd	Pd75	0.163009	0.624872	0.306076
Pd	Pd76	0.164470	0.874953	0.307695
Pd	Pd77	0.666211	0.125266	0.308521
Pd	Pd78	0.666376	0.375249	0.307970
Pd	Pd79	0.668349	0.625539	0.306223
Pd	Pd80	0.666771	0.876199	0.307722

Pd	Pd81	0.831012	0.750410	0.338298
Pd	Pd82	0.329782	0.998891	0.338422
Pd	Pd83	0.328287	0.249050	0.337877
Pd	Pd84	0.327690	0.499393	0.339922
Pd	Pd85	0.328627	0.749135	0.342614
Pd	Pd86	0.831219	0.000214	0.338658
Pd	Pd87	0.830838	0.250181	0.338657
Pd	Pd88	0.830719	0.500235	0.338186
Pd	Pd89	0.997703	0.125278	0.368565
Pd	Pd90	0.997275	0.375092	0.368578
Pd	Pd91	0.997164	0.625164	0.368367
Pd	Pd92	0.997972	0.875203	0.368505
Pd	Pd93	0.497177	0.124333	0.368453
Pd	Pd94	0.496618	0.369354	0.368941
Pd	Pd95	0.505032	0.633589	0.369472
Pd	Pd96	0.499312	0.881345	0.368345
C	C97	0.321091	0.618124	0.404409
C	C98	0.407151	0.633866	0.441333
O	O99	0.427249	0.689261	0.483924
O	O100	0.478016	0.483146	0.441582
H	H101	0.248742	0.623942	0.426297
H	H102	0.534241	0.495171	0.467376

Transition state of R128 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + * = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165942	0.000438	0.202808
Pd	Pd50	0.166326	0.250699	0.202880
Pd	Pd51	0.166043	0.500091	0.202896
Pd	Pd52	0.166044	0.749921	0.202808
Pd	Pd53	0.665915	0.999976	0.202983
Pd	Pd54	0.665449	0.249894	0.202969
Pd	Pd55	0.665908	0.500289	0.202797
Pd	Pd56	0.665640	0.749997	0.203202
Pd	Pd57	0.331385	0.126190	0.235942
Pd	Pd58	0.331163	0.376974	0.237851
Pd	Pd59	0.331072	0.624300	0.236634
Pd	Pd60	0.331219	0.875119	0.235606
Pd	Pd61	0.830642	0.125044	0.236259
Pd	Pd62	0.831115	0.374836	0.235962
Pd	Pd63	0.831165	0.625059	0.235893
Pd	Pd64	0.830583	0.874994	0.236260
Pd	Pd65	0.998743	0.000145	0.268370
Pd	Pd66	0.999145	0.250049	0.268378
Pd	Pd67	0.999472	0.500023	0.268458
Pd	Pd68	0.999020	0.749995	0.268383
Pd	Pd69	0.499691	0.999925	0.268162
Pd	Pd70	0.499411	0.251530	0.270127
Pd	Pd71	0.500006	0.500683	0.269694
Pd	Pd72	0.499679	0.749360	0.269388
Pd	Pd73	0.165149	0.125138	0.307446
Pd	Pd74	0.165063	0.374614	0.307756
Pd	Pd75	0.164967	0.625331	0.307494
Pd	Pd76	0.164583	0.875698	0.307263
Pd	Pd77	0.666388	0.124484	0.308020
Pd	Pd78	0.667693	0.375127	0.307106
Pd	Pd79	0.665558	0.625649	0.307994
Pd	Pd80	0.665831	0.875222	0.308364
Pd	Pd81	0.830497	0.749856	0.338434

Pd	Pd82	0.330212	0.999983	0.337541
Pd	Pd83	0.330114	0.248803	0.338262
Pd	Pd84	0.328479	0.500251	0.342341
Pd	Pd85	0.329868	0.752082	0.336410
Pd	Pd86	0.830953	0.999797	0.338652
Pd	Pd87	0.831152	0.249924	0.338558
Pd	Pd88	0.830811	0.500262	0.338193
Pd	Pd89	0.997926	0.124960	0.368416
Pd	Pd90	0.997897	0.375059	0.368483
Pd	Pd91	0.997562	0.625104	0.368412
Pd	Pd92	0.997608	0.874849	0.368445
Pd	Pd93	0.498099	0.121432	0.368421
Pd	Pd94	0.502308	0.366218	0.368386
Pd	Pd95	0.495276	0.626543	0.371971
Pd	Pd96	0.497265	0.876259	0.368360
C	C97	0.322697	0.533241	0.428661
C	C98	0.412035	0.601635	0.445503
O	O99	0.434195	0.674360	0.481577
O	O100	0.507022	0.454955	0.446013
H	H101	0.322401	0.441015	0.446530
H	H102	0.255560	0.585759	0.438739
H	H103	0.574090	0.478333	0.457801

Transition state of R129 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + * = \text{CH}_3\text{CO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166040	0.999813	0.202902
Pd	Pd50	0.166127	0.249756	0.202872
Pd	Pd51	0.165994	0.499801	0.202877
Pd	Pd52	0.165971	0.749801	0.202904
Pd	Pd53	0.665965	0.000123	0.202973
Pd	Pd54	0.665328	0.249931	0.203137
Pd	Pd55	0.665619	0.500072	0.202955
Pd	Pd56	0.665576	0.750181	0.203009
Pd	Pd57	0.331430	0.124963	0.236190
Pd	Pd58	0.331309	0.374932	0.236138
Pd	Pd59	0.331110	0.624750	0.236231
Pd	Pd60	0.331357	0.874513	0.236154
Pd	Pd61	0.830840	0.124962	0.236254
Pd	Pd62	0.831016	0.374791	0.235914
Pd	Pd63	0.830778	0.625029	0.236068
Pd	Pd64	0.830764	0.874970	0.236282
Pd	Pd65	0.999324	0.999842	0.268450
Pd	Pd66	0.999434	0.249826	0.268445
Pd	Pd67	0.999580	0.499935	0.268468
Pd	Pd68	0.999390	0.749735	0.268446
Pd	Pd69	0.499708	0.999873	0.268285
Pd	Pd70	0.499293	0.252222	0.270437
Pd	Pd71	0.499943	0.500624	0.269614
Pd	Pd72	0.499619	0.749121	0.269299
Pd	Pd73	0.165506	0.124330	0.307657
Pd	Pd74	0.165443	0.374310	0.307695
Pd	Pd75	0.166166	0.624329	0.307868
Pd	Pd76	0.165370	0.874478	0.307610
Pd	Pd77	0.666239	0.124779	0.307999
Pd	Pd78	0.666954	0.375108	0.307586
Pd	Pd79	0.665928	0.625457	0.307809
Pd	Pd80	0.666229	0.875356	0.308171
Pd	Pd81	0.830928	0.749893	0.338461

Pd	Pd82	0.330562	0.998684	0.338158
Pd	Pd83	0.329786	0.248733	0.338267
Pd	Pd84	0.331140	0.499584	0.338077
Pd	Pd85	0.330918	0.748981	0.338269
Pd	Pd86	0.831092	0.999849	0.338659
Pd	Pd87	0.831037	0.249942	0.338461
Pd	Pd88	0.831090	0.500181	0.338095
Pd	Pd89	0.997959	0.124918	0.368422
Pd	Pd90	0.997777	0.374926	0.368479
Pd	Pd91	0.998043	0.624974	0.368391
Pd	Pd92	0.997889	0.874768	0.368436
Pd	Pd93	0.497600	0.122219	0.368314
Pd	Pd94	0.498504	0.370992	0.369526
Pd	Pd95	0.501062	0.625821	0.372516
Pd	Pd96	0.498226	0.874706	0.368269
C	C97	0.651194	0.590339	0.463834
C	C98	0.541803	0.610813	0.454622
O	O99	0.481665	0.660431	0.484990
O	O100	0.503826	0.425023	0.452257
H	H101	0.689555	0.677258	0.456196
H	H102	0.662313	0.561349	0.508131
H	H103	0.680283	0.521769	0.434399
H	H104	0.435185	0.432607	0.465532

Transition state of R130 CCOOH* + H* = CCO* + H₂O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447

Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165793	0.999652	0.202684
Pd	Pd50	0.165735	0.249460	0.202651
Pd	Pd51	0.166080	0.499747	0.202495
Pd	Pd52	0.165795	0.750004	0.202628
Pd	Pd53	0.666125	0.000600	0.203083
Pd	Pd54	0.665856	0.251521	0.204236
Pd	Pd55	0.665563	0.500026	0.203563
Pd	Pd56	0.665832	0.749506	0.203785
Pd	Pd57	0.330582	0.124207	0.235994
Pd	Pd58	0.330678	0.374196	0.236180
Pd	Pd59	0.330603	0.624823	0.235847
Pd	Pd60	0.330667	0.874883	0.236021
Pd	Pd61	0.830882	0.125331	0.236324
Pd	Pd62	0.830298	0.375243	0.236962
Pd	Pd63	0.831053	0.625055	0.236636
Pd	Pd64	0.830938	0.875076	0.236255
Pd	Pd65	0.999596	0.999914	0.268456
Pd	Pd66	0.999304	0.249657	0.268516
Pd	Pd67	0.998541	0.500009	0.269178
Pd	Pd68	0.999633	0.750296	0.268562
Pd	Pd69	0.499384	0.999905	0.268620
Pd	Pd70	0.499256	0.248882	0.268580
Pd	Pd71	0.497962	0.500053	0.268578
Pd	Pd72	0.498794	0.750259	0.268804
Pd	Pd73	0.164912	0.123148	0.307418
Pd	Pd74	0.165194	0.374049	0.306735
Pd	Pd75	0.165181	0.625426	0.306645
Pd	Pd76	0.165771	0.874833	0.307724
Pd	Pd77	0.666095	0.125469	0.308578
Pd	Pd78	0.663025	0.374588	0.313322
Pd	Pd79	0.664470	0.630942	0.309827
Pd	Pd80	0.666232	0.877224	0.308120

Pd	Pd81	0.833871	0.752834	0.338861
Pd	Pd82	0.330674	0.998767	0.338362
Pd	Pd83	0.327407	0.246817	0.338325
Pd	Pd84	0.327076	0.499931	0.338228
Pd	Pd85	0.330202	0.749527	0.338050
Pd	Pd86	0.831765	0.000631	0.338134
Pd	Pd87	0.833340	0.248263	0.339004
Pd	Pd88	0.838247	0.499963	0.341908
Pd	Pd89	0.999610	0.124178	0.368927
Pd	Pd90	0.002350	0.373437	0.369100
Pd	Pd91	0.002261	0.626797	0.369187
Pd	Pd92	0.999954	0.876345	0.368920
Pd	Pd93	0.497131	0.123867	0.368953
Pd	Pd94	0.488624	0.370806	0.368401
Pd	Pd95	0.492914	0.622728	0.369394
Pd	Pd96	0.497702	0.874337	0.368720
C	C97	0.699162	0.506998	0.367115
C	C98	0.683897	0.519312	0.427791
O	O99	0.646446	0.396520	0.452806
O	O100	0.698676	0.598339	0.462294
H	H101	0.618761	0.415977	0.490472
H	H102	0.582014	0.363480	0.421194

Transition state of R131 $\text{CHCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166269	0.999866	0.202782
Pd	Pd50	0.166151	0.249892	0.202858
Pd	Pd51	0.166117	0.499942	0.202804
Pd	Pd52	0.166123	0.750018	0.202836
Pd	Pd53	0.666012	0.000463	0.203065
Pd	Pd54	0.665443	0.250273	0.203463
Pd	Pd55	0.665833	0.499908	0.203171
Pd	Pd56	0.665558	0.750440	0.202996
Pd	Pd57	0.331670	0.124898	0.236187
Pd	Pd58	0.331496	0.374883	0.236205
Pd	Pd59	0.331409	0.624970	0.236161
Pd	Pd60	0.331731	0.874742	0.236228
Pd	Pd61	0.830925	0.125117	0.236345
Pd	Pd62	0.830317	0.374940	0.236304
Pd	Pd63	0.831178	0.625595	0.235904
Pd	Pd64	0.830962	0.875309	0.236326
Pd	Pd65	0.999565	0.000045	0.268441
Pd	Pd66	0.999323	0.250183	0.268451
Pd	Pd67	0.999686	0.500080	0.268472
Pd	Pd68	0.999573	0.750111	0.268506
Pd	Pd69	0.500219	0.000121	0.268845
Pd	Pd70	0.499817	0.251239	0.270068
Pd	Pd71	0.500451	0.499803	0.269295
Pd	Pd72	0.499666	0.748718	0.269981
Pd	Pd73	0.165426	0.124247	0.307326
Pd	Pd74	0.165418	0.374657	0.307491
Pd	Pd75	0.165691	0.625346	0.307561
Pd	Pd76	0.165790	0.875084	0.307496
Pd	Pd77	0.666538	0.125367	0.308489
Pd	Pd78	0.666273	0.376073	0.310922
Pd	Pd79	0.667393	0.626501	0.307461
Pd	Pd80	0.666618	0.875895	0.308230
Pd	Pd81	0.831612	0.750911	0.338668

Pd	Pd82	0.331328	0.999618	0.338337
Pd	Pd83	0.329668	0.249174	0.338319
Pd	Pd84	0.329548	0.500012	0.337709
Pd	Pd85	0.330884	0.749779	0.338415
Pd	Pd86	0.831619	0.000642	0.338641
Pd	Pd87	0.831911	0.250038	0.338720
Pd	Pd88	0.832679	0.501264	0.337943
Pd	Pd89	0.998663	0.125318	0.368508
Pd	Pd90	0.998223	0.375345	0.368616
Pd	Pd91	0.998576	0.625569	0.368672
Pd	Pd92	0.998499	0.875373	0.368468
Pd	Pd93	0.498014	0.125171	0.368975
Pd	Pd94	0.495630	0.372738	0.371389
Pd	Pd95	0.500465	0.626426	0.370577
Pd	Pd96	0.498519	0.874422	0.368886
C	C97	0.511641	0.498081	0.432628
C	C98	0.604419	0.510219	0.463543
O	O99	0.623346	0.561212	0.507925
O	O100	0.688691	0.446211	0.436125
H	H101	0.447320	0.508342	0.461113
H	H102	0.751911	0.482037	0.449256
H	H103	0.691352	0.430608	0.383064

Transition state of R132 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447

Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166086	0.999820	0.202950
Pd	Pd50	0.166167	0.249842	0.202937
Pd	Pd51	0.166174	0.499923	0.202767
Pd	Pd52	0.165954	0.749920	0.202921
Pd	Pd53	0.666070	0.999680	0.202940
Pd	Pd54	0.665988	0.249449	0.202552
Pd	Pd55	0.665568	0.500068	0.202626
Pd	Pd56	0.665739	0.750086	0.202961
Pd	Pd57	0.331343	0.124866	0.236247
Pd	Pd58	0.331059	0.375093	0.236136
Pd	Pd59	0.331275	0.624549	0.236219
Pd	Pd60	0.331330	0.874404	0.236321
Pd	Pd61	0.830926	0.124973	0.236299
Pd	Pd62	0.831540	0.375291	0.236266
Pd	Pd63	0.830730	0.624504	0.236656
Pd	Pd64	0.830897	0.874622	0.236390
Pd	Pd65	0.999280	0.999801	0.268379
Pd	Pd66	0.999649	0.249865	0.268498
Pd	Pd67	0.999180	0.499764	0.268670
Pd	Pd68	0.999325	0.749623	0.268512
Pd	Pd69	0.499730	0.999672	0.268243
Pd	Pd70	0.499427	0.250556	0.269051
Pd	Pd71	0.499516	0.498441	0.270100
Pd	Pd72	0.499318	0.748005	0.269428
Pd	Pd73	0.165287	0.124422	0.307682
Pd	Pd74	0.165670	0.374771	0.307757
Pd	Pd75	0.165516	0.624892	0.307740
Pd	Pd76	0.165496	0.874835	0.307688
Pd	Pd77	0.666172	0.124200	0.308175
Pd	Pd78	0.667310	0.373273	0.305362
Pd	Pd79	0.666513	0.625540	0.307250
Pd	Pd80	0.666161	0.875182	0.308148
Pd	Pd81	0.830756	0.749798	0.338865

Pd	Pd82	0.330529	0.999817	0.338302
Pd	Pd83	0.331020	0.250459	0.338048
Pd	Pd84	0.331017	0.499832	0.338285
Pd	Pd85	0.331015	0.749167	0.338409
Pd	Pd86	0.831098	0.999791	0.338620
Pd	Pd87	0.831017	0.249209	0.338723
Pd	Pd88	0.827719	0.499689	0.341237
Pd	Pd89	0.997663	0.124841	0.368463
Pd	Pd90	0.996826	0.375058	0.368280
Pd	Pd91	0.996902	0.624268	0.368424
Pd	Pd92	0.997845	0.874610	0.368312
Pd	Pd93	0.497894	0.122966	0.368044
Pd	Pd94	0.502759	0.374880	0.370508
Pd	Pd95	0.502010	0.627487	0.370642
Pd	Pd96	0.497710	0.875306	0.368211
C	C97	0.559235	0.581152	0.449848
C	C98	0.583800	0.452898	0.449168
O	O99	0.538635	0.361575	0.466757
O	O100	0.694673	0.432057	0.439162
H	H101	0.497009	0.600116	0.478574
H	H102	0.623336	0.641572	0.454703
H	H103	0.703111	0.343046	0.434529
H	H104	0.732065	0.468936	0.395859

Transition state of R133 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447

Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165949	0.999748	0.202872
Pd	Pd50	0.165976	0.249577	0.202844
Pd	Pd51	0.165924	0.499785	0.202797
Pd	Pd52	0.166028	0.749817	0.202866
Pd	Pd53	0.665989	0.999898	0.203014
Pd	Pd54	0.665286	0.249984	0.203135
Pd	Pd55	0.665772	0.500463	0.203246
Pd	Pd56	0.665583	0.750137	0.203201
Pd	Pd57	0.331282	0.124753	0.236213
Pd	Pd58	0.330952	0.374717	0.235937
Pd	Pd59	0.331239	0.624444	0.236166
Pd	Pd60	0.331292	0.874409	0.236213
Pd	Pd61	0.830588	0.125015	0.236318
Pd	Pd62	0.830955	0.374794	0.235987
Pd	Pd63	0.830433	0.625246	0.236336
Pd	Pd64	0.830748	0.874947	0.236453
Pd	Pd65	0.999084	0.999939	0.268394
Pd	Pd66	0.999254	0.249836	0.268436
Pd	Pd67	0.999619	0.499877	0.268423
Pd	Pd68	0.999276	0.749711	0.268452
Pd	Pd69	0.499705	0.999920	0.268192
Pd	Pd70	0.499052	0.251839	0.270399
Pd	Pd71	0.500175	0.499478	0.269024
Pd	Pd72	0.499811	0.748666	0.269404
Pd	Pd73	0.165257	0.124166	0.307696
Pd	Pd74	0.165514	0.374020	0.307540
Pd	Pd75	0.165833	0.624438	0.307584
Pd	Pd76	0.165175	0.874782	0.307508
Pd	Pd77	0.665989	0.124815	0.308224
Pd	Pd78	0.666399	0.374720	0.307524
Pd	Pd79	0.666452	0.625816	0.310637
Pd	Pd80	0.666219	0.875508	0.308443

Pd	Pd81	0.831887	0.750512	0.339046
Pd	Pd82	0.330297	0.998564	0.338330
Pd	Pd83	0.330413	0.248775	0.337971
Pd	Pd84	0.330771	0.498634	0.337810
Pd	Pd85	0.330119	0.748907	0.338330
Pd	Pd86	0.831003	0.000113	0.338694
Pd	Pd87	0.830863	0.250123	0.338660
Pd	Pd88	0.832572	0.499568	0.338141
Pd	Pd89	0.997709	0.124937	0.368437
Pd	Pd90	0.998362	0.374498	0.368535
Pd	Pd91	0.998544	0.625010	0.368462
Pd	Pd92	0.998294	0.875261	0.368473
Pd	Pd93	0.497449	0.121142	0.368471
Pd	Pd94	0.499305	0.369673	0.370868
Pd	Pd95	0.497512	0.623848	0.370901
Pd	Pd96	0.497422	0.874341	0.368215
C	C97	0.530056	0.653122	0.490786
C	C98	0.555503	0.556190	0.447368
O	O99	0.523545	0.447046	0.452991
O	O100	0.667695	0.562011	0.436396
H	H101	0.449090	0.660752	0.494569
H	H102	0.561970	0.741499	0.479017
H	H103	0.560970	0.625160	0.532199
H	H104	0.686891	0.476461	0.429083
H	H105	0.681951	0.602931	0.382825

Transition state of R134 CCHOOH* + * = CCHO* + OH* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165533	0.001042	0.202984
Pd	Pd50	0.166072	0.250594	0.202940
Pd	Pd51	0.166262	0.500486	0.202529
Pd	Pd52	0.165382	0.750683	0.202885
Pd	Pd53	0.665998	0.999450	0.202686
Pd	Pd54	0.666347	0.249438	0.203403
Pd	Pd55	0.665998	0.498883	0.202679
Pd	Pd56	0.665699	0.749879	0.202438
Pd	Pd57	0.330597	0.126311	0.236274
Pd	Pd58	0.330926	0.375916	0.236117
Pd	Pd59	0.331079	0.625534	0.235666
Pd	Pd60	0.329865	0.875990	0.235959
Pd	Pd61	0.830984	0.122815	0.236478
Pd	Pd62	0.832300	0.374289	0.236043
Pd	Pd63	0.831630	0.624671	0.236559
Pd	Pd64	0.830067	0.872121	0.238113
Pd	Pd65	0.998689	0.999082	0.268478
Pd	Pd66	0.000609	0.249231	0.268482
Pd	Pd67	0.000830	0.499320	0.268943
Pd	Pd68	0.997322	0.748916	0.269638
Pd	Pd69	0.498271	0.000812	0.267940
Pd	Pd70	0.499141	0.250396	0.268814
Pd	Pd71	0.498337	0.499610	0.269844
Pd	Pd72	0.497753	0.750397	0.268889
Pd	Pd73	0.166097	0.126422	0.308161
Pd	Pd74	0.167285	0.376040	0.307911
Pd	Pd75	0.166537	0.626066	0.306957
Pd	Pd76	0.163996	0.876570	0.307684
Pd	Pd77	0.666215	0.122025	0.308603
Pd	Pd78	0.667194	0.369656	0.306511

Pd	Pd79	0.661605	0.624354	0.305003
Pd	Pd80	0.664079	0.876368	0.307194
Pd	Pd81	0.825142	0.744509	0.348112
Pd	Pd82	0.329373	0.002056	0.338232
Pd	Pd83	0.332435	0.253676	0.338594
Pd	Pd84	0.332373	0.503019	0.338302
Pd	Pd85	0.329575	0.751962	0.337511
Pd	Pd86	0.830527	0.995332	0.339252
Pd	Pd87	0.833277	0.245912	0.337787
Pd	Pd88	0.834480	0.494168	0.340331
Pd	Pd89	0.998461	0.121111	0.368361
Pd	Pd90	0.001185	0.370939	0.369112
Pd	Pd91	0.002735	0.622415	0.369368
Pd	Pd92	0.996313	0.871749	0.369065
Pd	Pd93	0.497270	0.125403	0.368276
Pd	Pd94	0.495828	0.373145	0.372001
Pd	Pd95	0.494590	0.633222	0.372616
Pd	Pd96	0.496029	0.879674	0.368147
C	C97	0.740360	0.607325	0.374168
C	C98	0.683414	0.579424	0.428008
O	O99	0.602543	0.637760	0.437992
O	O100	0.641753	0.423569	0.409270
H	H101	0.729621	0.554022	0.465037
H	H102	0.679041	0.361028	0.429921

Transition state of R135 CHCHOOH* + * = CHCHO* + OH* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166023	0.999902	0.202857
Pd	Pd50	0.166072	0.250092	0.202884
Pd	Pd51	0.165323	0.499924	0.203008
Pd	Pd52	0.165984	0.750030	0.202838
Pd	Pd53	0.666129	0.999718	0.202315
Pd	Pd54	0.665591	0.250159	0.202982
Pd	Pd55	0.665429	0.498818	0.203386
Pd	Pd56	0.666019	0.749853	0.202371
Pd	Pd57	0.331087	0.125527	0.236129
Pd	Pd58	0.331593	0.375228	0.236181
Pd	Pd59	0.331167	0.624219	0.236059
Pd	Pd60	0.330965	0.874667	0.236259
Pd	Pd61	0.831354	0.125321	0.235923
Pd	Pd62	0.831109	0.375728	0.237056
Pd	Pd63	0.831439	0.624331	0.236868
Pd	Pd64	0.831157	0.874824	0.236016
Pd	Pd65	0.999745	0.000200	0.268423
Pd	Pd66	0.000051	0.250303	0.268451
Pd	Pd67	0.997841	0.500301	0.269826
Pd	Pd68	0.000084	0.750470	0.268455
Pd	Pd69	0.499266	0.999987	0.267805
Pd	Pd70	0.499950	0.250473	0.269845
Pd	Pd71	0.500489	0.499657	0.269981
Pd	Pd72	0.498829	0.749373	0.268800
Pd	Pd73	0.165556	0.124963	0.307505
Pd	Pd74	0.167442	0.375456	0.307608
Pd	Pd75	0.166624	0.625362	0.307440
Pd	Pd76	0.166201	0.875042	0.307802
Pd	Pd77	0.666492	0.121703	0.306266
Pd	Pd78	0.668710	0.374453	0.309412
Pd	Pd79	0.667230	0.628610	0.305474

Pd	Pd80	0.666580	0.875583	0.307588
Pd	Pd81	0.832597	0.752159	0.338271
Pd	Pd82	0.330001	0.000592	0.338265
Pd	Pd83	0.331483	0.250630	0.338299
Pd	Pd84	0.334424	0.499333	0.338288
Pd	Pd85	0.332077	0.749504	0.338034
Pd	Pd86	0.832270	0.000122	0.338161
Pd	Pd87	0.833637	0.248589	0.338453
Pd	Pd88	0.830466	0.502913	0.343007
Pd	Pd89	0.999462	0.124916	0.368648
Pd	Pd90	0.000650	0.375035	0.368466
Pd	Pd91	0.001230	0.626776	0.368750
Pd	Pd92	0.999487	0.875952	0.368608
Pd	Pd93	0.496778	0.121335	0.368238
Pd	Pd94	0.501278	0.369362	0.373811
Pd	Pd95	0.502239	0.634822	0.369043
Pd	Pd96	0.498196	0.878309	0.367946
C	C97	0.646362	0.346175	0.392555
C	C98	0.682013	0.440154	0.434535
O	O99	0.761168	0.502619	0.424283
O	O100	0.574364	0.533769	0.435162
H	H101	0.664226	0.253139	0.407351
H	H102	0.673995	0.411494	0.479552
H	H103	0.555912	0.551985	0.474411

Transition state of R136 $\text{CH}_2\text{CHOOH}^* + ^* = \text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165800	0.000170	0.202805
Pd	Pd50	0.166045	0.250603	0.202797
Pd	Pd51	0.166062	0.500153	0.202853
Pd	Pd52	0.165996	0.749799	0.202782
Pd	Pd53	0.665830	0.999875	0.202916
Pd	Pd54	0.665827	0.249972	0.202905
Pd	Pd55	0.665454	0.500044	0.203018
Pd	Pd56	0.665354	0.749754	0.203225
Pd	Pd57	0.330634	0.125405	0.235795
Pd	Pd58	0.330813	0.376446	0.237374
Pd	Pd59	0.330788	0.624076	0.237197
Pd	Pd60	0.330930	0.874815	0.235763
Pd	Pd61	0.830548	0.124988	0.236217
Pd	Pd62	0.830804	0.375030	0.235954
Pd	Pd63	0.830573	0.625124	0.235985
Pd	Pd64	0.830341	0.875022	0.236202
Pd	Pd65	0.998658	0.000077	0.268371
Pd	Pd66	0.998789	0.250197	0.268344
Pd	Pd67	0.998938	0.500173	0.268332
Pd	Pd68	0.998665	0.750043	0.268334
Pd	Pd69	0.499178	0.000135	0.268232
Pd	Pd70	0.499181	0.250284	0.268512
Pd	Pd71	0.499176	0.499646	0.270224
Pd	Pd72	0.498894	0.748985	0.269354
Pd	Pd73	0.164409	0.125468	0.307438
Pd	Pd74	0.164366	0.375278	0.307640
Pd	Pd75	0.164382	0.625428	0.307494
Pd	Pd76	0.164402	0.875306	0.307344
Pd	Pd77	0.665620	0.124669	0.307890
Pd	Pd78	0.666029	0.374753	0.307553
Pd	Pd79	0.665024	0.625199	0.308065

Pd	Pd80	0.665484	0.875357	0.308092
Pd	Pd81	0.829999	0.750008	0.338405
Pd	Pd82	0.329110	0.000368	0.337604
Pd	Pd83	0.328555	0.249009	0.337380
Pd	Pd84	0.327158	0.500723	0.342619
Pd	Pd85	0.328694	0.752280	0.337499
Pd	Pd86	0.830387	0.999980	0.338547
Pd	Pd87	0.830212	0.250066	0.338413
Pd	Pd88	0.830066	0.500247	0.338185
Pd	Pd89	0.997065	0.125142	0.368382
Pd	Pd90	0.996992	0.375143	0.368392
Pd	Pd91	0.996963	0.625099	0.368354
Pd	Pd92	0.997056	0.874952	0.368399
Pd	Pd93	0.496732	0.124618	0.368070
Pd	Pd94	0.496647	0.372595	0.367597
Pd	Pd95	0.496352	0.630577	0.369653
Pd	Pd96	0.496762	0.878068	0.367990
C	C97	0.298666	0.507397	0.428567
C	C98	0.385282	0.530395	0.465971
O	O99	0.454070	0.605443	0.455764
O	O100	0.457048	0.350047	0.450612
H	H101	0.258728	0.424181	0.440445
H	H102	0.248429	0.586809	0.431823
H	H103	0.377654	0.500889	0.510722
H	H104	0.518360	0.356379	0.472722

Transition state of R137 $\text{CH}_3\text{CHOOH}^* + ^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165922	0.999841	0.202921
Pd	Pd50	0.166039	0.249735	0.202870
Pd	Pd51	0.166103	0.499777	0.202813
Pd	Pd52	0.165917	0.749858	0.202881
Pd	Pd53	0.665905	0.000135	0.202873
Pd	Pd54	0.665508	0.249949	0.202976
Pd	Pd55	0.665367	0.499827	0.202855
Pd	Pd56	0.665901	0.750112	0.202715
Pd	Pd57	0.331373	0.124865	0.236172
Pd	Pd58	0.331160	0.374807	0.236202
Pd	Pd59	0.331088	0.624562	0.236231
Pd	Pd60	0.330878	0.874928	0.236129
Pd	Pd61	0.830871	0.124990	0.236255
Pd	Pd62	0.831238	0.374822	0.235925
Pd	Pd63	0.831246	0.624865	0.235832
Pd	Pd64	0.830976	0.875006	0.236190
Pd	Pd65	0.999422	0.999719	0.268434
Pd	Pd66	0.999562	0.249876	0.268459
Pd	Pd67	0.999758	0.499828	0.268426
Pd	Pd68	0.999490	0.749788	0.268454
Pd	Pd69	0.499586	0.999931	0.268459
Pd	Pd70	0.499258	0.251828	0.269712
Pd	Pd71	0.499429	0.500653	0.270494
Pd	Pd72	0.499392	0.749876	0.268539
Pd	Pd73	0.165487	0.124402	0.307605
Pd	Pd74	0.165991	0.374571	0.307763
Pd	Pd75	0.165623	0.624097	0.307780
Pd	Pd76	0.165554	0.874160	0.307784
Pd	Pd77	0.666301	0.124863	0.307937
Pd	Pd78	0.667228	0.374821	0.307150

Pd	Pd79	0.667483	0.625341	0.306890
Pd	Pd80	0.666418	0.875272	0.307612
Pd	Pd81	0.831071	0.750003	0.338382
Pd	Pd82	0.330122	0.999034	0.338304
Pd	Pd83	0.330299	0.248335	0.338288
Pd	Pd84	0.330982	0.498389	0.338176
Pd	Pd85	0.329638	0.749834	0.338114
Pd	Pd86	0.831112	0.000026	0.338614
Pd	Pd87	0.831286	0.249839	0.338527
Pd	Pd88	0.831360	0.499829	0.338176
Pd	Pd89	0.998034	0.124808	0.368391
Pd	Pd90	0.998212	0.374873	0.368392
Pd	Pd91	0.997854	0.624917	0.368474
Pd	Pd92	0.997875	0.874821	0.368363
Pd	Pd93	0.498028	0.121508	0.368133
Pd	Pd94	0.501136	0.368759	0.369836
Pd	Pd95	0.498045	0.626710	0.367377
Pd	Pd96	0.498275	0.875379	0.368479
C	C97	0.554337	0.468978	0.485198
C	C98	0.659810	0.491113	0.468932
O	O99	0.495355	0.401150	0.458817
O	O100	0.506919	0.659057	0.451984
H	H101	0.703470	0.411243	0.482570
H	H102	0.689330	0.572573	0.489758
H	H103	0.667818	0.499095	0.422437
H	H104	0.531177	0.496422	0.528438
H	H105	0.438917	0.670268	0.465625

Transition state of R138 CCOHOH* + H* = CCOH* + H₂O* on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166117	0.998484	0.202765
Pd	Pd50	0.165914	0.248672	0.202836
Pd	Pd51	0.165904	0.499142	0.202752
Pd	Pd52	0.166258	0.748950	0.202722
Pd	Pd53	0.666264	0.001697	0.203043
Pd	Pd54	0.665969	0.252022	0.204495
Pd	Pd55	0.665543	0.499967	0.202935
Pd	Pd56	0.665885	0.751652	0.202275
Pd	Pd57	0.330853	0.122763	0.236182
Pd	Pd58	0.330649	0.373403	0.236460
Pd	Pd59	0.331258	0.623261	0.236059
Pd	Pd60	0.331297	0.872666	0.236453
Pd	Pd61	0.830876	0.126063	0.236550
Pd	Pd62	0.829896	0.376238	0.237734
Pd	Pd63	0.832177	0.625552	0.236296
Pd	Pd64	0.831448	0.875849	0.236333
Pd	Pd65	0.999698	0.999960	0.268439
Pd	Pd66	0.998784	0.249725	0.268498
Pd	Pd67	0.997702	0.500075	0.269377
Pd	Pd68	0.000563	0.750279	0.268593
Pd	Pd69	0.499620	0.998860	0.268570
Pd	Pd70	0.499212	0.247917	0.268525
Pd	Pd71	0.498276	0.499294	0.269720
Pd	Pd72	0.499146	0.749025	0.269463
Pd	Pd73	0.164606	0.121082	0.307271
Pd	Pd74	0.164100	0.373252	0.306987
Pd	Pd75	0.166619	0.623945	0.307377
Pd	Pd76	0.166671	0.872404	0.307793

Pd	Pd77	0.666108	0.125949	0.308969
Pd	Pd78	0.661556	0.375525	0.314238
Pd	Pd79	0.666699	0.633804	0.304101
Pd	Pd80	0.667394	0.878783	0.307904
Pd	Pd81	0.834282	0.754519	0.339099
Pd	Pd82	0.331239	0.994799	0.338485
Pd	Pd83	0.325987	0.244423	0.338269
Pd	Pd84	0.328969	0.498618	0.338926
Pd	Pd85	0.335652	0.743580	0.338890
Pd	Pd86	0.832091	0.001910	0.338487
Pd	Pd87	0.832202	0.249767	0.339495
Pd	Pd88	0.832195	0.502536	0.344918
Pd	Pd89	0.999350	0.125806	0.368826
Pd	Pd90	0.999097	0.375318	0.368841
Pd	Pd91	0.000827	0.627069	0.368809
Pd	Pd92	0.000353	0.877256	0.368862
Pd	Pd93	0.496649	0.121286	0.368796
Pd	Pd94	0.486222	0.366155	0.369107
Pd	Pd95	0.506210	0.616740	0.375131
Pd	Pd96	0.500097	0.872149	0.368912
C	C97	0.690406	0.514899	0.365021
C	C98	0.636355	0.558813	0.415276
O	O99	0.678299	0.648301	0.448216
O	O100	0.612788	0.458684	0.457745
H	H101	0.719065	0.699564	0.422355
H	H102	0.675023	0.412834	0.464265
H	H103	0.559132	0.397555	0.429123

Transition state of R139 CHCOHOH* + H* = CHCOH* + H₂O* on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166107	0.000633	0.203044
Pd	Pd50	0.166335	0.250330	0.202986
Pd	Pd51	0.166193	0.500171	0.202995
Pd	Pd52	0.166251	0.750477	0.202901
Pd	Pd53	0.665733	0.999873	0.203119
Pd	Pd54	0.665629	0.250033	0.203218
Pd	Pd55	0.666115	0.500071	0.202939
Pd	Pd56	0.665298	0.749816	0.203468
Pd	Pd57	0.331402	0.125471	0.236178
Pd	Pd58	0.331252	0.375644	0.237071
Pd	Pd59	0.331326	0.624937	0.236478
Pd	Pd60	0.331489	0.875653	0.235890
Pd	Pd61	0.830534	0.124808	0.236282
Pd	Pd62	0.831071	0.374824	0.235932
Pd	Pd63	0.830725	0.625215	0.236016
Pd	Pd64	0.830364	0.875110	0.236341
Pd	Pd65	0.998990	0.000321	0.268453
Pd	Pd66	0.999063	0.249892	0.268413
Pd	Pd67	0.999131	0.500221	0.268466
Pd	Pd68	0.998646	0.750419	0.268410
Pd	Pd69	0.500045	0.999900	0.269008
Pd	Pd70	0.499557	0.250417	0.270055
Pd	Pd71	0.500655	0.500039	0.269483
Pd	Pd72	0.499650	0.749215	0.270184
Pd	Pd73	0.165773	0.125742	0.308103
Pd	Pd74	0.164129	0.374870	0.307559
Pd	Pd75	0.163999	0.627005	0.307256
Pd	Pd76	0.165262	0.876569	0.307785

Pd	Pd77	0.665973	0.124708	0.308412
Pd	Pd78	0.665838	0.374950	0.308125
Pd	Pd79	0.665169	0.624988	0.308720
Pd	Pd80	0.665873	0.875063	0.308718
Pd	Pd81	0.830475	0.749743	0.338527
Pd	Pd82	0.331310	0.001176	0.338410
Pd	Pd83	0.330290	0.249454	0.339834
Pd	Pd84	0.326305	0.502597	0.338981
Pd	Pd85	0.330196	0.752767	0.337493
Pd	Pd86	0.830821	0.000026	0.338745
Pd	Pd87	0.830785	0.250112	0.338415
Pd	Pd88	0.830719	0.499996	0.338119
Pd	Pd89	0.997925	0.125317	0.368548
Pd	Pd90	0.998054	0.375054	0.368738
Pd	Pd91	0.997710	0.624946	0.368734
Pd	Pd92	0.997533	0.874977	0.368470
Pd	Pd93	0.498161	0.125293	0.369356
Pd	Pd94	0.496762	0.373778	0.372301
Pd	Pd95	0.494807	0.624452	0.373010
Pd	Pd96	0.497335	0.874530	0.369184
C	C97	0.440088	0.496518	0.426696
C	C98	0.331145	0.499949	0.425439
O	O99	0.277780	0.588349	0.453668
O	O100	0.282606	0.384016	0.445282
H	H101	0.478529	0.501716	0.468172
H	H102	0.291310	0.666050	0.433951
H	H103	0.210448	0.395261	0.438135
H	H104	0.305821	0.313355	0.407811

Transition state of R140 $\text{CH}_2\text{COHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723

Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166220	0.999860	0.202968
Pd	Pd50	0.166271	0.249865	0.202909
Pd	Pd51	0.165871	0.499963	0.202818
Pd	Pd52	0.166087	0.750163	0.202914
Pd	Pd53	0.665991	0.000073	0.203147
Pd	Pd54	0.665703	0.249646	0.203060
Pd	Pd55	0.665926	0.499942	0.202824
Pd	Pd56	0.665537	0.750252	0.203121
Pd	Pd57	0.331612	0.124986	0.236438
Pd	Pd58	0.331174	0.375374	0.236350
Pd	Pd59	0.330980	0.624912	0.236209
Pd	Pd60	0.331710	0.874565	0.236535
Pd	Pd61	0.830736	0.124886	0.236473
Pd	Pd62	0.830871	0.375072	0.236402
Pd	Pd63	0.830861	0.624890	0.236463
Pd	Pd64	0.830880	0.874894	0.236458
Pd	Pd65	0.999232	0.999873	0.268402
Pd	Pd66	0.999670	0.249970	0.268460
Pd	Pd67	0.999201	0.499955	0.268640
Pd	Pd68	0.999493	0.749878	0.268473
Pd	Pd69	0.500098	0.999681	0.268542
Pd	Pd70	0.499581	0.250791	0.269550
Pd	Pd71	0.499705	0.500729	0.268714
Pd	Pd72	0.499580	0.748312	0.270167
Pd	Pd73	0.165497	0.124295	0.307566
Pd	Pd74	0.165879	0.374942	0.307579
Pd	Pd75	0.165728	0.625468	0.307546

Pd	Pd76	0.165741	0.875096	0.307752
Pd	Pd77	0.666195	0.124773	0.308952
Pd	Pd78	0.666746	0.375341	0.308209
Pd	Pd79	0.666217	0.625776	0.307643
Pd	Pd80	0.666396	0.875521	0.308500
Pd	Pd81	0.831123	0.749898	0.338669
Pd	Pd82	0.331084	0.999879	0.338683
Pd	Pd83	0.330397	0.250216	0.338547
Pd	Pd84	0.330412	0.500729	0.338761
Pd	Pd85	0.331840	0.748962	0.338567
Pd	Pd86	0.831141	0.000152	0.338889
Pd	Pd87	0.832141	0.249376	0.338778
Pd	Pd88	0.830603	0.499993	0.339851
Pd	Pd89	0.998466	0.124660	0.368471
Pd	Pd90	0.998330	0.374826	0.368425
Pd	Pd91	0.998058	0.625039	0.368462
Pd	Pd92	0.998020	0.874955	0.368378
Pd	Pd93	0.497692	0.125043	0.368930
Pd	Pd94	0.497788	0.375098	0.369762
Pd	Pd95	0.502091	0.623319	0.372082
Pd	Pd96	0.498191	0.875760	0.368727
C	C97	0.565123	0.548335	0.445492
C	C98	0.568891	0.415842	0.443461
O	O99	0.527031	0.354017	0.488195
O	O100	0.675688	0.372836	0.434928
H	H101	0.514931	0.582046	0.478685
H	H102	0.638034	0.593044	0.443983
H	H103	0.503362	0.274609	0.474490
H	H104	0.673042	0.283214	0.430489
H	H105	0.701652	0.396803	0.383984

Transition state of R141 $\text{CH}_3\text{COHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723

Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166119	0.000225	0.203023
Pd	Pd50	0.166172	0.250210	0.202957
Pd	Pd51	0.166358	0.500123	0.202902
Pd	Pd52	0.166081	0.750184	0.203047
Pd	Pd53	0.666036	0.999605	0.202965
Pd	Pd54	0.665764	0.249421	0.202662
Pd	Pd55	0.665697	0.500241	0.202626
Pd	Pd56	0.666112	0.749979	0.202904
Pd	Pd57	0.331321	0.125674	0.236351
Pd	Pd58	0.331312	0.375211	0.236321
Pd	Pd59	0.331189	0.624946	0.236464
Pd	Pd60	0.331060	0.875315	0.236321
Pd	Pd61	0.831040	0.124968	0.236304
Pd	Pd62	0.830780	0.375060	0.236701
Pd	Pd63	0.830773	0.624307	0.236846
Pd	Pd64	0.830883	0.874591	0.236421
Pd	Pd65	0.999514	0.999867	0.268449
Pd	Pd66	0.999738	0.249899	0.268499
Pd	Pd67	0.999007	0.499724	0.268647
Pd	Pd68	0.999211	0.749848	0.268461
Pd	Pd69	0.499548	0.000463	0.268589
Pd	Pd70	0.499652	0.250672	0.269517
Pd	Pd71	0.499681	0.499415	0.269316
Pd	Pd72	0.499514	0.750516	0.268292
Pd	Pd73	0.165803	0.125387	0.307870

Pd	Pd74	0.166280	0.375201	0.307959
Pd	Pd75	0.165133	0.625214	0.307775
Pd	Pd76	0.165514	0.875662	0.307996
Pd	Pd77	0.666365	0.123555	0.307823
Pd	Pd78	0.666100	0.373734	0.306025
Pd	Pd79	0.665585	0.626276	0.307570
Pd	Pd80	0.665752	0.874835	0.308444
Pd	Pd81	0.830416	0.749146	0.338858
Pd	Pd82	0.331090	0.001226	0.338347
Pd	Pd83	0.332518	0.251697	0.338686
Pd	Pd84	0.331748	0.499208	0.338781
Pd	Pd85	0.329899	0.750301	0.338434
Pd	Pd86	0.830953	0.999398	0.338552
Pd	Pd87	0.830711	0.248842	0.338959
Pd	Pd88	0.827402	0.498086	0.341787
Pd	Pd89	0.997752	0.124554	0.368381
Pd	Pd90	0.997138	0.374619	0.368254
Pd	Pd91	0.996506	0.623897	0.368253
Pd	Pd92	0.997437	0.874181	0.368331
Pd	Pd93	0.498402	0.124629	0.368952
Pd	Pd94	0.506460	0.376063	0.372576
Pd	Pd95	0.496828	0.626521	0.367991
Pd	Pd96	0.497408	0.874930	0.368569
C	C97	0.536296	0.402319	0.492950
C	C98	0.599995	0.379009	0.441076
O	O99	0.653661	0.274382	0.447093
O	O100	0.672266	0.482918	0.435132
H	H101	0.481173	0.329353	0.497397
H	H102	0.584069	0.403387	0.531036
H	H103	0.497508	0.489800	0.489437
H	H104	0.692257	0.257764	0.411748
H	H105	0.632879	0.552586	0.418622
H	H106	0.733521	0.470735	0.392034

Transition state of R142 C* + CO* = CCO* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723

Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165956	1.000000	0.202697
Pd	Pd50	0.165824	0.249898	0.202715
Pd	Pd51	0.165274	0.500008	0.202717
Pd	Pd52	0.165825	0.750116	0.202712
Pd	Pd53	0.666036	0.999999	0.202837
Pd	Pd54	0.665567	0.250041	0.203177
Pd	Pd55	0.665435	0.500001	0.202963
Pd	Pd56	0.665572	0.749951	0.203178
Pd	Pd57	0.330939	0.125118	0.236190
Pd	Pd58	0.330407	0.375235	0.236036
Pd	Pd59	0.330418	0.624776	0.236035
Pd	Pd60	0.330935	0.874886	0.236193
Pd	Pd61	0.830857	0.125152	0.236125
Pd	Pd62	0.830826	0.375635	0.237032
Pd	Pd63	0.830822	0.624357	0.237025
Pd	Pd64	0.830857	0.874846	0.236129
Pd	Pd65	0.999406	0.000001	0.268311
Pd	Pd66	0.999533	0.249748	0.268451
Pd	Pd67	0.996962	0.500001	0.269619
Pd	Pd68	0.999534	0.750277	0.268443
Pd	Pd69	0.499250	0.999992	0.268359
Pd	Pd70	0.498334	0.250453	0.269207

Pd	Pd71	0.497316	0.500010	0.269473
Pd	Pd72	0.498346	0.749549	0.269216
Pd	Pd73	0.165625	0.124289	0.307274
Pd	Pd74	0.165194	0.374696	0.307076
Pd	Pd75	0.165206	0.625324	0.307078
Pd	Pd76	0.165633	0.875715	0.307281
Pd	Pd77	0.666444	0.123385	0.308088
Pd	Pd78	0.664467	0.369772	0.308527
Pd	Pd79	0.664478	0.630244	0.308527
Pd	Pd80	0.666450	0.876603	0.308092
Pd	Pd81	0.833943	0.753194	0.338641
Pd	Pd82	0.330865	0.000002	0.338426
Pd	Pd83	0.330695	0.251011	0.338198
Pd	Pd84	0.328587	0.500011	0.338656
Pd	Pd85	0.330708	0.749002	0.338196
Pd	Pd86	0.832215	0.999996	0.338172
Pd	Pd87	0.833934	0.246803	0.338639
Pd	Pd88	0.829722	0.499986	0.346901
Pd	Pd89	0.000564	0.123975	0.368788
Pd	Pd90	0.999758	0.373836	0.368841
Pd	Pd91	0.999765	0.626184	0.368839
Pd	Pd92	0.000558	0.876036	0.368780
Pd	Pd93	0.498040	0.124301	0.368430
Pd	Pd94	0.496513	0.374458	0.373000
Pd	Pd95	0.496529	0.625537	0.373003
Pd	Pd96	0.498046	0.875703	0.368440
C	C97	0.689269	0.499995	0.361830
C	C98	0.577152	0.499998	0.417622
O	O99	0.598258	0.499940	0.466994

Transition state of R143 CH* + CO* = CHCO* + * on Pd(211)

data				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723

Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165840	1.000000	0.202700
Pd	Pd50	0.165878	0.249889	0.202640
Pd	Pd51	0.165893	0.500000	0.202599
Pd	Pd52	0.165875	0.750111	0.202638
Pd	Pd53	0.665938	0.000003	0.202929
Pd	Pd54	0.665482	0.251014	0.204022
Pd	Pd55	0.665365	0.499995	0.203726
Pd	Pd56	0.665480	0.748986	0.204023
Pd	Pd57	0.330745	0.125021	0.236121
Pd	Pd58	0.330989	0.375055	0.235959
Pd	Pd59	0.330988	0.624950	0.235959
Pd	Pd60	0.330744	0.874976	0.236123
Pd	Pd61	0.830693	0.125043	0.236185
Pd	Pd62	0.830785	0.375003	0.236564
Pd	Pd63	0.830791	0.624993	0.236564
Pd	Pd64	0.830692	0.874961	0.236183
Pd	Pd65	0.999078	0.000000	0.268330
Pd	Pd66	0.999629	0.249630	0.268411
Pd	Pd67	0.998683	0.499999	0.268889
Pd	Pd68	0.999635	0.750373	0.268416
Pd	Pd69	0.499380	0.999995	0.268295
Pd	Pd70	0.498794	0.249887	0.269048
Pd	Pd71	0.498438	0.499997	0.269454
Pd	Pd72	0.498798	0.750106	0.269051
Pd	Pd73	0.165297	0.124005	0.307357
Pd	Pd74	0.165487	0.374238	0.306778

Pd	Pd75	0.165484	0.625751	0.306779
Pd	Pd76	0.165296	0.875980	0.307357
Pd	Pd77	0.666383	0.124102	0.308280
Pd	Pd78	0.665621	0.372094	0.311412
Pd	Pd79	0.665629	0.627890	0.311401
Pd	Pd80	0.666380	0.875895	0.308276
Pd	Pd81	0.833962	0.752895	0.338674
Pd	Pd82	0.330703	0.999994	0.338298
Pd	Pd83	0.330172	0.250358	0.338087
Pd	Pd84	0.327836	0.500003	0.338052
Pd	Pd85	0.330174	0.749627	0.338092
Pd	Pd86	0.831987	1.000000	0.338346
Pd	Pd87	0.833957	0.247102	0.338680
Pd	Pd88	0.835569	0.499995	0.340805
Pd	Pd89	0.000170	0.123928	0.368897
Pd	Pd90	0.001264	0.373720	0.368663
Pd	Pd91	0.001263	0.626274	0.368664
Pd	Pd92	0.000167	0.876087	0.368898
Pd	Pd93	0.497799	0.123881	0.368515
Pd	Pd94	0.494695	0.372774	0.371667
Pd	Pd95	0.494714	0.627207	0.371668
Pd	Pd96	0.497793	0.876108	0.368519
C	C97	0.687497	0.500002	0.370129
C	C98	0.571047	0.499980	0.416162
O	O99	0.581780	0.499980	0.467007
H	H100	0.732863	0.500009	0.409953

Transition state of R144 $\text{CH}_2^* + \text{CO}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166110	0.000513	0.202824
Pd	Pd50	0.165961	0.250312	0.202790
Pd	Pd51	0.166108	0.500434	0.202794
Pd	Pd52	0.166111	0.750573	0.202831
Pd	Pd53	0.665776	0.000359	0.202995
Pd	Pd54	0.665415	0.250195	0.203077
Pd	Pd55	0.665497	0.500210	0.202994
Pd	Pd56	0.665451	0.750325	0.203070
Pd	Pd57	0.331549	0.126002	0.236226
Pd	Pd58	0.331627	0.375948	0.236063
Pd	Pd59	0.331370	0.625740	0.235988
Pd	Pd60	0.331659	0.875437	0.236144
Pd	Pd61	0.830417	0.125199	0.236378
Pd	Pd62	0.830541	0.374997	0.236103
Pd	Pd63	0.831779	0.625268	0.235479
Pd	Pd64	0.830681	0.875376	0.236188
Pd	Pd65	0.998904	0.000316	0.268372
Pd	Pd66	0.998838	0.250229	0.268363
Pd	Pd67	0.999503	0.500318	0.268467
Pd	Pd68	0.999403	0.750349	0.268400
Pd	Pd69	0.499628	0.000854	0.268690
Pd	Pd70	0.499489	0.252954	0.269674
Pd	Pd71	0.500334	0.503130	0.270519
Pd	Pd72	0.499975	0.749324	0.270683
Pd	Pd73	0.165007	0.125319	0.307375
Pd	Pd74	0.164780	0.375021	0.307290
Pd	Pd75	0.165812	0.625969	0.307529
Pd	Pd76	0.164873	0.876199	0.307390
Pd	Pd77	0.665891	0.125447	0.308296

Pd	Pd78	0.666520	0.375490	0.308205
Pd	Pd79	0.667777	0.626012	0.306740
Pd	Pd80	0.666214	0.876261	0.308219
Pd	Pd81	0.831173	0.750491	0.338227
Pd	Pd82	0.330141	0.001016	0.338243
Pd	Pd83	0.329441	0.250907	0.338247
Pd	Pd84	0.329994	0.501153	0.337306
Pd	Pd85	0.330288	0.751358	0.337833
Pd	Pd86	0.831111	0.000417	0.338709
Pd	Pd87	0.831000	0.250224	0.338639
Pd	Pd88	0.831024	0.500490	0.338115
Pd	Pd89	0.997985	0.125430	0.368432
Pd	Pd90	0.997668	0.375395	0.368509
Pd	Pd91	0.998202	0.625465	0.368322
Pd	Pd92	0.997865	0.875440	0.368493
Pd	Pd93	0.497263	0.127333	0.368656
Pd	Pd94	0.497889	0.372896	0.370015
Pd	Pd95	0.501261	0.629074	0.374222
Pd	Pd96	0.497330	0.880654	0.368835
C	C97	0.516211	0.486686	0.437334
C	C98	0.510346	0.661019	0.452095
O	O99	0.513004	0.708505	0.496624
H	H100	0.455397	0.468926	0.467360
H	H101	0.590766	0.473489	0.455312

Transition state of R145 $\text{CH}_3^* + \text{CO}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + ^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165929	0.000359	0.202986
Pd	Pd50	0.165939	0.250062	0.202944
Pd	Pd51	0.165777	0.500236	0.202817
Pd	Pd52	0.166025	0.750586	0.202898
Pd	Pd53	0.665735	0.000140	0.202980
Pd	Pd54	0.665220	0.249845	0.203153
Pd	Pd55	0.665467	0.499694	0.202972
Pd	Pd56	0.665232	0.750302	0.203007
Pd	Pd57	0.331396	0.125612	0.236244
Pd	Pd58	0.331263	0.375575	0.235981
Pd	Pd59	0.331081	0.625203	0.235690
Pd	Pd60	0.331386	0.875200	0.236193
Pd	Pd61	0.830269	0.125122	0.236339
Pd	Pd62	0.830470	0.374922	0.235983
Pd	Pd63	0.831433	0.625131	0.235522
Pd	Pd64	0.830473	0.875127	0.236220
Pd	Pd65	0.998662	0.000338	0.268394
Pd	Pd66	0.998754	0.250199	0.268378
Pd	Pd67	0.999256	0.500249	0.268467
Pd	Pd68	0.999290	0.750414	0.268443
Pd	Pd69	0.499715	0.000241	0.268485
Pd	Pd70	0.499622	0.251820	0.269889
Pd	Pd71	0.499648	0.500835	0.270039
Pd	Pd72	0.499200	0.748032	0.270702
Pd	Pd73	0.165068	0.125177	0.307750
Pd	Pd74	0.164835	0.374962	0.307327
Pd	Pd75	0.165459	0.626286	0.307385
Pd	Pd76	0.164999	0.876352	0.307750
Pd	Pd77	0.665583	0.125066	0.308467
Pd	Pd78	0.665650	0.375169	0.308323
Pd	Pd79	0.666788	0.625288	0.306143

Pd	Pd80	0.665911	0.875462	0.308200
Pd	Pd81	0.830648	0.750022	0.338257
Pd	Pd82	0.330644	0.000888	0.338330
Pd	Pd83	0.330356	0.251219	0.338066
Pd	Pd84	0.329523	0.501515	0.337013
Pd	Pd85	0.331290	0.750399	0.337791
Pd	Pd86	0.830529	0.000214	0.338688
Pd	Pd87	0.830355	0.250329	0.338473
Pd	Pd88	0.830618	0.500264	0.338071
Pd	Pd89	0.997287	0.125387	0.368432
Pd	Pd90	0.997340	0.375174	0.368421
Pd	Pd91	0.997805	0.625446	0.368390
Pd	Pd92	0.997238	0.875480	0.368479
Pd	Pd93	0.497421	0.126488	0.368806
Pd	Pd94	0.497223	0.376130	0.372691
Pd	Pd95	0.501028	0.628835	0.375361
Pd	Pd96	0.497443	0.877741	0.368632
C	C97	0.590735	0.594678	0.454975
C	C98	0.474438	0.501888	0.433815
O	O99	0.419248	0.484544	0.473019
H	H100	0.623930	0.509991	0.470460
H	H101	0.561791	0.651298	0.489375
H	H102	0.646389	0.640990	0.428137

Transition state of R146 C* + CO₂* = CCOO* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447

Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165614	0.999759	0.202826
Pd	Pd50	0.165824	0.249874	0.202546
Pd	Pd51	0.165823	0.500113	0.202550
Pd	Pd52	0.165627	0.750229	0.202826
Pd	Pd53	0.666034	0.999848	0.202731
Pd	Pd54	0.665940	0.250160	0.203283
Pd	Pd55	0.665941	0.499801	0.203290
Pd	Pd56	0.666053	0.750112	0.202739
Pd	Pd57	0.330478	0.124930	0.235881
Pd	Pd58	0.330970	0.374994	0.235665
Pd	Pd59	0.330490	0.625060	0.235878
Pd	Pd60	0.330372	0.874992	0.236068
Pd	Pd61	0.831008	0.125647	0.236991
Pd	Pd62	0.832295	0.374950	0.236319
Pd	Pd63	0.831029	0.624217	0.237040
Pd	Pd64	0.830985	0.874946	0.236328
Pd	Pd65	0.999777	0.999999	0.268620
Pd	Pd66	0.999915	0.250156	0.269418
Pd	Pd67	0.999865	0.499780	0.269443
Pd	Pd68	0.999771	0.749974	0.268609
Pd	Pd69	0.498798	0.999850	0.268098
Pd	Pd70	0.498763	0.250388	0.269107
Pd	Pd71	0.498769	0.499564	0.269114
Pd	Pd72	0.498809	0.750131	0.268101
Pd	Pd73	0.166660	0.124799	0.307459
Pd	Pd74	0.167744	0.374977	0.306811
Pd	Pd75	0.166656	0.625157	0.307467
Pd	Pd76	0.166330	0.874976	0.308037
Pd	Pd77	0.665310	0.121670	0.306970
Pd	Pd78	0.663742	0.374924	0.308384
Pd	Pd79	0.665305	0.628244	0.306968
Pd	Pd80	0.666250	0.874970	0.308158

Pd	Pd81	0.832143	0.750352	0.338709
Pd	Pd82	0.330825	0.999946	0.338315
Pd	Pd83	0.332014	0.250280	0.337839
Pd	Pd84	0.332019	0.499712	0.337825
Pd	Pd85	0.330832	0.750028	0.338307
Pd	Pd86	0.832147	0.999376	0.338696
Pd	Pd87	0.834186	0.246667	0.342607
Pd	Pd88	0.834075	0.502988	0.342749
Pd	Pd89	0.002011	0.122761	0.369497
Pd	Pd90	0.006088	0.374929	0.370077
Pd	Pd91	0.001960	0.627105	0.369479
Pd	Pd92	0.999538	0.874939	0.368655
Pd	Pd93	0.497853	0.123071	0.368138
Pd	Pd94	0.497319	0.374972	0.372333
Pd	Pd95	0.497857	0.626924	0.368145
Pd	Pd96	0.497988	0.875011	0.368188
C	C97	0.753557	0.374609	0.371780
C	C98	0.696206	0.372160	0.454967
O	O99	0.606591	0.374939	0.448305
O	O100	0.767216	0.368659	0.485309

Transition state of R147 $\text{CH}^* + \text{CO}_2^* = \text{CHCOO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447

Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166304	0.000704	0.203072
Pd	Pd50	0.165880	0.250205	0.202907
Pd	Pd51	0.165804	0.500185	0.202836
Pd	Pd52	0.166204	0.750379	0.202929
Pd	Pd53	0.665632	0.999467	0.202979
Pd	Pd54	0.665382	0.249516	0.202748
Pd	Pd55	0.665512	0.499878	0.202763
Pd	Pd56	0.664861	0.749796	0.203372
Pd	Pd57	0.330829	0.126734	0.237449
Pd	Pd58	0.330578	0.375009	0.236647
Pd	Pd59	0.330601	0.624410	0.236758
Pd	Pd60	0.331380	0.875236	0.236156
Pd	Pd61	0.830230	0.124686	0.236131
Pd	Pd62	0.830822	0.374806	0.235725
Pd	Pd63	0.830063	0.625111	0.235909
Pd	Pd64	0.830250	0.874880	0.236206
Pd	Pd65	0.998815	0.000049	0.268284
Pd	Pd66	0.998325	0.249722	0.268259
Pd	Pd67	0.998092	0.500354	0.268196
Pd	Pd68	0.998465	0.750519	0.268225
Pd	Pd69	0.499439	0.999266	0.268516
Pd	Pd70	0.499122	0.249302	0.269377
Pd	Pd71	0.499429	0.499550	0.268888
Pd	Pd72	0.498933	0.747841	0.270782
Pd	Pd73	0.164993	0.126271	0.308142
Pd	Pd74	0.162869	0.375444	0.306758
Pd	Pd75	0.163532	0.626171	0.307387
Pd	Pd76	0.165075	0.876553	0.307661
Pd	Pd77	0.665737	0.123934	0.307803
Pd	Pd78	0.665513	0.373636	0.306782
Pd	Pd79	0.664687	0.624179	0.308053
Pd	Pd80	0.665839	0.874700	0.308323
Pd	Pd81	0.829913	0.749365	0.338344
Pd	Pd82	0.330543	0.001672	0.338282
Pd	Pd83	0.330983	0.251319	0.342185

Pd	Pd84	0.328280	0.502150	0.339832
Pd	Pd85	0.328634	0.751165	0.338022
Pd	Pd86	0.830474	0.999676	0.338530
Pd	Pd87	0.829751	0.249700	0.338287
Pd	Pd88	0.829254	0.499396	0.337899
Pd	Pd89	0.996922	0.125076	0.368280
Pd	Pd90	0.996316	0.374928	0.368187
Pd	Pd91	0.996364	0.624776	0.368322
Pd	Pd92	0.997110	0.874771	0.368258
Pd	Pd93	0.499673	0.120946	0.369305
Pd	Pd94	0.505505	0.371027	0.370943
Pd	Pd95	0.496063	0.628069	0.370932
Pd	Pd96	0.497386	0.876164	0.368666
C	C97	0.360255	0.385597	0.400722
C	C98	0.443400	0.442065	0.455808
O	O99	0.449823	0.370871	0.495520
O	O100	0.463589	0.555994	0.451879
H	H101	0.300256	0.359258	0.430566

Transition state of R148 $\text{CH}_2^* + \text{CO}_2^* = \text{CH}_2\text{COO}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170

Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166089	0.000666	0.203078
Pd	Pd50	0.165663	0.250044	0.202775
Pd	Pd51	0.165614	0.500480	0.202744
Pd	Pd52	0.166077	0.750526	0.202964
Pd	Pd53	0.665725	0.999683	0.203018
Pd	Pd54	0.665389	0.249697	0.202903
Pd	Pd55	0.665546	0.499805	0.202799
Pd	Pd56	0.664986	0.749932	0.203265
Pd	Pd57	0.330859	0.126897	0.237122
Pd	Pd58	0.330376	0.374952	0.236337
Pd	Pd59	0.330643	0.624185	0.236703
Pd	Pd60	0.330943	0.875361	0.236085
Pd	Pd61	0.830267	0.124864	0.236181
Pd	Pd62	0.830863	0.374893	0.235712
Pd	Pd63	0.830152	0.625162	0.235927
Pd	Pd64	0.830303	0.874999	0.236233
Pd	Pd65	0.998699	0.000062	0.268337
Pd	Pd66	0.998283	0.249906	0.268306
Pd	Pd67	0.998010	0.500487	0.268278
Pd	Pd68	0.998408	0.750446	0.268284
Pd	Pd69	0.499121	0.999710	0.268358
Pd	Pd70	0.499076	0.250229	0.269353
Pd	Pd71	0.499393	0.499948	0.268883
Pd	Pd72	0.498708	0.748202	0.270479
Pd	Pd73	0.164283	0.125730	0.308025
Pd	Pd74	0.162405	0.375740	0.306636
Pd	Pd75	0.163349	0.626843	0.307543
Pd	Pd76	0.164536	0.876388	0.307854
Pd	Pd77	0.665521	0.124470	0.307880
Pd	Pd78	0.664866	0.374220	0.307242
Pd	Pd79	0.665229	0.624707	0.307745
Pd	Pd80	0.665382	0.874953	0.308200
Pd	Pd81	0.829808	0.749801	0.338360
Pd	Pd82	0.330018	0.001439	0.338131
Pd	Pd83	0.328286	0.250927	0.340128
Pd	Pd84	0.327676	0.502338	0.337604
Pd	Pd85	0.328968	0.752366	0.337930

Pd	Pd86	0.830089	0.999876	0.338494
Pd	Pd87	0.829294	0.250041	0.338323
Pd	Pd88	0.829009	0.499554	0.337996
Pd	Pd89	0.996356	0.125278	0.368425
Pd	Pd90	0.995880	0.375097	0.368242
Pd	Pd91	0.995966	0.624862	0.368364
Pd	Pd92	0.996640	0.874978	0.368357
Pd	Pd93	0.498433	0.123753	0.368527
Pd	Pd94	0.501246	0.374243	0.370498
Pd	Pd95	0.498136	0.629873	0.370216
Pd	Pd96	0.497249	0.877789	0.368678
C	C97	0.363300	0.385721	0.411583
C	C98	0.464819	0.446195	0.460352
O	O99	0.481394	0.375151	0.498957
O	O100	0.479026	0.560221	0.453573
H	H101	0.337449	0.302695	0.433869
H	H102	0.313270	0.462608	0.424220

Transition state of R149 $\text{CH}_3^* + \text{CO}_2^* = \text{CH}_3\text{COO}^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170

Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165963	0.999728	0.202879
Pd	Pd50	0.165958	0.249914	0.202907
Pd	Pd51	0.165928	0.499948	0.202887
Pd	Pd52	0.166078	0.749784	0.202890
Pd	Pd53	0.665918	0.000126	0.202795
Pd	Pd54	0.665434	0.249913	0.202942
Pd	Pd55	0.665615	0.499996	0.202666
Pd	Pd56	0.665726	0.750272	0.202743
Pd	Pd57	0.331155	0.125052	0.236180
Pd	Pd58	0.331132	0.375116	0.236192
Pd	Pd59	0.331346	0.624336	0.236185
Pd	Pd60	0.331345	0.874541	0.236281
Pd	Pd61	0.830766	0.125259	0.236277
Pd	Pd62	0.831326	0.375131	0.235790
Pd	Pd63	0.831348	0.624944	0.236063
Pd	Pd64	0.830825	0.875030	0.236201
Pd	Pd65	0.999221	0.000045	0.268370
Pd	Pd66	0.999413	0.250236	0.268492
Pd	Pd67	0.999581	0.499966	0.268593
Pd	Pd68	0.999792	0.749855	0.268450
Pd	Pd69	0.499475	0.000123	0.268031
Pd	Pd70	0.499086	0.251791	0.269882
Pd	Pd71	0.500057	0.498749	0.270146
Pd	Pd72	0.498954	0.748331	0.269456
Pd	Pd73	0.165119	0.124470	0.307502
Pd	Pd74	0.166259	0.375134	0.307877
Pd	Pd75	0.166493	0.624469	0.307890
Pd	Pd76	0.165963	0.874447	0.307614
Pd	Pd77	0.666272	0.124610	0.307787
Pd	Pd78	0.667124	0.374892	0.306705
Pd	Pd79	0.667318	0.626034	0.306317
Pd	Pd80	0.666234	0.875650	0.307858
Pd	Pd81	0.831599	0.750629	0.338325
Pd	Pd82	0.330006	0.999973	0.338313
Pd	Pd83	0.330149	0.249608	0.337961
Pd	Pd84	0.332905	0.499813	0.338299
Pd	Pd85	0.331706	0.749439	0.338232
Pd	Pd86	0.831314	0.000306	0.338481

Pd	Pd87	0.830916	0.250407	0.338510
Pd	Pd88	0.830868	0.500394	0.338683
Pd	Pd89	0.998001	0.125300	0.368434
Pd	Pd90	0.998369	0.375205	0.368445
Pd	Pd91	0.998575	0.625428	0.368469
Pd	Pd92	0.998585	0.875465	0.368336
Pd	Pd93	0.497910	0.122746	0.367822
Pd	Pd94	0.502293	0.369964	0.372669
Pd	Pd95	0.501572	0.632311	0.369658
Pd	Pd96	0.498201	0.878229	0.368257
C	C97	0.479389	0.358529	0.466599
C	C98	0.593411	0.448788	0.440257
O	O99	0.669948	0.390442	0.447664
O	O100	0.576335	0.563987	0.440820
H	H101	0.400512	0.370064	0.454911
H	H102	0.500221	0.263954	0.475054
H	H103	0.491006	0.413523	0.504999

Transition state of R150 C* + HCO* = CCHO* + * on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170

Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165838	0.999337	0.202960
Pd	Pd50	0.165488	0.249530	0.202861
Pd	Pd51	0.165707	0.499819	0.202677
Pd	Pd52	0.166037	0.749846	0.202909
Pd	Pd53	0.666251	0.000576	0.202662
Pd	Pd54	0.665915	0.249662	0.202358
Pd	Pd55	0.666098	0.501168	0.202142
Pd	Pd56	0.666065	0.751583	0.202397
Pd	Pd57	0.330298	0.124588	0.236215
Pd	Pd58	0.330971	0.374870	0.235988
Pd	Pd59	0.330726	0.624281	0.236003
Pd	Pd60	0.330994	0.874050	0.236499
Pd	Pd61	0.830731	0.127572	0.238057
Pd	Pd62	0.832326	0.375785	0.236491
Pd	Pd63	0.831673	0.625280	0.236812
Pd	Pd64	0.831372	0.876336	0.236409
Pd	Pd65	0.999427	0.000692	0.268506
Pd	Pd66	0.998197	0.251133	0.269709
Pd	Pd67	0.999561	0.500752	0.269476
Pd	Pd68	0.000594	0.750716	0.268633
Pd	Pd69	0.498980	0.999013	0.267975
Pd	Pd70	0.498086	0.248759	0.268764
Pd	Pd71	0.498402	0.501202	0.269384
Pd	Pd72	0.498995	0.748685	0.269443
Pd	Pd73	0.165406	0.123928	0.307609
Pd	Pd74	0.167730	0.374564	0.307046
Pd	Pd75	0.167430	0.624906	0.307735
Pd	Pd76	0.167347	0.874167	0.308159
Pd	Pd77	0.665146	0.122094	0.307168
Pd	Pd78	0.662939	0.376280	0.303303
Pd	Pd79	0.666701	0.631122	0.304912
Pd	Pd80	0.667136	0.876881	0.308188
Pd	Pd81	0.832971	0.752727	0.338475
Pd	Pd82	0.331351	0.999310	0.338606
Pd	Pd83	0.332770	0.250553	0.338344
Pd	Pd84	0.333760	0.498686	0.338431
Pd	Pd85	0.334782	0.746163	0.338740
Pd	Pd86	0.831862	0.002830	0.339156

Pd	Pd87	0.826065	0.253946	0.346951
Pd	Pd88	0.831496	0.505201	0.343269
Pd	Pd89	0.998194	0.127056	0.368992
Pd	Pd90	0.003817	0.377024	0.369514
Pd	Pd91	0.001292	0.628154	0.369231
Pd	Pd92	0.999753	0.877738	0.368365
Pd	Pd93	0.498719	0.122746	0.368560
Pd	Pd94	0.505050	0.371065	0.372238
Pd	Pd95	0.506255	0.625444	0.372919
Pd	Pd96	0.499278	0.875608	0.368226
C	C97	0.740214	0.386290	0.371936
C	C98	0.616073	0.426400	0.423213
O	O99	0.610964	0.538437	0.433056
H	H100	0.632090	0.359362	0.457111

Transition state of R151 CH* + HCO* = CHCHO* + * on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170

Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166469	0.000967	0.203064
Pd	Pd50	0.165971	0.250443	0.202955
Pd	Pd51	0.165899	0.500251	0.202945
Pd	Pd52	0.166438	0.750461	0.202957
Pd	Pd53	0.665752	0.999739	0.202922
Pd	Pd54	0.665369	0.249631	0.202852
Pd	Pd55	0.665467	0.499808	0.202887
Pd	Pd56	0.665069	0.749785	0.203250
Pd	Pd57	0.331097	0.127319	0.237681
Pd	Pd58	0.330931	0.375176	0.236739
Pd	Pd59	0.330850	0.624434	0.236914
Pd	Pd60	0.331605	0.875736	0.236300
Pd	Pd61	0.830426	0.124760	0.236141
Pd	Pd62	0.830690	0.374883	0.235884
Pd	Pd63	0.830323	0.625139	0.235883
Pd	Pd64	0.830323	0.874971	0.236207
Pd	Pd65	0.998896	0.000114	0.268196
Pd	Pd66	0.998506	0.249933	0.268265
Pd	Pd67	0.998249	0.500486	0.268200
Pd	Pd68	0.998648	0.750594	0.268151
Pd	Pd69	0.499720	0.999938	0.268423
Pd	Pd70	0.499521	0.250504	0.269882
Pd	Pd71	0.499836	0.500041	0.269089
Pd	Pd72	0.499116	0.748474	0.270508
Pd	Pd73	0.165074	0.126358	0.307997
Pd	Pd74	0.163036	0.375718	0.307023
Pd	Pd75	0.163774	0.626647	0.307470
Pd	Pd76	0.165387	0.876715	0.307633
Pd	Pd77	0.666188	0.124227	0.307828
Pd	Pd78	0.665686	0.374135	0.307377
Pd	Pd79	0.665640	0.624582	0.307843
Pd	Pd80	0.666215	0.874958	0.308212
Pd	Pd81	0.830347	0.749620	0.338361
Pd	Pd82	0.330777	0.002116	0.338513
Pd	Pd83	0.330972	0.251358	0.342481
Pd	Pd84	0.328824	0.503146	0.339662
Pd	Pd85	0.329591	0.751490	0.338213
Pd	Pd86	0.830728	0.999878	0.338615
Pd	Pd87	0.830053	0.249907	0.338351
Pd	Pd88	0.829721	0.499621	0.338054
Pd	Pd89	0.997271	0.125184	0.368263

Pd	Pd90	0.996437	0.375166	0.368264
Pd	Pd91	0.996759	0.625040	0.368330
Pd	Pd92	0.997523	0.874949	0.368135
Pd	Pd93	0.499815	0.122265	0.369160
Pd	Pd94	0.509538	0.373964	0.373123
Pd	Pd95	0.499178	0.630462	0.371137
Pd	Pd96	0.498024	0.877483	0.368561
C	C97	0.361984	0.383161	0.398845
C	C98	0.463560	0.440090	0.448551
O	O99	0.470142	0.552687	0.455515
H	H100	0.467009	0.379281	0.486116
H	H101	0.312895	0.370885	0.436206

Transition state of R152 $\text{CH}_2^* + \text{HCO}^* = \text{CH}_2\text{CHO}^* + *$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170

Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166470	0.001329	0.203101
Pd	Pd50	0.166022	0.250188	0.202885
Pd	Pd51	0.165686	0.500344	0.202720
Pd	Pd52	0.166179	0.751046	0.202883
Pd	Pd53	0.665948	0.999710	0.202913
Pd	Pd54	0.665469	0.249821	0.203011
Pd	Pd55	0.665604	0.499819	0.203025
Pd	Pd56	0.665223	0.749740	0.203328
Pd	Pd57	0.331314	0.127833	0.238156
Pd	Pd58	0.331113	0.375004	0.236255
Pd	Pd59	0.331101	0.625177	0.235672
Pd	Pd60	0.331510	0.876216	0.236155
Pd	Pd61	0.830741	0.124907	0.236233
Pd	Pd62	0.830943	0.374905	0.235913
Pd	Pd63	0.830504	0.625238	0.235967
Pd	Pd64	0.830578	0.874999	0.236296
Pd	Pd65	0.999156	0.000268	0.268284
Pd	Pd66	0.999145	0.250139	0.268361
Pd	Pd67	0.998440	0.500466	0.268261
Pd	Pd68	0.998839	0.750524	0.268309
Pd	Pd69	0.499746	0.999789	0.268295
Pd	Pd70	0.499629	0.251253	0.269953
Pd	Pd71	0.500496	0.500131	0.269104
Pd	Pd72	0.499388	0.748314	0.270378
Pd	Pd73	0.165372	0.126259	0.308356
Pd	Pd74	0.164040	0.376128	0.306976
Pd	Pd75	0.164137	0.627091	0.307162
Pd	Pd76	0.165239	0.877025	0.307697
Pd	Pd77	0.666421	0.124403	0.307838
Pd	Pd78	0.665238	0.374737	0.307867
Pd	Pd79	0.666083	0.624730	0.308088
Pd	Pd80	0.666339	0.875045	0.308253
Pd	Pd81	0.830679	0.749698	0.338505
Pd	Pd82	0.330629	0.001208	0.338787
Pd	Pd83	0.329695	0.252935	0.342217
Pd	Pd84	0.329837	0.504252	0.335597
Pd	Pd85	0.329861	0.752038	0.337592
Pd	Pd86	0.830964	0.999986	0.338681
Pd	Pd87	0.830319	0.250176	0.338333
Pd	Pd88	0.829994	0.499602	0.338165
Pd	Pd89	0.997413	0.125302	0.368352
Pd	Pd90	0.997137	0.375313	0.368275
Pd	Pd91	0.997247	0.625015	0.368383

Pd	Pd92	0.997612	0.875065	0.368317
Pd	Pd93	0.499315	0.122678	0.368330
Pd	Pd94	0.505554	0.373645	0.372984
Pd	Pd95	0.498854	0.629938	0.370931
Pd	Pd96	0.498125	0.877522	0.368573
C	C97	0.366908	0.353628	0.414407
C	C98	0.483140	0.440455	0.450585
O	O99	0.479110	0.553505	0.455938
H	H100	0.501991	0.384040	0.488131
H	H101	0.359663	0.282539	0.447215
H	H102	0.316655	0.431226	0.423976

Transition state of R153 $\text{CH}_3^* + \text{HCO}^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + ^*$ on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170

Pd	Pd33	0.333333	0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165786	0.999876	0.202858
Pd	Pd50	0.166009	0.250038	0.202887
Pd	Pd51	0.165914	0.500156	0.202857
Pd	Pd52	0.165933	0.750031	0.202894
Pd	Pd53	0.665772	0.000265	0.202850
Pd	Pd54	0.665108	0.250067	0.203226
Pd	Pd55	0.665253	0.499792	0.203004
Pd	Pd56	0.665481	0.750330	0.202814
Pd	Pd57	0.331252	0.125176	0.236022
Pd	Pd58	0.331381	0.375430	0.235910
Pd	Pd59	0.331187	0.624714	0.236029
Pd	Pd60	0.330999	0.874966	0.236283
Pd	Pd61	0.830424	0.125196	0.236281
Pd	Pd62	0.830970	0.375101	0.235721
Pd	Pd63	0.831091	0.625139	0.235871
Pd	Pd64	0.830423	0.875117	0.236282
Pd	Pd65	0.998621	0.999952	0.268311
Pd	Pd66	0.999156	0.250294	0.268420
Pd	Pd67	0.999368	0.500066	0.268471
Pd	Pd68	0.999232	0.749901	0.268384
Pd	Pd69	0.499325	0.000332	0.268111
Pd	Pd70	0.499451	0.252048	0.270360
Pd	Pd71	0.500166	0.498853	0.270678
Pd	Pd72	0.498635	0.748415	0.269439
Pd	Pd73	0.164243	0.124356	0.307301
Pd	Pd74	0.165784	0.375365	0.307673
Pd	Pd75	0.165562	0.625066	0.307778
Pd	Pd76	0.165032	0.874801	0.307648
Pd	Pd77	0.665966	0.124914	0.308223
Pd	Pd78	0.665928	0.375330	0.307611
Pd	Pd79	0.667258	0.625807	0.306544
Pd	Pd80	0.665781	0.875663	0.307926
Pd	Pd81	0.830969	0.750502	0.338402
Pd	Pd82	0.329241	0.000406	0.338256
Pd	Pd83	0.329973	0.249888	0.337007
Pd	Pd84	0.332043	0.500621	0.337423
Pd	Pd85	0.330459	0.750285	0.338207
Pd	Pd86	0.830705	0.000390	0.338650
Pd	Pd87	0.830470	0.250554	0.338361
Pd	Pd88	0.830644	0.500129	0.338138
Pd	Pd89	0.997257	0.125345	0.368402
Pd	Pd90	0.997702	0.375176	0.368342
Pd	Pd91	0.997715	0.625289	0.368419
Pd	Pd92	0.997695	0.875396	0.368320

Pd	Pd93	0.497161	0.121535	0.368102
Pd	Pd94	0.500393	0.370006	0.374711
Pd	Pd95	0.501627	0.634334	0.369671
Pd	Pd96	0.497356	0.878090	0.368196
C	C97	0.444251	0.357744	0.462927
C	C98	0.569691	0.448240	0.439050
O	O99	0.564878	0.560266	0.447228
H	H100	0.632508	0.395938	0.457199
H	H101	0.383922	0.424443	0.464308
H	H102	0.417206	0.264075	0.456996
H	H103	0.486396	0.359347	0.502951

Transition state of R154 $O^* + H^* = OH^* + *$ on Pd(211)

data_

_cell_length_a 13.456032
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 23.511980
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170

Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165991	0.000005	0.202902
Pd	Pd50	0.165896	0.249957	0.202866
Pd	Pd51	0.165651	0.499998	0.202915
Pd	Pd52	0.165896	0.750042	0.202869
Pd	Pd53	0.665820	0.000001	0.202973
Pd	Pd54	0.665517	0.250152	0.202900
Pd	Pd55	0.665313	0.499996	0.203228
Pd	Pd56	0.665518	0.749842	0.202908
Pd	Pd57	0.331087	0.125329	0.236397
Pd	Pd58	0.330842	0.375184	0.236253
Pd	Pd59	0.330838	0.624815	0.236255
Pd	Pd60	0.331089	0.874672	0.236394
Pd	Pd61	0.830578	0.125180	0.236201
Pd	Pd62	0.830448	0.375278	0.236650
Pd	Pd63	0.830438	0.624723	0.236654
Pd	Pd64	0.830584	0.874822	0.236200
Pd	Pd65	0.999010	0.999998	0.268282
Pd	Pd66	0.999264	0.249994	0.268382
Pd	Pd67	0.998757	0.500007	0.268645
Pd	Pd68	0.999266	0.750007	0.268382
Pd	Pd69	0.499668	0.999995	0.268581
Pd	Pd70	0.499471	0.250300	0.269043
Pd	Pd71	0.498485	0.500004	0.269600
Pd	Pd72	0.499466	0.749697	0.269043
Pd	Pd73	0.166025	0.124637	0.307451
Pd	Pd74	0.165638	0.374383	0.307559
Pd	Pd75	0.165641	0.625615	0.307562
Pd	Pd76	0.166030	0.875371	0.307446
Pd	Pd77	0.666514	0.124434	0.308052
Pd	Pd78	0.666398	0.373508	0.308170
Pd	Pd79	0.666395	0.626482	0.308176
Pd	Pd80	0.666511	0.875565	0.308048
Pd	Pd81	0.831995	0.750804	0.338714
Pd	Pd82	0.331409	0.000005	0.338464
Pd	Pd83	0.332447	0.251341	0.338581
Pd	Pd84	0.329107	0.499996	0.338465
Pd	Pd85	0.332448	0.748664	0.338581
Pd	Pd86	0.831724	0.999995	0.338392
Pd	Pd87	0.831995	0.249193	0.338714
Pd	Pd88	0.830824	0.499996	0.340195
Pd	Pd89	0.999184	0.124777	0.368327
Pd	Pd90	0.998323	0.374818	0.368362
Pd	Pd91	0.998323	0.625197	0.368368
Pd	Pd92	0.999193	0.875215	0.368327

Pd	Pd93	0.498723	0.124015	0.368785
Pd	Pd94	0.497769	0.369286	0.372013
Pd	Pd95	0.497776	0.630707	0.372017
Pd	Pd96	0.498725	0.875983	0.368786
O	O97	0.573417	0.499997	0.408692
H	H98	0.658090	0.499998	0.360396

Transition state of R155 OH* + H* = H₂O* + * on Pd(211)

data

_cell_length_a	13.456032
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	23.511980
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894

Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617
Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.166147	1.000000	0.203118
Pd	Pd50	0.166073	0.249913	0.203064
Pd	Pd51	0.165786	0.499999	0.203023
Pd	Pd52	0.166073	0.750083	0.203065
Pd	Pd53	0.666023	0.999995	0.202808
Pd	Pd54	0.666148	0.249483	0.202465
Pd	Pd55	0.665566	0.499997	0.202563
Pd	Pd56	0.666152	0.750509	0.202466
Pd	Pd57	0.331177	0.125300	0.236379
Pd	Pd58	0.330889	0.375362	0.236239
Pd	Pd59	0.330888	0.624646	0.236236
Pd	Pd60	0.331174	0.874718	0.236382
Pd	Pd61	0.831088	0.125124	0.236223
Pd	Pd62	0.830878	0.375534	0.236709
Pd	Pd63	0.830875	0.624454	0.236709
Pd	Pd64	0.831089	0.874876	0.236222
Pd	Pd65	0.999659	0.999998	0.268384
Pd	Pd66	0.999588	0.250042	0.268543
Pd	Pd67	0.997840	0.499996	0.268835
Pd	Pd68	0.999581	0.749948	0.268541
Pd	Pd69	0.499532	0.000013	0.268225
Pd	Pd70	0.499186	0.250027	0.268711
Pd	Pd71	0.498571	0.500008	0.269846
Pd	Pd72	0.499185	0.750001	0.268711
Pd	Pd73	0.166423	0.125031	0.308123
Pd	Pd74	0.164980	0.374839	0.307994
Pd	Pd75	0.164976	0.625159	0.307987
Pd	Pd76	0.166413	0.874976	0.308127
Pd	Pd77	0.665968	0.123894	0.308011
Pd	Pd78	0.665050	0.371568	0.305587
Pd	Pd79	0.665052	0.628431	0.305587
Pd	Pd80	0.665969	0.876125	0.308008
Pd	Pd81	0.830576	0.750840	0.338546
Pd	Pd82	0.331028	0.000010	0.338590
Pd	Pd83	0.332435	0.251805	0.338243
Pd	Pd84	0.329348	0.500010	0.338818
Pd	Pd85	0.332432	0.748211	0.338236
Pd	Pd86	0.831459	0.000003	0.338258
Pd	Pd87	0.830581	0.249166	0.338551
Pd	Pd88	0.823645	0.500001	0.342566
Pd	Pd89	0.998132	0.125158	0.368347
Pd	Pd90	0.995310	0.375897	0.368117
Pd	Pd91	0.995299	0.624113	0.368111
Pd	Pd92	0.998125	0.874857	0.368347
Pd	Pd93	0.498115	0.123602	0.368402
Pd	Pd94	0.495695	0.370277	0.371866
Pd	Pd95	0.495703	0.629747	0.371862
Pd	Pd96	0.498104	0.876425	0.368405
O	O97	0.604534	0.500019	0.408738

H	H98	0.620266	0.500045	0.449423
H	H99	0.690893	0.500060	0.369693

Transition state of R156 OH* + OH* = H₂O* + O* on Pd(211)

data_				
_cell_length_a		13.456032		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		23.511980		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.166667	-0.000000	0.000000
Pd	Pd2	0.166667	0.250000	0.000000
Pd	Pd3	0.166667	0.500000	0.000000
Pd	Pd4	0.166667	0.750000	0.000000
Pd	Pd5	0.666667	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.666667	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.666667	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.666667	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.333333	0.125000	0.033723
Pd	Pd10	0.333333	0.375000	0.033723
Pd	Pd11	0.333333	0.625000	0.033723
Pd	Pd12	0.333333	0.875000	0.033723
Pd	Pd13	0.833333	0.125000	0.033723
Pd	Pd14	0.833333	0.375000	0.033723
Pd	Pd15	0.833333	0.625000	0.033723
Pd	Pd16	0.833333	0.875000	0.033723
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.067447
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.067447
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.067447
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.067447
Pd	Pd21	0.500000	-0.000000	0.067447
Pd	Pd22	0.500000	0.250000	0.067447
Pd	Pd23	0.500000	0.500000	0.067447
Pd	Pd24	0.500000	0.750000	0.067447
Pd	Pd25	0.166667	0.125000	0.101170
Pd	Pd26	0.166667	0.375000	0.101170
Pd	Pd27	0.166667	0.625000	0.101170
Pd	Pd28	0.166667	0.875000	0.101170
Pd	Pd29	0.666667	0.125000	0.101170
Pd	Pd30	0.666667	0.375000	0.101170
Pd	Pd31	0.666667	0.625000	0.101170
Pd	Pd32	0.666667	0.875000	0.101170
Pd	Pd33	0.333333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd34	0.333333	0.250000	0.134894
Pd	Pd35	0.333333	0.500000	0.134894
Pd	Pd36	0.333333	0.750000	0.134894
Pd	Pd37	0.833333	-0.000000	0.134894
Pd	Pd38	0.833333	0.250000	0.134894
Pd	Pd39	0.833333	0.500000	0.134894
Pd	Pd40	0.833333	0.750000	0.134894
Pd	Pd41	0.000000	0.125000	0.168617

Pd	Pd42	0.000000	0.375000	0.168617
Pd	Pd43	0.000000	0.625000	0.168617
Pd	Pd44	0.000000	0.875000	0.168617
Pd	Pd45	0.500000	0.125000	0.168617
Pd	Pd46	0.500000	0.375000	0.168617
Pd	Pd47	0.500000	0.625000	0.168617
Pd	Pd48	0.500000	0.875000	0.168617
Pd	Pd49	0.165567	0.999988	0.202540
Pd	Pd50	0.165836	0.249914	0.202492
Pd	Pd51	0.165318	0.500004	0.202660
Pd	Pd52	0.165822	0.750078	0.202491
Pd	Pd53	0.665917	0.999998	0.202824
Pd	Pd54	0.665528	0.251311	0.204515
Pd	Pd55	0.665786	0.499995	0.203059
Pd	Pd56	0.665538	0.748670	0.204511
Pd	Pd57	0.330621	0.124924	0.235723
Pd	Pd58	0.330915	0.375217	0.235809
Pd	Pd59	0.330916	0.624789	0.235806
Pd	Pd60	0.330626	0.875062	0.235724
Pd	Pd61	0.830788	0.125142	0.236197
Pd	Pd62	0.831791	0.375486	0.236122
Pd	Pd63	0.831796	0.624491	0.236120
Pd	Pd64	0.830794	0.874839	0.236196
Pd	Pd65	0.999141	1.000000	0.268333
Pd	Pd66	0.000077	0.250134	0.268549
Pd	Pd67	0.999528	0.500001	0.270211
Pd	Pd68	0.000081	0.749859	0.268550
Pd	Pd69	0.498862	0.999997	0.268107
Pd	Pd70	0.497578	0.249617	0.269397
Pd	Pd71	0.498894	0.500000	0.269545
Pd	Pd72	0.497569	0.750365	0.269405
Pd	Pd73	0.165491	0.124339	0.307128
Pd	Pd74	0.166750	0.374461	0.306594
Pd	Pd75	0.166764	0.625537	0.306599
Pd	Pd76	0.165495	0.875644	0.307144
Pd	Pd77	0.666011	0.122338	0.308358
Pd	Pd78	0.665112	0.368066	0.308003
Pd	Pd79	0.665129	0.631887	0.308008
Pd	Pd80	0.666017	0.877636	0.308351
Pd	Pd81	0.834788	0.751854	0.338181
Pd	Pd82	0.329300	0.999999	0.338080
Pd	Pd83	0.329190	0.248418	0.337470
Pd	Pd84	0.329135	0.500005	0.338057
Pd	Pd85	0.329214	0.751556	0.337475
Pd	Pd86	0.832632	0.999991	0.338349
Pd	Pd87	0.834781	0.248117	0.338179
Pd	Pd88	0.845274	0.499994	0.340969
Pd	Pd89	0.000654	0.123719	0.368842
Pd	Pd90	0.006656	0.372212	0.370038
Pd	Pd91	0.006667	0.627793	0.370039
Pd	Pd92	0.000653	0.876277	0.368846
Pd	Pd93	0.497024	0.121894	0.368613
Pd	Pd94	0.490897	0.366294	0.370330
Pd	Pd95	0.490910	0.633684	0.370334
Pd	Pd96	0.497043	0.878067	0.368609
O	O97	0.701337	0.499971	0.368259
O	O98	0.559871	0.499984	0.428481
H	H99	0.551296	0.499994	0.469547
H	H100	0.645873	0.499959	0.404498

Transition state of R1 CO₂* + H* = COOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166520	0.000154	0.197053
Pd	Pd34	0.166083	0.250282	0.197022
Pd	Pd35	0.166039	0.500612	0.197016
Pd	Pd36	0.166537	0.750334	0.196983
Pd	Pd37	0.416454	0.125238	0.197022
Pd	Pd38	0.415930	0.375250	0.196917
Pd	Pd39	0.416981	0.625300	0.197835
Pd	Pd40	0.417081	0.875167	0.197163
Pd	Pd41	0.666542	0.000431	0.197164
Pd	Pd42	0.666143	0.250509	0.196990
Pd	Pd43	0.665516	0.500881	0.197914
Pd	Pd44	0.666067	0.750067	0.198269

Pd	Pd45	0.916147	0.125328	0.196967
Pd	Pd46	0.915736	0.375647	0.196863
Pd	Pd47	0.915639	0.625840	0.197207
Pd	Pd48	0.916194	0.875339	0.197189
Pd	Pd49	0.833413	0.001859	0.297148
Pd	Pd50	0.832307	0.751476	0.298523
Pd	Pd51	0.832996	0.500061	0.296807
Pd	Pd52	0.832537	0.250682	0.297112
Pd	Pd53	0.582733	0.125793	0.297261
Pd	Pd54	0.583175	0.876556	0.298186
Pd	Pd55	0.580732	0.623518	0.302339
Pd	Pd56	0.582642	0.374840	0.297021
Pd	Pd57	0.332996	0.000694	0.296979
Pd	Pd58	0.330982	0.751069	0.296674
Pd	Pd59	0.331695	0.500242	0.296958
Pd	Pd60	0.332556	0.250406	0.296830
Pd	Pd61	0.082673	0.125852	0.297022
Pd	Pd62	0.082589	0.876282	0.297178
Pd	Pd63	0.081727	0.625861	0.297096
Pd	Pd64	0.082315	0.375368	0.296897
C	C65	0.581576	0.641206	0.393123
O	O66	0.517902	0.559873	0.417411
O	O67	0.649859	0.735363	0.407929
H	H68	0.692062	0.789923	0.351923

Transition state of R2 HCOO* + H* = HCOOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166763	0.000030	0.196858
Pd	Pd34	0.166405	0.249894	0.196905
Pd	Pd35	0.167975	0.500093	0.198245
Pd	Pd36	0.166977	0.750247	0.197077
Pd	Pd37	0.416527	0.125355	0.196874
Pd	Pd38	0.415903	0.376078	0.198232
Pd	Pd39	0.416401	0.624757	0.198158
Pd	Pd40	0.416840	0.874933	0.197234
Pd	Pd41	0.666214	0.999664	0.197024
Pd	Pd42	0.666145	0.250173	0.196893
Pd	Pd43	0.666443	0.500186	0.197051
Pd	Pd44	0.666519	0.749793	0.197156
Pd	Pd45	0.916111	0.124898	0.196865
Pd	Pd46	0.916482	0.375142	0.196726
Pd	Pd47	0.917000	0.624906	0.196775
Pd	Pd48	0.916674	0.874870	0.196910
Pd	Pd49	0.833069	0.000099	0.297026
Pd	Pd50	0.834335	0.750519	0.296919
Pd	Pd51	0.833081	0.499691	0.296833
Pd	Pd52	0.833094	0.249595	0.296850
Pd	Pd53	0.583623	0.124436	0.297152
Pd	Pd54	0.584256	0.875970	0.297764
Pd	Pd55	0.585477	0.625127	0.297618
Pd	Pd56	0.584428	0.373583	0.296767
Pd	Pd57	0.332879	0.000809	0.296977
Pd	Pd58	0.332443	0.752236	0.297810
Pd	Pd59	0.332386	0.499152	0.300987
Pd	Pd60	0.333389	0.248375	0.296824
Pd	Pd61	0.082501	0.124838	0.296825
Pd	Pd62	0.082915	0.875668	0.297038
Pd	Pd63	0.081563	0.625538	0.296671
Pd	Pd64	0.081673	0.374005	0.296657
C	C65	0.387955	0.570856	0.426776
O	O66	0.329422	0.493876	0.392177
O	O67	0.457777	0.665146	0.416175
H	H68	0.372002	0.547091	0.473783
H	H69	0.470062	0.705365	0.344835

Transition state of R3 H₂COO* + H* = H₂COOH* + * on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.333333 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.333333 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.583333 0.125000 0.000000
Pd Pd10 0.583333 0.375000 0.000000
Pd Pd11 0.583333 0.625000 0.000000
Pd Pd12 0.583333 0.875000 0.000000
Pd Pd13 0.833333 0.000000 0.000000
Pd Pd14 0.833333 0.250000 0.000000
Pd Pd15 0.833333 0.500000 0.000000
Pd Pd16 0.833333 0.750000 0.000000
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.098515
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.098515
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.098515
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.098515
Pd Pd21 0.250000 0.125000 0.098515
Pd Pd22 0.250000 0.375000 0.098515
Pd Pd23 0.250000 0.625000 0.098515
Pd Pd24 0.250000 0.875000 0.098515
Pd Pd25 0.500000 0.000000 0.098515
Pd Pd26 0.500000 0.250000 0.098515
Pd Pd27 0.500000 0.500000 0.098515
Pd Pd28 0.500000 0.750000 0.098515
Pd Pd29 0.750000 0.125000 0.098515
Pd Pd30 0.750000 0.375000 0.098515
Pd Pd31 0.750000 0.625000 0.098515
Pd Pd32 0.750000 0.875000 0.098515
Pd Pd33 0.165284 0.999689 0.196872
Pd Pd34 0.165568 0.249501 0.196681
Pd Pd35 0.164652 0.499725 0.196470
Pd Pd36 0.167998 0.749955 0.198964
Pd Pd37 0.416243 0.124348 0.196895
Pd Pd38 0.416175 0.373978 0.196488
Pd Pd39 0.414991 0.625167 0.196852
Pd Pd40 0.415345 0.874493 0.198050
Pd Pd41 0.666062 0.998249 0.197759
Pd Pd42 0.666295 0.249909 0.196523
Pd Pd43 0.664829 0.502212 0.198619
Pd Pd44 0.665504 0.750200 0.198273
Pd Pd45 0.915535 0.124889 0.196700
Pd Pd46 0.914544 0.375297 0.196748
Pd Pd47 0.916001 0.625200 0.196854
Pd Pd48 0.916863 0.874428 0.197030
Pd Pd49 0.835533 0.001967 0.297183
Pd Pd50 0.831521 0.748712 0.297074
Pd Pd51 0.832724 0.497348 0.297526
Pd Pd52 0.833400 0.249620 0.297350
Pd Pd53 0.583143 0.128023 0.296685

```

Pd	Pd54	0.589447	0.882952	0.297451
Pd	Pd55	0.582685	0.616522	0.297424
Pd	Pd56	0.582039	0.370624	0.297052
Pd	Pd57	0.329580	0.000598	0.297516
Pd	Pd58	0.327408	0.746185	0.300786
Pd	Pd59	0.327868	0.494220	0.294961
Pd	Pd60	0.330629	0.247914	0.297058
Pd	Pd61	0.081554	0.124220	0.297097
Pd	Pd62	0.079255	0.874033	0.297585
Pd	Pd63	0.078201	0.622898	0.297503
Pd	Pd64	0.080589	0.373251	0.296499
C	C65	0.513782	0.759609	0.408592
O	O66	0.460284	0.670540	0.369092
O	O67	0.519940	0.876176	0.385382
H	H68	0.619882	0.729481	0.422321
H	H69	0.441824	0.760601	0.446893
H	H70	0.380037	0.883775	0.344380

Transition state of R4 COOH* + H* = HOCOH* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515

Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167057	0.999728	0.197027
Pd	Pd34	0.167807	0.249690	0.197382
Pd	Pd35	0.167595	0.499663	0.198181
Pd	Pd36	0.166656	0.749799	0.197116
Pd	Pd37	0.417284	0.124445	0.197261
Pd	Pd38	0.416837	0.374569	0.198075
Pd	Pd39	0.416340	0.624022	0.198208
Pd	Pd40	0.416771	0.874469	0.196940
Pd	Pd41	0.666768	0.999538	0.196975
Pd	Pd42	0.667072	0.249515	0.197163
Pd	Pd43	0.666352	0.499042	0.197356
Pd	Pd44	0.666343	0.749070	0.196958
Pd	Pd45	0.917297	0.124844	0.197007
Pd	Pd46	0.917529	0.374641	0.196947
Pd	Pd47	0.916591	0.624344	0.196778
Pd	Pd48	0.916610	0.874610	0.196927
Pd	Pd49	0.084206	0.124302	0.297181
Pd	Pd50	0.082213	0.374188	0.297237
Pd	Pd51	0.081691	0.625744	0.297119
Pd	Pd52	0.083668	0.874766	0.297212
Pd	Pd53	0.333986	0.999125	0.297328
Pd	Pd54	0.334937	0.247890	0.298288
Pd	Pd55	0.331456	0.502405	0.300722
Pd	Pd56	0.333588	0.751449	0.297368
Pd	Pd57	0.584866	0.123112	0.297387
Pd	Pd58	0.584234	0.372783	0.298210
Pd	Pd59	0.584325	0.625395	0.297335
Pd	Pd60	0.583942	0.874492	0.297166
Pd	Pd61	0.834035	0.999282	0.296931
Pd	Pd62	0.834276	0.248953	0.297077
Pd	Pd63	0.833112	0.499365	0.296965
Pd	Pd64	0.833512	0.749640	0.296763
C	C65	0.345865	0.478886	0.385793
O	O66	0.291671	0.558744	0.423458
O	O67	0.407083	0.387158	0.406967
H	H68	0.247913	0.624346	0.400025
H	H69	0.448668	0.325692	0.355168

Transition state of R5 HCOOH* + H* = HOCHOH* + * on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

```


Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165705	0.000635	0.197172
Pd	Pd34	0.165702	0.250459	0.197252
Pd	Pd35	0.165660	0.500580	0.197039
Pd	Pd36	0.166041	0.750308	0.197007
Pd	Pd37	0.416033	0.125559	0.197044
Pd	Pd38	0.415889	0.375246	0.196989
Pd	Pd39	0.416557	0.625504	0.197552
Pd	Pd40	0.415982	0.875716	0.197017
Pd	Pd41	0.665916	0.000398	0.197175
Pd	Pd42	0.666056	0.250508	0.197056
Pd	Pd43	0.665508	0.500851	0.197685
Pd	Pd44	0.665582	0.750408	0.197714
Pd	Pd45	0.915805	0.125499	0.197119
Pd	Pd46	0.915475	0.375820	0.197201
Pd	Pd47	0.915416	0.625464	0.197220
Pd	Pd48	0.915620	0.875106	0.197100
Pd	Pd49	0.831821	0.001093	0.297171
Pd	Pd50	0.831050	0.751286	0.297645
Pd	Pd51	0.831011	0.500883	0.297720
Pd	Pd52	0.831838	0.250931	0.297303
Pd	Pd53	0.581909	0.126059	0.297209
Pd	Pd54	0.581911	0.875989	0.297353
Pd	Pd55	0.581651	0.626222	0.300788
Pd	Pd56	0.582236	0.375795	0.296924
Pd	Pd57	0.332002	0.001269	0.297099
Pd	Pd58	0.331188	0.751752	0.296703
Pd	Pd59	0.330036	0.500931	0.296826
Pd	Pd60	0.331702	0.250646	0.297181

Pd	Pd61	0.081914	0.126182	0.297398
Pd	Pd62	0.081632	0.876186	0.296939
Pd	Pd63	0.080641	0.626169	0.296965
Pd	Pd64	0.081168	0.375707	0.297472
C	C65	0.348455	0.527823	0.410611
O	O66	0.423735	0.620584	0.416704
O	O67	0.221696	0.524839	0.435065
H	H68	0.387150	0.443055	0.389069
H	H69	0.171923	0.451551	0.421367
H	H70	0.509563	0.625310	0.368472

Transition state of R6 CO₂* + H* = HCOO* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166261	0.999748	0.196978

Pd	Pd34	0.166191	0.249667	0.196800
Pd	Pd35	0.166496	0.499762	0.196623
Pd	Pd36	0.166378	0.749919	0.196896
Pd	Pd37	0.416513	0.124537	0.196894
Pd	Pd38	0.416960	0.374401	0.197628
Pd	Pd39	0.416361	0.625051	0.197412
Pd	Pd40	0.416646	0.875005	0.197018
Pd	Pd41	0.666312	0.999683	0.197070
Pd	Pd42	0.665553	0.250485	0.198226
Pd	Pd43	0.665763	0.499306	0.197333
Pd	Pd44	0.665829	0.749167	0.197977
Pd	Pd45	0.915796	0.124856	0.196839
Pd	Pd46	0.915966	0.374868	0.196830
Pd	Pd47	0.916080	0.624936	0.196760
Pd	Pd48	0.915948	0.874625	0.196963
Pd	Pd49	0.082844	0.124233	0.296981
Pd	Pd50	0.082829	0.374269	0.296685
Pd	Pd51	0.082554	0.624897	0.296739
Pd	Pd52	0.082841	0.874792	0.297002
Pd	Pd53	0.332550	0.999379	0.296987
Pd	Pd54	0.331533	0.248821	0.296669
Pd	Pd55	0.330146	0.499858	0.296270
Pd	Pd56	0.331513	0.750146	0.297020
Pd	Pd57	0.582712	0.123049	0.297191
Pd	Pd58	0.582904	0.373786	0.299351
Pd	Pd59	0.583051	0.626295	0.298128
Pd	Pd60	0.583088	0.875498	0.297617
Pd	Pd61	0.833417	0.999601	0.297247
Pd	Pd62	0.834267	0.248557	0.296939
Pd	Pd63	0.834751	0.499556	0.295962
Pd	Pd64	0.833975	0.750604	0.297272
C	C65	0.581795	0.512254	0.415152
O	O66	0.583327	0.406710	0.395858
O	O67	0.581374	0.571025	0.459774
H	H68	0.579362	0.596763	0.369872

Transition state of R7 HCOO* + H* = H₂COO* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166409	0.000141	0.196790
Pd	Pd34	0.166429	0.249978	0.196814
Pd	Pd35	0.166308	0.500195	0.197614
Pd	Pd36	0.166217	0.749944	0.197558
Pd	Pd37	0.416513	0.125131	0.196641
Pd	Pd38	0.415935	0.376316	0.198433
Pd	Pd39	0.416108	0.625103	0.198176
Pd	Pd40	0.416058	0.873995	0.198260
Pd	Pd41	0.665863	0.999880	0.196736
Pd	Pd42	0.665800	0.250323	0.196737
Pd	Pd43	0.666396	0.500621	0.197219
Pd	Pd44	0.666406	0.749520	0.197199
Pd	Pd45	0.915944	0.125061	0.196771
Pd	Pd46	0.915854	0.375068	0.196786
Pd	Pd47	0.917280	0.625037	0.197341
Pd	Pd48	0.915795	0.875043	0.196777
Pd	Pd49	0.832521	0.000198	0.296873
Pd	Pd50	0.832513	0.749846	0.297067
Pd	Pd51	0.832603	0.500381	0.297070
Pd	Pd52	0.832581	0.250066	0.296865
Pd	Pd53	0.584078	0.125145	0.297119
Pd	Pd54	0.584777	0.876817	0.297138
Pd	Pd55	0.581949	0.625181	0.297818
Pd	Pd56	0.584873	0.373452	0.297192
Pd	Pd57	0.333121	0.003196	0.296966
Pd	Pd58	0.333558	0.756900	0.297761
Pd	Pd59	0.333826	0.493707	0.298112
Pd	Pd60	0.333145	0.247155	0.297054
Pd	Pd61	0.081511	0.125143	0.296912
Pd	Pd62	0.080714	0.876768	0.296459
Pd	Pd63	0.082759	0.625122	0.297968
Pd	Pd64	0.080897	0.373517	0.296495
C	C65	0.356627	0.626644	0.405359
O	O66	0.299384	0.519539	0.383675
O	O67	0.300361	0.733982	0.383576
H	H68	0.337813	0.626824	0.453695

H	H69	0.474839	0.626224	0.398233

Transition state of R8 COOH* + H* = HCOOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164943	0.999238	0.196973
Pd	Pd34	0.164671	0.249223	0.196867
Pd	Pd35	0.165410	0.499365	0.196629
Pd	Pd36	0.165788	0.749225	0.196891
Pd	Pd37	0.415000	0.124066	0.197020
Pd	Pd38	0.415460	0.374033	0.197335
Pd	Pd39	0.416905	0.624506	0.198257
Pd	Pd40	0.415473	0.874358	0.197068
Pd	Pd41	0.665218	0.999322	0.196955
Pd	Pd42	0.664254	0.249849	0.198024

Pd	Pd43	0.665136	0.499000	0.197183
Pd	Pd44	0.665229	0.749083	0.197667
Pd	Pd45	0.914626	0.124457	0.196931
Pd	Pd46	0.914584	0.374743	0.197073
Pd	Pd47	0.915246	0.624724	0.196826
Pd	Pd48	0.915170	0.874272	0.196971
Pd	Pd49	0.080222	0.122750	0.297157
Pd	Pd50	0.080329	0.372118	0.296892
Pd	Pd51	0.080411	0.624204	0.296841
Pd	Pd52	0.079627	0.874157	0.297095
Pd	Pd53	0.329685	0.998265	0.297178
Pd	Pd54	0.328976	0.247109	0.296822
Pd	Pd55	0.326004	0.497357	0.296502
Pd	Pd56	0.327889	0.749813	0.297279
Pd	Pd57	0.580402	0.121449	0.297358
Pd	Pd58	0.579861	0.369525	0.298893
Pd	Pd59	0.576258	0.622986	0.299098
Pd	Pd60	0.579404	0.874438	0.297567
Pd	Pd61	0.829926	0.998221	0.297360
Pd	Pd62	0.831495	0.247045	0.297271
Pd	Pd63	0.833964	0.497585	0.296672
Pd	Pd64	0.831458	0.749810	0.297294
C	C65	0.593527	0.563189	0.389205
O	O66	0.567851	0.454551	0.398007
O	O67	0.560457	0.649101	0.429042
H	H68	0.583939	0.729056	0.412213
H	H69	0.702106	0.591129	0.357511

Transition state of R9 $\text{HCOOH}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{COOH}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166420	0.999877	0.196996
Pd	Pd34	0.165759	0.249833	0.196498
Pd	Pd35	0.167060	0.499821	0.197832
Pd	Pd36	0.166504	0.750115	0.197115
Pd	Pd37	0.416725	0.124306	0.196725
Pd	Pd38	0.416863	0.375613	0.197725
Pd	Pd39	0.416408	0.625033	0.197638
Pd	Pd40	0.416797	0.874665	0.196989
Pd	Pd41	0.666577	0.000272	0.197006
Pd	Pd42	0.665141	0.251272	0.198700
Pd	Pd43	0.666246	0.499630	0.197774
Pd	Pd44	0.667011	0.749822	0.196845
Pd	Pd45	0.915610	0.125448	0.196951
Pd	Pd46	0.916237	0.374861	0.196947
Pd	Pd47	0.917119	0.624945	0.196850
Pd	Pd48	0.916436	0.875410	0.196962
Pd	Pd49	0.082182	0.124289	0.296853
Pd	Pd50	0.082497	0.374082	0.297137
Pd	Pd51	0.083926	0.625122	0.297498
Pd	Pd52	0.083208	0.874739	0.297309
Pd	Pd53	0.332545	0.999341	0.297198
Pd	Pd54	0.331057	0.246831	0.294960
Pd	Pd55	0.332438	0.499836	0.299075
Pd	Pd56	0.333254	0.751023	0.297248
Pd	Pd57	0.582902	0.123480	0.297515
Pd	Pd58	0.583012	0.374987	0.300551
Pd	Pd59	0.584918	0.628015	0.296471
Pd	Pd60	0.583480	0.875621	0.297061
Pd	Pd61	0.833418	0.999866	0.297329
Pd	Pd62	0.833559	0.249304	0.297257
Pd	Pd63	0.834924	0.500936	0.296453
Pd	Pd64	0.834573	0.750521	0.296959
C	C65	0.441542	0.429132	0.411870
O	O66	0.567276	0.417490	0.389560
O	O67	0.365578	0.327846	0.428061
H	H68	0.430682	0.499364	0.446384
H	H69	0.391071	0.261171	0.400868
H	H70	0.357419	0.488503	0.372890

Transition state of R10 $\text{HOCOH}^* + \text{H}^* = \text{HOCHOH}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804

_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166168	0.000393	0.197026
Pd Pd34	0.166489	0.250263	0.196991
Pd Pd35	0.167779	0.500372	0.197971
Pd Pd36	0.165621	0.750317	0.196543
Pd Pd37	0.416703	0.125518	0.196943
Pd Pd38	0.416077	0.375425	0.197410
Pd Pd39	0.416840	0.625104	0.197869
Pd Pd40	0.416375	0.875701	0.196843
Pd Pd41	0.666515	0.999969	0.196943
Pd Pd42	0.667151	0.249727	0.196724
Pd Pd43	0.665901	0.500609	0.197843
Pd Pd44	0.665140	0.749035	0.198612
Pd Pd45	0.916344	0.124937	0.197053
Pd Pd46	0.916905	0.375359	0.196846
Pd Pd47	0.916337	0.625151	0.196941
Pd Pd48	0.915565	0.874797	0.196955
Pd Pd49	0.082853	0.125625	0.297186

Pd	Pd50	0.083736	0.374941	0.297307
Pd	Pd51	0.082464	0.625990	0.297033
Pd	Pd52	0.082021	0.876312	0.296924
Pd	Pd53	0.332913	0.001214	0.297211
Pd	Pd54	0.332868	0.249938	0.297066
Pd	Pd55	0.332875	0.500836	0.300160
Pd	Pd56	0.330048	0.753998	0.295863
Pd	Pd57	0.583096	0.125210	0.297350
Pd	Pd58	0.584575	0.371617	0.295986
Pd	Pd59	0.585253	0.628031	0.302012
Pd	Pd60	0.582830	0.878214	0.297342
Pd	Pd61	0.833277	0.000939	0.297342
Pd	Pd62	0.833756	0.250124	0.297367
Pd	Pd63	0.834809	0.499279	0.296616
Pd	Pd64	0.833293	0.751367	0.297196
C	C65	0.552309	0.608043	0.389018
O	O66	0.505097	0.699411	0.421716
O	O67	0.629541	0.532187	0.420943
H	H68	0.450872	0.754013	0.395223
H	H69	0.664449	0.467596	0.393947
H	H70	0.445870	0.549349	0.358048

Transition state of R11 C* + H* = CH* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515

Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166473	0.000186	0.196872
Pd	Pd34	0.165573	0.249980	0.196778
Pd	Pd35	0.165471	0.499710	0.197325
Pd	Pd36	0.168289	0.750189	0.198399
Pd	Pd37	0.416008	0.124515	0.196833
Pd	Pd38	0.416430	0.374969	0.197692
Pd	Pd39	0.416378	0.625444	0.197160
Pd	Pd40	0.416500	0.874158	0.198319
Pd	Pd41	0.666673	0.001373	0.196635
Pd	Pd42	0.664941	0.251486	0.197840
Pd	Pd43	0.665502	0.499982	0.197701
Pd	Pd44	0.667493	0.751046	0.197255
Pd	Pd45	0.915521	0.125994	0.196784
Pd	Pd46	0.915309	0.375349	0.196652
Pd	Pd47	0.916065	0.625765	0.196817
Pd	Pd48	0.917572	0.875888	0.197001
Pd	Pd49	0.081985	0.123766	0.296696
Pd	Pd50	0.077645	0.371187	0.297374
Pd	Pd51	0.078000	0.625742	0.296527
Pd	Pd52	0.085404	0.876555	0.297451
Pd	Pd53	0.333930	0.999445	0.297265
Pd	Pd54	0.330007	0.246444	0.296783
Pd	Pd55	0.322118	0.492239	0.298042
Pd	Pd56	0.334512	0.749530	0.303214
Pd	Pd57	0.581121	0.127261	0.297474
Pd	Pd58	0.580892	0.376380	0.301306
Pd	Pd59	0.596447	0.629975	0.297855
Pd	Pd60	0.587078	0.880973	0.296557
Pd	Pd61	0.833251	0.003127	0.297191
Pd	Pd62	0.829855	0.249983	0.297291
Pd	Pd63	0.835813	0.498817	0.296969
Pd	Pd64	0.837841	0.755408	0.297682
C	C65	0.424305	0.613571	0.340913
H	H66	0.495738	0.506511	0.349961

Transition state of R12 $\text{CH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract	_z		
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166000	0.999957	0.196794	
Pd	Pd34	0.166153	0.249817	0.196780	
Pd	Pd35	0.167693	0.499756	0.198236	
Pd	Pd36	0.167564	0.749914	0.197505	
Pd	Pd37	0.416237	0.124670	0.196785	
Pd	Pd38	0.416401	0.375156	0.197891	
Pd	Pd39	0.416818	0.625299	0.197921	
Pd	Pd40	0.416695	0.874372	0.197427	
Pd	Pd41	0.666032	0.000539	0.196894	
Pd	Pd42	0.665254	0.251495	0.198189	
Pd	Pd43	0.666413	0.500535	0.197753	
Pd	Pd44	0.666717	0.749512	0.198104	
Pd	Pd45	0.915289	0.125720	0.196871	
Pd	Pd46	0.916548	0.375341	0.196834	
Pd	Pd47	0.917513	0.625287	0.196857	
Pd	Pd48	0.916441	0.875185	0.196912	
Pd	Pd49	0.082005	0.123303	0.296904	
Pd	Pd50	0.080592	0.371791	0.297210	
Pd	Pd51	0.081410	0.625937	0.297253	
Pd	Pd52	0.083970	0.875599	0.297113	
Pd	Pd53	0.333885	0.999007	0.296836	
Pd	Pd54	0.330182	0.245315	0.296984	
Pd	Pd55	0.323466	0.495976	0.300514	
Pd	Pd56	0.333375	0.751062	0.299410	
Pd	Pd57	0.582205	0.126013	0.297405	
Pd	Pd58	0.582070	0.375627	0.300540	
Pd	Pd59	0.591843	0.630384	0.300565	

Pd	Pd60	0.585355	0.877424	0.297135
Pd	Pd61	0.833183	0.001441	0.297203
Pd	Pd62	0.831673	0.249920	0.297309
Pd	Pd63	0.837286	0.499648	0.296914
Pd	Pd64	0.836112	0.752522	0.297276
C	C65	0.497540	0.504587	0.351589
H	H66	0.511457	0.485927	0.398725
H	H67	0.425091	0.606099	0.349163

Transition state of R13 $\text{CH}_2^* + \text{H}^* = \text{CH}_3^* + ^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166136	0.000478	0.196840
Pd	Pd34	0.166247	0.250167	0.196743
Pd	Pd35	0.167859	0.500237	0.197888

Pd	Pd36	0.166729	0.750713	0.197321
Pd	Pd37	0.416552	0.125101	0.196860
Pd	Pd38	0.416358	0.375518	0.197687
Pd	Pd39	0.416015	0.626076	0.197544
Pd	Pd40	0.416359	0.875321	0.197259
Pd	Pd41	0.666078	0.000633	0.197009
Pd	Pd42	0.665249	0.251425	0.198601
Pd	Pd43	0.665927	0.500500	0.197582
Pd	Pd44	0.666014	0.749285	0.197950
Pd	Pd45	0.915381	0.125944	0.196954
Pd	Pd46	0.916119	0.375396	0.196766
Pd	Pd47	0.917031	0.625360	0.196757
Pd	Pd48	0.915930	0.875540	0.196856
Pd	Pd49	0.081972	0.125071	0.296845
Pd	Pd50	0.080926	0.374201	0.296738
Pd	Pd51	0.080430	0.627129	0.296937
Pd	Pd52	0.082742	0.876841	0.297202
Pd	Pd53	0.332830	0.001033	0.297096
Pd	Pd54	0.330657	0.248205	0.296616
Pd	Pd55	0.326711	0.501686	0.298963
Pd	Pd56	0.330987	0.753932	0.299377
Pd	Pd57	0.582346	0.125616	0.297970
Pd	Pd58	0.583459	0.374147	0.300187
Pd	Pd59	0.584732	0.630694	0.298906
Pd	Pd60	0.583715	0.878342	0.297073
Pd	Pd61	0.832861	0.001586	0.297288
Pd	Pd62	0.832804	0.250038	0.297681
Pd	Pd63	0.835299	0.500799	0.296506
Pd	Pd64	0.834334	0.752788	0.296994
C	C65	0.508414	0.488495	0.362498
H	H66	0.427470	0.447298	0.391144
H	H67	0.590320	0.528194	0.391176
H	H68	0.430028	0.605245	0.344924

Transition state of R14 $\text{CH}_3^* + \text{H}^* = \text{CH}_4^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000

Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166893	0.999013	0.197004
Pd	Pd34	0.167018	0.249019	0.196729
Pd	Pd35	0.167958	0.499162	0.197114
Pd	Pd36	0.167156	0.749231	0.197055
Pd	Pd37	0.417130	0.123785	0.196848
Pd	Pd38	0.417039	0.374332	0.197904
Pd	Pd39	0.417122	0.624348	0.197313
Pd	Pd40	0.417543	0.874053	0.196941
Pd	Pd41	0.667192	0.999456	0.197066
Pd	Pd42	0.665309	0.251251	0.199263
Pd	Pd43	0.666629	0.499155	0.197798
Pd	Pd44	0.666998	0.748599	0.197304
Pd	Pd45	0.916272	0.124556	0.196921
Pd	Pd46	0.917090	0.374183	0.196857
Pd	Pd47	0.917382	0.623904	0.196883
Pd	Pd48	0.916793	0.874087	0.197043
Pd	Pd49	0.084541	0.122547	0.296830
Pd	Pd50	0.084160	0.372961	0.296781
Pd	Pd51	0.084434	0.623860	0.296997
Pd	Pd52	0.084179	0.873515	0.297234
Pd	Pd53	0.334260	0.997827	0.296999
Pd	Pd54	0.332478	0.246401	0.296457
Pd	Pd55	0.331762	0.499056	0.297909
Pd	Pd56	0.333443	0.749304	0.297223
Pd	Pd57	0.584498	0.120634	0.297135
Pd	Pd58	0.585426	0.370985	0.302120
Pd	Pd59	0.584518	0.625308	0.297940
Pd	Pd60	0.584275	0.872708	0.297200
Pd	Pd61	0.834715	0.997795	0.297278
Pd	Pd62	0.836195	0.246742	0.297023
Pd	Pd63	0.836666	0.498919	0.296471
Pd	Pd64	0.834814	0.748452	0.297172
C	C65	0.567240	0.398288	0.397048
H	H66	0.461749	0.390624	0.415758
H	H67	0.624856	0.312056	0.401231
H	H68	0.626873	0.473196	0.416546
H	H69	0.515995	0.480431	0.346205

Transition state of R15 CO* + H* = HCO* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165582	0.000226	0.197034
Pd	Pd34	0.166064	0.250157	0.197089
Pd	Pd35	0.167452	0.500430	0.198014
Pd	Pd36	0.165791	0.750261	0.196983
Pd	Pd37	0.416183	0.125211	0.196857
Pd	Pd38	0.415774	0.375533	0.197539
Pd	Pd39	0.416227	0.624746	0.197824
Pd	Pd40	0.415761	0.875274	0.196990
Pd	Pd41	0.666015	0.999815	0.196915
Pd	Pd42	0.666282	0.250286	0.196820
Pd	Pd43	0.665615	0.500647	0.197576
Pd	Pd44	0.664719	0.749169	0.198049

Pd	Pd45	0.915878	0.125007	0.197026
Pd	Pd46	0.916588	0.375549	0.196945
Pd	Pd47	0.915856	0.625091	0.196894
Pd	Pd48	0.915044	0.874641	0.196964
Pd	Pd49	0.082164	0.125568	0.297094
Pd	Pd50	0.083199	0.375434	0.297228
Pd	Pd51	0.080232	0.625774	0.296868
Pd	Pd52	0.080594	0.876201	0.296847
Pd	Pd53	0.331744	0.001094	0.296997
Pd	Pd54	0.332338	0.249467	0.296965
Pd	Pd55	0.333157	0.500968	0.301381
Pd	Pd56	0.329271	0.753520	0.296831
Pd	Pd57	0.582194	0.124602	0.297135
Pd	Pd58	0.584472	0.371950	0.296304
Pd	Pd59	0.580371	0.624809	0.301524
Pd	Pd60	0.581912	0.876298	0.296955
Pd	Pd61	0.831889	0.000288	0.297191
Pd	Pd62	0.833155	0.249665	0.297000
Pd	Pd63	0.832935	0.499587	0.296910
Pd	Pd64	0.830726	0.750248	0.297309
C	C65	0.451073	0.570519	0.370901
O	O66	0.494919	0.503996	0.409777
H	H67	0.392511	0.659589	0.380903

Transition state of R16 $\text{HCO}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{CO}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515

Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165905	0.999918	0.196872
Pd	Pd34	0.165468	0.249877	0.196895
Pd	Pd35	0.165369	0.500150	0.196634
Pd	Pd36	0.167591	0.750071	0.198384
Pd	Pd37	0.416025	0.124880	0.196724
Pd	Pd38	0.415912	0.374706	0.196599
Pd	Pd39	0.416078	0.625142	0.197570
Pd	Pd40	0.416366	0.874426	0.198038
Pd	Pd41	0.665365	0.999451	0.197529
Pd	Pd42	0.665769	0.250439	0.196909
Pd	Pd43	0.664564	0.501545	0.198703
Pd	Pd44	0.665427	0.749138	0.197721
Pd	Pd45	0.915470	0.125110	0.196838
Pd	Pd46	0.915069	0.375583	0.196786
Pd	Pd47	0.915651	0.625303	0.196867
Pd	Pd48	0.915919	0.874787	0.196706
Pd	Pd49	0.833645	0.002034	0.297023
Pd	Pd50	0.834802	0.750198	0.297116
Pd	Pd51	0.832617	0.498619	0.297344
Pd	Pd52	0.831844	0.250333	0.297269
Pd	Pd53	0.582502	0.126449	0.297096
Pd	Pd54	0.587386	0.878282	0.298206
Pd	Pd55	0.581326	0.623337	0.302437
Pd	Pd56	0.581989	0.374677	0.297119
Pd	Pd57	0.332255	0.000974	0.296527
Pd	Pd58	0.324455	0.748918	0.298944
Pd	Pd59	0.329545	0.496785	0.295729
Pd	Pd60	0.331820	0.249470	0.296792
Pd	Pd61	0.081834	0.125512	0.297007
Pd	Pd62	0.080408	0.876916	0.297132
Pd	Pd63	0.078788	0.622917	0.297217
Pd	Pd64	0.080974	0.373454	0.296903
C	C65	0.522071	0.685163	0.382536
O	O66	0.396526	0.716894	0.390113
H	H67	0.582494	0.646142	0.419631
H	H68	0.608635	0.771299	0.355375

Transition state of R17 $\text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{H}_3\text{CO}^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_

```

_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166892	0.000259	0.196869
Pd	Pd34	0.166825	0.249909	0.196937
Pd	Pd35	0.166963	0.500290	0.197555
Pd	Pd36	0.166175	0.750266	0.196793
Pd	Pd37	0.417405	0.125472	0.196880
Pd	Pd38	0.415559	0.376650	0.198338
Pd	Pd39	0.416550	0.625444	0.197176
Pd	Pd40	0.416549	0.874803	0.197101
Pd	Pd41	0.666747	0.999524	0.196831
Pd	Pd42	0.666820	0.250246	0.196561
Pd	Pd43	0.666304	0.500737	0.197962
Pd	Pd44	0.665817	0.748490	0.198651
Pd	Pd45	0.916589	0.124763	0.196881
Pd	Pd46	0.916962	0.375127	0.196749
Pd	Pd47	0.916838	0.625019	0.196890
Pd	Pd48	0.916149	0.874732	0.196801
Pd	Pd49	0.834731	0.000570	0.297177
Pd	Pd50	0.835243	0.751542	0.297095
Pd	Pd51	0.835556	0.498505	0.296733
Pd	Pd52	0.835409	0.248775	0.296890
Pd	Pd53	0.584369	0.124531	0.297122
Pd	Pd54	0.584663	0.877263	0.296912
Pd	Pd55	0.586943	0.624958	0.300298

Pd	Pd56	0.586925	0.371045	0.296167
Pd	Pd57	0.333584	0.000707	0.296839
Pd	Pd58	0.332456	0.753242	0.296707
Pd	Pd59	0.334894	0.499978	0.299215
Pd	Pd60	0.334034	0.248560	0.297069
Pd	Pd61	0.084264	0.125193	0.297067
Pd	Pd62	0.083293	0.876212	0.296886
Pd	Pd63	0.081440	0.625632	0.297112
Pd	Pd64	0.084164	0.374161	0.297065
C	C65	0.409219	0.569229	0.397091
O	O66	0.536422	0.614826	0.387875
H	H67	0.398907	0.469009	0.401478
H	H68	0.345509	0.618821	0.430084
H	H69	0.312455	0.610451	0.354129

Transition state of R18 COH* + H* = HCOH* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515

Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165214	0.999767	0.196964
Pd	Pd34	0.165507	0.249426	0.196960
Pd	Pd35	0.167978	0.499703	0.198031
Pd	Pd36	0.165895	0.749787	0.196803
Pd	Pd37	0.415798	0.124595	0.196764
Pd	Pd38	0.415490	0.374870	0.197449
Pd	Pd39	0.416159	0.624408	0.197853
Pd	Pd40	0.416039	0.874878	0.196749
Pd	Pd41	0.665432	0.999628	0.197100
Pd	Pd42	0.665304	0.250749	0.197501
Pd	Pd43	0.666297	0.500155	0.197710
Pd	Pd44	0.665038	0.748523	0.198464
Pd	Pd45	0.914799	0.124939	0.197018
Pd	Pd46	0.916656	0.374875	0.196932
Pd	Pd47	0.916731	0.624692	0.196972
Pd	Pd48	0.914917	0.874373	0.196977
Pd	Pd49	0.080706	0.123716	0.297023
Pd	Pd50	0.082358	0.373140	0.297317
Pd	Pd51	0.083015	0.624675	0.297093
Pd	Pd52	0.081250	0.875012	0.296790
Pd	Pd53	0.331853	0.999070	0.296842
Pd	Pd54	0.330089	0.245907	0.296962
Pd	Pd55	0.332488	0.496141	0.300700
Pd	Pd56	0.330534	0.751871	0.296291
Pd	Pd57	0.581606	0.124379	0.297133
Pd	Pd58	0.580185	0.373244	0.297566
Pd	Pd59	0.583409	0.625515	0.301291
Pd	Pd60	0.582169	0.874594	0.297420
Pd	Pd61	0.831163	0.999559	0.297172
Pd	Pd62	0.831307	0.249675	0.297394
Pd	Pd63	0.835896	0.498997	0.296949
Pd	Pd64	0.832882	0.749601	0.297479
C	C65	0.505530	0.521405	0.365274
O	O66	0.582597	0.473890	0.409754
H	H67	0.670174	0.438271	0.393502
H	H68	0.411139	0.562477	0.386731

Transition state of R19 $\text{HCOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000

Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165623	0.999797	0.196790
Pd	Pd34	0.166132	0.249656	0.197248
Pd	Pd35	0.167864	0.500004	0.198972
Pd	Pd36	0.164977	0.749759	0.196514
Pd	Pd37	0.416361	0.125533	0.196910
Pd	Pd38	0.414864	0.375876	0.198244
Pd	Pd39	0.416445	0.624450	0.197953
Pd	Pd40	0.415999	0.875458	0.196423
Pd	Pd41	0.665823	0.998986	0.196909
Pd	Pd42	0.667117	0.248979	0.196028
Pd	Pd43	0.666357	0.500773	0.197683
Pd	Pd44	0.664557	0.747929	0.198743
Pd	Pd45	0.916125	0.124106	0.196892
Pd	Pd46	0.917216	0.375041	0.197020
Pd	Pd47	0.916415	0.624433	0.197173
Pd	Pd48	0.914555	0.873703	0.197016
Pd	Pd49	0.081697	0.124706	0.297136
Pd	Pd50	0.082084	0.374114	0.297824
Pd	Pd51	0.078673	0.626092	0.297756
Pd	Pd52	0.079774	0.875776	0.296711
Pd	Pd53	0.331578	0.000809	0.296796
Pd	Pd54	0.332649	0.247752	0.297528
Pd	Pd55	0.331462	0.501273	0.302004
Pd	Pd56	0.328702	0.755609	0.294828
Pd	Pd57	0.582864	0.123750	0.297205
Pd	Pd58	0.586257	0.369427	0.294238
Pd	Pd59	0.578610	0.623725	0.303373
Pd	Pd60	0.581504	0.875329	0.297180
Pd	Pd61	0.831574	0.999161	0.297174
Pd	Pd62	0.833284	0.248496	0.296808
Pd	Pd63	0.832310	0.498799	0.297286
Pd	Pd64	0.829710	0.749121	0.297662

C	C65	0.458285	0.565066	0.373767
O	O66	0.519065	0.486619	0.412361
H	H67	0.431328	0.648194	0.398307
H	H68	0.546179	0.411085	0.391136
H	H69	0.301481	0.526927	0.370196

Transition state of R20 CH₂OH* + H* = CH₃OH* + * on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165743	0.999736	0.196965
Pd	Pd34	0.166030	0.249647	0.196985
Pd	Pd35	0.169101	0.499722	0.199173
Pd	Pd36	0.165852	0.749832	0.196994
Pd	Pd37	0.415996	0.124602	0.196880
Pd	Pd38	0.416650	0.374532	0.197918

Pd	Pd39	0.415805	0.624315	0.197876
Pd	Pd40	0.416216	0.874815	0.196827
Pd	Pd41	0.665920	0.000134	0.197013
Pd	Pd42	0.665501	0.250625	0.197511
Pd	Pd43	0.666274	0.499575	0.197301
Pd	Pd44	0.666157	0.749982	0.196709
Pd	Pd45	0.915468	0.125154	0.196996
Pd	Pd46	0.916817	0.375033	0.196896
Pd	Pd47	0.916738	0.624398	0.196935
Pd	Pd48	0.915727	0.874920	0.197001
Pd	Pd49	0.832057	0.999424	0.297169
Pd	Pd50	0.832143	0.750250	0.296997
Pd	Pd51	0.832503	0.499764	0.297098
Pd	Pd52	0.831490	0.249124	0.297135
Pd	Pd53	0.582367	0.123736	0.297149
Pd	Pd54	0.581855	0.874807	0.297268
Pd	Pd55	0.584556	0.626863	0.296027
Pd	Pd56	0.582989	0.373142	0.299281
Pd	Pd57	0.332180	0.999356	0.297064
Pd	Pd58	0.331345	0.751806	0.296890
Pd	Pd59	0.330724	0.498475	0.301632
Pd	Pd60	0.331040	0.246389	0.296984
Pd	Pd61	0.081356	0.124014	0.297006
Pd	Pd62	0.081724	0.874746	0.297110
Pd	Pd63	0.080940	0.625684	0.297294
Pd	Pd64	0.079583	0.373449	0.297195
C	C65	0.366249	0.499455	0.401163
O	O66	0.437914	0.601755	0.418724
H	H67	0.400332	0.421097	0.427296
H	H68	0.250656	0.506423	0.399996
H	H69	0.401316	0.672738	0.396896
H	H70	0.446997	0.439378	0.351605

Transition state of R21 CCO* + H* = CHCO* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000

Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166818	0.999826	0.196856
Pd	Pd34	0.166244	0.249836	0.196821
Pd	Pd35	0.166840	0.499496	0.198028
Pd	Pd36	0.167706	0.749436	0.197586
Pd	Pd37	0.416633	0.124355	0.196896
Pd	Pd38	0.416266	0.374715	0.197469
Pd	Pd39	0.416423	0.625138	0.197660
Pd	Pd40	0.417048	0.874265	0.197557
Pd	Pd41	0.666694	0.000563	0.196899
Pd	Pd42	0.665035	0.251774	0.198362
Pd	Pd43	0.666163	0.500229	0.197376
Pd	Pd44	0.666898	0.749740	0.197938
Pd	Pd45	0.915804	0.125618	0.196821
Pd	Pd46	0.916185	0.375092	0.196811
Pd	Pd47	0.916853	0.625122	0.196799
Pd	Pd48	0.917096	0.875132	0.196875
Pd	Pd49	0.083253	0.123269	0.296807
Pd	Pd50	0.078304	0.371346	0.297194
Pd	Pd51	0.079151	0.626001	0.297185
Pd	Pd52	0.085294	0.875403	0.297090
Pd	Pd53	0.334163	0.998665	0.297220
Pd	Pd54	0.331006	0.246003	0.297043
Pd	Pd55	0.320503	0.495812	0.298370
Pd	Pd56	0.334250	0.749331	0.300225
Pd	Pd57	0.583228	0.124482	0.297464
Pd	Pd58	0.583718	0.372811	0.299653
Pd	Pd59	0.592854	0.632485	0.298306
Pd	Pd60	0.586005	0.878775	0.297240
Pd	Pd61	0.834790	0.001110	0.297313
Pd	Pd62	0.832724	0.248363	0.297323
Pd	Pd63	0.835331	0.499430	0.297041
Pd	Pd64	0.837489	0.753722	0.297301
C	C65	0.493835	0.508983	0.351490
C	C66	0.516686	0.477374	0.407355
O	O67	0.535606	0.450977	0.456714
H	H68	0.417736	0.618419	0.344835

Transition state of R22 $\text{CHCO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + *$ on Pd(111)


```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.165299      0.999825      0.196669
Pd Pd34     0.165382      0.249803      0.196718
Pd Pd35     0.168256      0.499842      0.198939
Pd Pd36     0.165919      0.749613      0.197056
Pd Pd37     0.415769      0.124613      0.196663
Pd Pd38     0.415818      0.375677      0.198085
Pd Pd39     0.416368      0.624941      0.198090
Pd Pd40     0.415809      0.874450      0.196830
Pd Pd41     0.665380      0.000244      0.196752
Pd Pd42     0.664195      0.251944      0.198680
Pd Pd43     0.666037      0.500320      0.198075
Pd Pd44     0.665756      0.749097      0.197461
Pd Pd45     0.914405      0.125505      0.196863
Pd Pd46     0.916051      0.375036      0.196764

```

Pd	Pd47	0.917284	0.624332	0.197000
Pd	Pd48	0.915367	0.874829	0.196648
Pd	Pd49	0.080360	0.122929	0.296648
Pd	Pd50	0.077547	0.371574	0.297392
Pd	Pd51	0.079143	0.625227	0.297826
Pd	Pd52	0.080964	0.874717	0.296852
Pd	Pd53	0.331206	0.998357	0.296709
Pd	Pd54	0.329241	0.244558	0.296181
Pd	Pd55	0.326313	0.497333	0.301087
Pd	Pd56	0.330478	0.751345	0.297094
Pd	Pd57	0.581519	0.122084	0.297493
Pd	Pd58	0.580979	0.371116	0.300567
Pd	Pd59	0.585570	0.629065	0.300468
Pd	Pd60	0.582130	0.875100	0.296978
Pd	Pd61	0.831364	0.999270	0.297033
Pd	Pd62	0.830435	0.248081	0.297385
Pd	Pd63	0.833171	0.498711	0.296976
Pd	Pd64	0.832641	0.750789	0.296722
C	C65	0.557305	0.562374	0.381261
C	C66	0.470189	0.458177	0.366834
O	O67	0.609683	0.606121	0.424555
H	H68	0.448935	0.394898	0.403203
H	H69	0.305375	0.514991	0.369527

Transition state of R23 $\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + ^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515

Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166952	0.999118	0.196625
Pd	Pd34	0.166986	0.248887	0.196801
Pd	Pd35	0.169633	0.498839	0.198677
Pd	Pd36	0.166180	0.749274	0.196281
Pd	Pd37	0.417859	0.124154	0.196608
Pd	Pd38	0.417038	0.374559	0.197771
Pd	Pd39	0.416550	0.623697	0.197583
Pd	Pd40	0.418021	0.874777	0.196749
Pd	Pd41	0.666888	0.998184	0.197311
Pd	Pd42	0.666575	0.250771	0.198135
Pd	Pd43	0.666394	0.500778	0.198989
Pd	Pd44	0.666064	0.748135	0.198192
Pd	Pd45	0.916243	0.123655	0.196702
Pd	Pd46	0.917992	0.374187	0.196868
Pd	Pd47	0.917749	0.623702	0.196779
Pd	Pd48	0.916178	0.873553	0.196702
Pd	Pd49	0.084669	0.123105	0.296905
Pd	Pd50	0.086401	0.372297	0.297538
Pd	Pd51	0.083984	0.623196	0.297278
Pd	Pd52	0.082788	0.874745	0.296719
Pd	Pd53	0.333089	0.998915	0.296593
Pd	Pd54	0.333933	0.246233	0.296157
Pd	Pd55	0.334515	0.498800	0.302826
Pd	Pd56	0.327375	0.752092	0.294217
Pd	Pd57	0.584885	0.119025	0.297202
Pd	Pd58	0.589126	0.363954	0.298258
Pd	Pd59	0.585812	0.623212	0.301005
Pd	Pd60	0.583879	0.873564	0.300121
Pd	Pd61	0.834904	0.997368	0.297335
Pd	Pd62	0.837868	0.245325	0.297209
Pd	Pd63	0.839067	0.496167	0.296562
Pd	Pd64	0.837180	0.748352	0.296737
C	C65	0.499528	0.640761	0.393528
C	C66	0.476449	0.518553	0.369106
O	O67	0.533433	0.423036	0.388569
H	H68	0.404623	0.694213	0.401877
H	H69	0.580054	0.646084	0.427835
H	H70	0.551310	0.743752	0.350336

Transition state of R24 CCOH* + H* = CHCOH* + * on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.333333 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.333333 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.583333 0.125000 0.000000
Pd Pd10 0.583333 0.375000 0.000000
Pd Pd11 0.583333 0.625000 0.000000
Pd Pd12 0.583333 0.875000 0.000000
Pd Pd13 0.833333 0.000000 0.000000
Pd Pd14 0.833333 0.250000 0.000000
Pd Pd15 0.833333 0.500000 0.000000
Pd Pd16 0.833333 0.750000 0.000000
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.098515
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.098515
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.098515
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.098515
Pd Pd21 0.250000 0.125000 0.098515
Pd Pd22 0.250000 0.375000 0.098515
Pd Pd23 0.250000 0.625000 0.098515
Pd Pd24 0.250000 0.875000 0.098515
Pd Pd25 0.500000 0.000000 0.098515
Pd Pd26 0.500000 0.250000 0.098515
Pd Pd27 0.500000 0.500000 0.098515
Pd Pd28 0.500000 0.750000 0.098515
Pd Pd29 0.750000 0.125000 0.098515
Pd Pd30 0.750000 0.375000 0.098515
Pd Pd31 0.750000 0.625000 0.098515
Pd Pd32 0.750000 0.875000 0.098515
Pd Pd33 0.167748 0.998494 0.196866
Pd Pd34 0.166553 0.248641 0.196685
Pd Pd35 0.164801 0.498134 0.196558
Pd Pd36 0.170269 0.748286 0.198943
Pd Pd37 0.416496 0.122629 0.197030
Pd Pd38 0.417403 0.373370 0.198139
Pd Pd39 0.417104 0.624334 0.197451
Pd Pd40 0.417326 0.871851 0.198848
Pd Pd41 0.667147 0.000867 0.196773
Pd Pd42 0.663742 0.251884 0.199754
Pd Pd43 0.665797 0.498648 0.197764
Pd Pd44 0.669937 0.751070 0.196502
Pd Pd45 0.915776 0.125444 0.196684
Pd Pd46 0.915417 0.373977 0.196612
Pd Pd47 0.916971 0.624631 0.196673
Pd Pd48 0.919753 0.875140 0.196956
Pd Pd49 0.084981 0.119729 0.296545
Pd Pd50 0.077443 0.368174 0.296795
Pd Pd51 0.078435 0.624316 0.297067
Pd Pd52 0.090006 0.872224 0.298007
Pd Pd53 0.336163 0.994008 0.297788

```

Pd	Pd54	0.330620	0.243302	0.296748
Pd	Pd55	0.316045	0.492528	0.295092
Pd	Pd56	0.340277	0.740257	0.307414
Pd	Pd57	0.583026	0.123579	0.297645
Pd	Pd58	0.583799	0.371840	0.309088
Pd	Pd59	0.598690	0.634486	0.294911
Pd	Pd60	0.588830	0.878561	0.297172
Pd	Pd61	0.836232	0.000551	0.297045
Pd	Pd62	0.832390	0.246484	0.297318
Pd	Pd63	0.836329	0.497865	0.296588
Pd	Pd64	0.840539	0.754189	0.297311
C	C65	0.488867	0.516516	0.343165
C	C66	0.421252	0.617203	0.367689
O	O67	0.405678	0.640728	0.425072
H	H68	0.354391	0.717519	0.429371
H	H69	0.576593	0.390355	0.378022

Transition state of R25 $\text{CHCOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + *$ on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515

Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164970	0.999342	0.196798
Pd	Pd34	0.165315	0.249198	0.196728
Pd	Pd35	0.168122	0.498691	0.198722
Pd	Pd36	0.166484	0.749245	0.197386
Pd	Pd37	0.415142	0.124168	0.196819
Pd	Pd38	0.415373	0.374844	0.198389
Pd	Pd39	0.416465	0.623736	0.197612
Pd	Pd40	0.415137	0.873578	0.197987
Pd	Pd41	0.664927	0.999212	0.196751
Pd	Pd42	0.664726	0.250259	0.197066
Pd	Pd43	0.665718	0.500072	0.198113
Pd	Pd44	0.665819	0.748632	0.198255
Pd	Pd45	0.914480	0.124742	0.196658
Pd	Pd46	0.915910	0.374867	0.196838
Pd	Pd47	0.916032	0.624342	0.196595
Pd	Pd48	0.915196	0.874131	0.196860
Pd	Pd49	0.080864	0.123279	0.296645
Pd	Pd50	0.077980	0.371258	0.297283
Pd	Pd51	0.076057	0.624820	0.296241
Pd	Pd52	0.080769	0.875429	0.297138
Pd	Pd53	0.331347	0.999243	0.297196
Pd	Pd54	0.329183	0.246417	0.296989
Pd	Pd55	0.323579	0.496806	0.302756
Pd	Pd56	0.331898	0.751441	0.298876
Pd	Pd57	0.580555	0.123848	0.296935
Pd	Pd58	0.583536	0.370680	0.298555
Pd	Pd59	0.587248	0.627660	0.300088
Pd	Pd60	0.583091	0.877145	0.297362
Pd	Pd61	0.831869	0.000063	0.297009
Pd	Pd62	0.830736	0.247624	0.296963
Pd	Pd63	0.833336	0.498137	0.297275
Pd	Pd64	0.832996	0.751637	0.297646
C	C65	0.471623	0.576397	0.370031
C	C66	0.343212	0.641616	0.367920
O	O67	0.266392	0.660703	0.416844
H	H68	0.519488	0.548873	0.411728
H	H69	0.181881	0.706733	0.405738
H	H70	0.466039	0.446051	0.348166

Transition state of R26 $\text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

```

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165313	0.999702	0.196853
Pd	Pd34	0.166852	0.250202	0.196890
Pd	Pd35	0.169824	0.499770	0.198787
Pd	Pd36	0.164982	0.749391	0.196580
Pd	Pd37	0.416120	0.124845	0.196693
Pd	Pd38	0.418194	0.375094	0.198579
Pd	Pd39	0.416645	0.624554	0.197770
Pd	Pd40	0.416189	0.875406	0.196460
Pd	Pd41	0.666128	0.999513	0.196737
Pd	Pd42	0.666227	0.250634	0.198015
Pd	Pd43	0.667886	0.500414	0.197654
Pd	Pd44	0.665433	0.748338	0.198213
Pd	Pd45	0.915640	0.125026	0.196801
Pd	Pd46	0.917975	0.375316	0.197475
Pd	Pd47	0.916972	0.623563	0.197630
Pd	Pd48	0.915098	0.873940	0.196881
Pd	Pd49	0.082726	0.124170	0.296781
Pd	Pd50	0.085413	0.374996	0.297618
Pd	Pd51	0.082367	0.625784	0.297761
Pd	Pd52	0.081179	0.875398	0.297010
Pd	Pd53	0.332075	0.000255	0.296899
Pd	Pd54	0.331946	0.248162	0.296701
Pd	Pd55	0.334262	0.502012	0.302984
Pd	Pd56	0.328470	0.754939	0.295667
Pd	Pd57	0.582627	0.122026	0.296907
Pd	Pd58	0.586043	0.370902	0.298834
Pd	Pd59	0.578662	0.628346	0.301041
Pd	Pd60	0.581921	0.875588	0.297221

Pd	Pd61	0.832572	0.998976	0.297139
Pd	Pd62	0.836240	0.247180	0.297190
Pd	Pd63	0.835151	0.499831	0.299388
Pd	Pd64	0.831493	0.749589	0.297209
C	C65	0.562089	0.440956	0.388472
C	C66	0.472730	0.543985	0.368184
O	O67	0.424549	0.614307	0.412733
H	H68	0.639228	0.470496	0.421521
H	H69	0.504837	0.360600	0.404539
H	H70	0.369466	0.681874	0.395140
H	H71	0.695930	0.421323	0.351430

Transition state of R27 CCHO* + H* = CHCHO* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515

Pd	Pd33	0.165677	0.999976	0.196806
Pd	Pd34	0.166530	0.250493	0.196869
Pd	Pd35	0.169045	0.500077	0.198372
Pd	Pd36	0.166514	0.749509	0.196899
Pd	Pd37	0.416128	0.124846	0.196750
Pd	Pd38	0.417451	0.374736	0.197604
Pd	Pd39	0.417448	0.625119	0.197695
Pd	Pd40	0.416300	0.875060	0.196799
Pd	Pd41	0.666224	0.000081	0.196768
Pd	Pd42	0.665975	0.250741	0.198032
Pd	Pd43	0.667755	0.500319	0.197591
Pd	Pd44	0.666346	0.749615	0.197979
Pd	Pd45	0.915856	0.125519	0.196670
Pd	Pd46	0.917152	0.375879	0.197579
Pd	Pd47	0.917061	0.624204	0.197682
Pd	Pd48	0.916020	0.874592	0.196694
Pd	Pd49	0.082635	0.124239	0.296808
Pd	Pd50	0.083187	0.374569	0.297392
Pd	Pd51	0.082998	0.625662	0.297422
Pd	Pd52	0.082581	0.875877	0.296921
Pd	Pd53	0.332538	0.000052	0.296876
Pd	Pd54	0.330752	0.246683	0.297084
Pd	Pd55	0.332521	0.499539	0.299849
Pd	Pd56	0.330500	0.753369	0.297131
Pd	Pd57	0.582982	0.122920	0.297183
Pd	Pd58	0.584879	0.367587	0.299554
Pd	Pd59	0.583986	0.633425	0.299924
Pd	Pd60	0.582866	0.877299	0.297387
Pd	Pd61	0.833366	0.000039	0.297033
Pd	Pd62	0.835114	0.247741	0.297017
Pd	Pd63	0.834131	0.500415	0.300005
Pd	Pd64	0.834561	0.752321	0.297133
C	C65	0.505900	0.502806	0.351313
C	C66	0.461268	0.500880	0.413997
O	O67	0.483745	0.414438	0.446650
H	H68	0.403255	0.583740	0.428505
H	H69	0.648794	0.482389	0.349045

Transition state of R28 CHCHO* + H* = CH₂CHO* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
 Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
 Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
 Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
 Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
 Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000

Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165066	0.000521	0.196726
Pd	Pd34	0.165670	0.250310	0.197146
Pd	Pd35	0.167809	0.499881	0.198817
Pd	Pd36	0.166338	0.750333	0.197849
Pd	Pd37	0.415790	0.125292	0.196641
Pd	Pd38	0.415773	0.375442	0.197422
Pd	Pd39	0.415294	0.624530	0.198253
Pd	Pd40	0.414718	0.874510	0.197468
Pd	Pd41	0.665239	0.999424	0.196526
Pd	Pd42	0.666134	0.250540	0.196432
Pd	Pd43	0.666523	0.500497	0.197389
Pd	Pd44	0.663973	0.747643	0.198784
Pd	Pd45	0.915365	0.125239	0.196720
Pd	Pd46	0.917247	0.375765	0.197151
Pd	Pd47	0.916673	0.625077	0.196854
Pd	Pd48	0.914549	0.874422	0.196722
Pd	Pd49	0.080512	0.125636	0.297161
Pd	Pd50	0.078671	0.374385	0.298298
Pd	Pd51	0.077732	0.626642	0.297432
Pd	Pd52	0.079489	0.877351	0.296576
Pd	Pd53	0.331205	0.003170	0.296530
Pd	Pd54	0.331149	0.247977	0.296966
Pd	Pd55	0.328188	0.498875	0.300630
Pd	Pd56	0.329364	0.756359	0.298732
Pd	Pd57	0.582568	0.125481	0.296646
Pd	Pd58	0.585394	0.371469	0.295632
Pd	Pd59	0.582993	0.625872	0.300787
Pd	Pd60	0.583524	0.878612	0.296553
Pd	Pd61	0.831850	0.000986	0.296875
Pd	Pd62	0.832178	0.249618	0.296895
Pd	Pd63	0.832300	0.500377	0.297284
Pd	Pd64	0.831629	0.751495	0.297263
C	C65	0.463768	0.539409	0.368291
C	C66	0.450961	0.651144	0.400810

O	O67	0.364316	0.737214	0.390664
H	H68	0.518561	0.466957	0.392426
H	H69	0.521549	0.662781	0.439075
H	H70	0.293678	0.478531	0.367796

Transition state of R29 CH₂CHO* + H* = CH₃CHO* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166991	0.999965	0.197196
Pd	Pd34	0.167077	0.249406	0.196842
Pd	Pd35	0.166327	0.499361	0.196405
Pd	Pd36	0.167776	0.749718	0.198043
Pd	Pd37	0.417276	0.123885	0.197142
Pd	Pd38	0.416743	0.374440	0.196689
Pd	Pd39	0.415268	0.626666	0.198984

Pd	Pd40	0.416258	0.874585	0.197996
Pd	Pd41	0.667488	0.999471	0.196447
Pd	Pd42	0.666871	0.249952	0.196826
Pd	Pd43	0.664623	0.501262	0.198498
Pd	Pd44	0.666305	0.748869	0.197589
Pd	Pd45	0.916978	0.124931	0.196841
Pd	Pd46	0.915938	0.374883	0.196722
Pd	Pd47	0.916281	0.624405	0.196648
Pd	Pd48	0.917710	0.874414	0.196707
Pd	Pd49	0.835565	0.000669	0.296813
Pd	Pd50	0.835733	0.749463	0.296467
Pd	Pd51	0.835092	0.496716	0.296927
Pd	Pd52	0.834575	0.248792	0.297305
Pd	Pd53	0.584624	0.124648	0.297040
Pd	Pd54	0.589332	0.877520	0.295420
Pd	Pd55	0.587712	0.621017	0.300338
Pd	Pd56	0.584257	0.371259	0.297108
Pd	Pd57	0.333644	0.001102	0.298295
Pd	Pd58	0.334677	0.746037	0.302569
Pd	Pd59	0.331889	0.494402	0.295671
Pd	Pd60	0.333478	0.247847	0.297063
Pd	Pd61	0.083445	0.124664	0.297303
Pd	Pd62	0.081710	0.874964	0.297112
Pd	Pd63	0.080946	0.621950	0.296320
Pd	Pd64	0.083383	0.372840	0.296669
C	C65	0.340639	0.791505	0.401474
C	C66	0.407970	0.674059	0.392162
O	O67	0.543253	0.661359	0.389112
H	H68	0.410981	0.862717	0.417763
H	H69	0.236985	0.788813	0.422182
H	H70	0.342646	0.591262	0.398417
H	H71	0.299561	0.868933	0.350403

Transition state of R30 CCH₂O* + H* = CHCH₂O* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000

Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166494	0.999423	0.196842
Pd	Pd34	0.167482	0.249254	0.196657
Pd	Pd35	0.166592	0.499213	0.196620
Pd	Pd36	0.168942	0.749595	0.199117
Pd	Pd37	0.416738	0.123103	0.196970
Pd	Pd38	0.418580	0.373201	0.197511
Pd	Pd39	0.416713	0.624996	0.196557
Pd	Pd40	0.415693	0.872498	0.199361
Pd	Pd41	0.666084	0.000435	0.196959
Pd	Pd42	0.665138	0.251352	0.199983
Pd	Pd43	0.667296	0.498131	0.197200
Pd	Pd44	0.667744	0.750333	0.196717
Pd	Pd45	0.915491	0.125707	0.196923
Pd	Pd46	0.916964	0.374287	0.196897
Pd	Pd47	0.917352	0.624486	0.196763
Pd	Pd48	0.917434	0.874930	0.196839
Pd	Pd49	0.083555	0.122229	0.296522
Pd	Pd50	0.082107	0.371536	0.296783
Pd	Pd51	0.082958	0.624170	0.296890
Pd	Pd52	0.084478	0.874495	0.297401
Pd	Pd53	0.334800	0.998272	0.297345
Pd	Pd54	0.331312	0.245001	0.296981
Pd	Pd55	0.327347	0.494912	0.294920
Pd	Pd56	0.337225	0.746009	0.304435
Pd	Pd57	0.583795	0.124060	0.297974
Pd	Pd58	0.583665	0.374337	0.306804
Pd	Pd59	0.590852	0.627060	0.294906
Pd	Pd60	0.586243	0.875327	0.297132
Pd	Pd61	0.834034	0.999785	0.296930
Pd	Pd62	0.833706	0.248354	0.297892
Pd	Pd63	0.838017	0.499012	0.296992
Pd	Pd64	0.836306	0.750749	0.297011
C	C65	0.487583	0.518136	0.348045
C	C66	0.443681	0.585361	0.403244
O	O67	0.362821	0.689249	0.388938
H	H68	0.380983	0.523619	0.431663
H	H69	0.539443	0.611961	0.428116
H	H70	0.574795	0.394574	0.375864

Transition state of R31 $\text{CHCH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + ^*$ on Pd(111)

data_					
_cell_length_a		9.514851			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		22.764721			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'				
loop_					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166177	0.001014	0.196722	
Pd	Pd34	0.167131	0.251124	0.196905	
Pd	Pd35	0.169965	0.500790	0.198434	
Pd	Pd36	0.168297	0.750840	0.197917	
Pd	Pd37	0.416936	0.126189	0.196623	
Pd	Pd38	0.417248	0.376052	0.197408	
Pd	Pd39	0.418419	0.625768	0.198676	
Pd	Pd40	0.416776	0.875853	0.197647	
Pd	Pd41	0.666416	0.999853	0.196872	
Pd	Pd42	0.667504	0.250558	0.196240	
Pd	Pd43	0.668102	0.500920	0.197284	
Pd	Pd44	0.665910	0.749175	0.198830	

Pd	Pd45	0.916376	0.125512	0.196734
Pd	Pd46	0.918356	0.376406	0.197179
Pd	Pd47	0.917947	0.625510	0.196773
Pd	Pd48	0.915737	0.874675	0.196730
Pd	Pd49	0.833281	0.002231	0.296885
Pd	Pd50	0.833243	0.752456	0.297331
Pd	Pd51	0.835930	0.500446	0.297441
Pd	Pd52	0.834869	0.251346	0.296905
Pd	Pd53	0.584126	0.126906	0.296606
Pd	Pd54	0.583593	0.879975	0.297707
Pd	Pd55	0.583463	0.626797	0.300802
Pd	Pd56	0.586633	0.371840	0.295413
Pd	Pd57	0.332651	0.005458	0.296514
Pd	Pd58	0.326697	0.758160	0.297993
Pd	Pd59	0.334845	0.502679	0.301361
Pd	Pd60	0.333264	0.251993	0.297202
Pd	Pd61	0.083033	0.128112	0.297008
Pd	Pd62	0.079768	0.879525	0.296587
Pd	Pd63	0.081205	0.627053	0.296772
Pd	Pd64	0.085010	0.377135	0.297664
C	C65	0.462562	0.558768	0.369737
C	C66	0.389429	0.648962	0.409250
O	O67	0.352246	0.760747	0.384797
H	H68	0.497310	0.478109	0.394649
H	H69	0.457438	0.667367	0.448079
H	H70	0.294892	0.600678	0.426478
H	H71	0.627847	0.614517	0.367783

Transition state of R32 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165139	0.000673	0.196748
Pd	Pd34	0.164905	0.250679	0.196809
Pd	Pd35	0.168002	0.500547	0.199154
Pd	Pd36	0.167699	0.751092	0.198552
Pd	Pd37	0.415332	0.125577	0.196677
Pd	Pd38	0.415347	0.375403	0.196968
Pd	Pd39	0.415145	0.625573	0.197141
Pd	Pd40	0.416373	0.875969	0.197852
Pd	Pd41	0.664793	0.998950	0.197400
Pd	Pd42	0.665548	0.249706	0.196480
Pd	Pd43	0.666028	0.499680	0.196487
Pd	Pd44	0.664697	0.748183	0.199116
Pd	Pd45	0.914721	0.124825	0.196741
Pd	Pd46	0.916237	0.375566	0.196805
Pd	Pd47	0.916520	0.625693	0.196626
Pd	Pd48	0.914952	0.874796	0.196766
Pd	Pd49	0.829731	0.002361	0.297292
Pd	Pd50	0.831286	0.752812	0.297697
Pd	Pd51	0.830903	0.500514	0.296432
Pd	Pd52	0.831462	0.250808	0.296821
Pd	Pd53	0.580529	0.126157	0.296964
Pd	Pd54	0.580707	0.879676	0.300071
Pd	Pd55	0.583949	0.628072	0.296278
Pd	Pd56	0.583341	0.371721	0.295270
Pd	Pd57	0.328373	0.005821	0.297015
Pd	Pd58	0.324679	0.756468	0.300149
Pd	Pd59	0.325469	0.502895	0.298987
Pd	Pd60	0.329669	0.251527	0.296650
Pd	Pd61	0.079296	0.127500	0.297000
Pd	Pd62	0.076068	0.879325	0.296886
Pd	Pd63	0.075648	0.627514	0.297353
Pd	Pd64	0.078927	0.376213	0.297568
C	C65	0.348705	0.737350	0.395585
C	C66	0.441989	0.631229	0.412961
O	O67	0.472928	0.546707	0.366869
H	H68	0.364720	0.818120	0.423177
H	H69	0.235929	0.714560	0.395706
H	H70	0.543447	0.664215	0.430138
H	H71	0.389280	0.579086	0.448244
H	H72	0.447205	0.807498	0.348541

Transition state of R33 CCHOH* + H* = CHCHOH* + * on Pd(111)
data_

_cell_length_a	9.514851		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.164951	0.000326	0.196745
Pd Pd34	0.164888	0.250956	0.196972
Pd Pd35	0.168550	0.500259	0.199308
Pd Pd36	0.165257	0.749642	0.196913
Pd Pd37	0.415351	0.125188	0.196768
Pd Pd38	0.416136	0.375414	0.197612
Pd Pd39	0.416432	0.625264	0.197792
Pd Pd40	0.415223	0.875348	0.196747
Pd Pd41	0.665323	0.000045	0.196741
Pd Pd42	0.665507	0.250133	0.197796
Pd Pd43	0.666904	0.499847	0.197490
Pd Pd44	0.665046	0.749614	0.197932
Pd Pd45	0.915244	0.125566	0.196762
Pd Pd46	0.915533	0.376426	0.198007
Pd Pd47	0.915865	0.624198	0.197793

Pd	Pd48	0.915085	0.874803	0.196677
Pd	Pd49	0.080651	0.124455	0.297098
Pd	Pd50	0.077705	0.373993	0.297773
Pd	Pd51	0.078137	0.626291	0.297642
Pd	Pd52	0.080903	0.876478	0.296843
Pd	Pd53	0.330367	0.000315	0.296907
Pd	Pd54	0.328402	0.247205	0.296672
Pd	Pd55	0.323508	0.500340	0.301490
Pd	Pd56	0.328716	0.753173	0.296726
Pd	Pd57	0.580888	0.122565	0.297476
Pd	Pd58	0.582674	0.366237	0.298270
Pd	Pd59	0.584337	0.632994	0.298661
Pd	Pd60	0.581091	0.877737	0.297123
Pd	Pd61	0.831389	0.000372	0.297175
Pd	Pd62	0.832217	0.247034	0.297419
Pd	Pd63	0.829931	0.499814	0.301613
Pd	Pd64	0.833722	0.754011	0.297201
C	C65	0.512526	0.496876	0.349230
C	C66	0.413436	0.499943	0.394935
O	O67	0.394790	0.603221	0.427245
H	H68	0.372098	0.415258	0.413530
H	H69	0.319416	0.590334	0.455604
H	H70	0.660987	0.538695	0.351575

Transition state of R34 CHCHOH* + H* = CH₂CHOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515

Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165523	0.000581	0.196689
Pd	Pd34	0.166148	0.250657	0.196894
Pd	Pd35	0.169388	0.500768	0.198384
Pd	Pd36	0.166232	0.750712	0.196572
Pd	Pd37	0.416265	0.125603	0.196726
Pd	Pd38	0.416517	0.375329	0.197650
Pd	Pd39	0.417479	0.625341	0.198209
Pd	Pd40	0.416420	0.876005	0.196745
Pd	Pd41	0.665827	0.000360	0.196966
Pd	Pd42	0.665867	0.252001	0.197845
Pd	Pd43	0.666406	0.501064	0.198145
Pd	Pd44	0.665198	0.749090	0.199230
Pd	Pd45	0.915452	0.125617	0.196748
Pd	Pd46	0.917710	0.376146	0.196938
Pd	Pd47	0.916942	0.625656	0.196855
Pd	Pd48	0.914688	0.874857	0.197018
Pd	Pd49	0.082118	0.126576	0.296900
Pd	Pd50	0.083502	0.376390	0.297435
Pd	Pd51	0.081910	0.627452	0.296901
Pd	Pd52	0.081748	0.877951	0.296593
Pd	Pd53	0.331965	0.002458	0.296815
Pd	Pd54	0.331034	0.249591	0.296889
Pd	Pd55	0.332469	0.501726	0.300770
Pd	Pd56	0.328968	0.755652	0.295990
Pd	Pd57	0.582967	0.125501	0.297042
Pd	Pd58	0.583786	0.370765	0.299491
Pd	Pd59	0.582141	0.630879	0.302271
Pd	Pd60	0.582454	0.880147	0.297999
Pd	Pd61	0.832878	0.001914	0.297298
Pd	Pd62	0.833903	0.250627	0.296954
Pd	Pd63	0.835226	0.500758	0.296256
Pd	Pd64	0.833976	0.752859	0.297867
C	C65	0.477961	0.538340	0.367431
C	C66	0.549404	0.427720	0.386142
O	O67	0.468148	0.349225	0.419202
H	H68	0.407285	0.583066	0.399116
H	H69	0.660588	0.432908	0.399318
H	H70	0.523000	0.276248	0.427895
H	H71	0.606619	0.653152	0.370172

Transition state of R35 $\text{CH}_2\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$ on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000

```

```

_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd      Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd      Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd      Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd      Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd      Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd      Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd      Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd      Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd      Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd      Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd      Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd      Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd      Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd      Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd      Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd      Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd      Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd      Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd      Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd      Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd      Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd      Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd      Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd      Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd      Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd      Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd      Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd      Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd      Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd      Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd      Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd      Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd      Pd33     0.165830      0.999730      0.197012
Pd      Pd34     0.166921      0.249673      0.196837
Pd      Pd35     0.166441      0.499383      0.196354
Pd      Pd36     0.166092      0.749554      0.196815
Pd      Pd37     0.416294      0.124372      0.196890
Pd      Pd38     0.418731      0.374394      0.198576
Pd      Pd39     0.416856      0.624669      0.197686
Pd      Pd40     0.416277      0.874611      0.196957
Pd      Pd41     0.666204      0.999524      0.197008
Pd      Pd42     0.665716      0.250599      0.198497
Pd      Pd43     0.666108      0.499924      0.197622
Pd      Pd44     0.665312      0.748393      0.198307
Pd      Pd45     0.915513      0.124998      0.197049
Pd      Pd46     0.916182      0.374289      0.196945
Pd      Pd47     0.915784      0.624221      0.196852
Pd      Pd48     0.915792      0.874603      0.196819
Pd      Pd49     0.082146      0.123521      0.297048
Pd      Pd50     0.082906      0.373173      0.296815
Pd      Pd51     0.082110      0.625482      0.296688
Pd      Pd52     0.082532      0.875085      0.297177

```

Pd	Pd53	0.332412	0.998936	0.296929
Pd	Pd54	0.331259	0.248220	0.297073
Pd	Pd55	0.327449	0.499837	0.295863
Pd	Pd56	0.331496	0.750126	0.296937
Pd	Pd57	0.581841	0.122885	0.297145
Pd	Pd58	0.581112	0.375856	0.301773
Pd	Pd59	0.581213	0.624807	0.301998
Pd	Pd60	0.582615	0.874462	0.297517
Pd	Pd61	0.831996	0.999216	0.297441
Pd	Pd62	0.833805	0.247525	0.297728
Pd	Pd63	0.836107	0.499643	0.296980
Pd	Pd64	0.833606	0.750429	0.296546
C	C65	0.611503	0.449964	0.395537
C	C66	0.588984	0.581992	0.391976
O	O67	0.695584	0.648606	0.418005
H	H68	0.516207	0.396050	0.403243
H	H69	0.696225	0.423959	0.425763
H	H70	0.481733	0.614074	0.401847
H	H71	0.678671	0.735286	0.410781
H	H72	0.715544	0.408251	0.349350

Transition state of R36 CCH₂OH* + H* = CHCH₂OH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515

Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166642	0.001133	0.196768
Pd	Pd34	0.167430	0.250970	0.197126
Pd	Pd35	0.168844	0.500992	0.197808
Pd	Pd36	0.167640	0.751135	0.196824
Pd	Pd37	0.417214	0.126153	0.196995
Pd	Pd38	0.417419	0.375482	0.197463
Pd	Pd39	0.417775	0.626040	0.197778
Pd	Pd40	0.417493	0.876282	0.196870
Pd	Pd41	0.666805	0.000723	0.197034
Pd	Pd42	0.666898	0.251871	0.197809
Pd	Pd43	0.667644	0.501118	0.197639
Pd	Pd44	0.666180	0.749216	0.199285
Pd	Pd45	0.916388	0.126366	0.196866
Pd	Pd46	0.918039	0.376363	0.197038
Pd	Pd47	0.918075	0.626076	0.197034
Pd	Pd48	0.916125	0.875500	0.196909
Pd	Pd49	0.083918	0.126526	0.296998
Pd	Pd50	0.085007	0.376085	0.297330
Pd	Pd51	0.085468	0.627975	0.297132
Pd	Pd52	0.084732	0.878469	0.296720
Pd	Pd53	0.334825	0.002491	0.296832
Pd	Pd54	0.332891	0.249343	0.297783
Pd	Pd55	0.332142	0.502475	0.299258
Pd	Pd56	0.332447	0.755605	0.296951
Pd	Pd57	0.584906	0.127461	0.297269
Pd	Pd58	0.586831	0.375351	0.299369
Pd	Pd59	0.587701	0.631401	0.301572
Pd	Pd60	0.585019	0.879730	0.297752
Pd	Pd61	0.834844	0.002598	0.297198
Pd	Pd62	0.835057	0.251813	0.297334
Pd	Pd63	0.839479	0.502003	0.297021
Pd	Pd64	0.837181	0.753910	0.297608
C	C65	0.498509	0.497902	0.351888
C	C66	0.475134	0.464709	0.415426
O	O67	0.397609	0.352988	0.417742
H	H68	0.416815	0.539502	0.437107
H	H69	0.578599	0.455451	0.437275
H	H70	0.386309	0.329089	0.458653
H	H71	0.580339	0.618223	0.371228

Transition state of R37 CHCH₂OH* + H* = CH₂CH₂OH* + * on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_

```

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164460	0.000094	0.196761
Pd	Pd34	0.165277	0.250148	0.197259
Pd	Pd35	0.167476	0.500166	0.199238
Pd	Pd36	0.165301	0.750217	0.197124
Pd	Pd37	0.415195	0.125529	0.196835
Pd	Pd38	0.415063	0.375125	0.197356
Pd	Pd39	0.414835	0.624320	0.198481
Pd	Pd40	0.414671	0.874874	0.196924
Pd	Pd41	0.664739	0.999400	0.196622
Pd	Pd42	0.666094	0.249824	0.196340
Pd	Pd43	0.665816	0.500357	0.197362
Pd	Pd44	0.663543	0.747812	0.198673
Pd	Pd45	0.915003	0.124585	0.196797
Pd	Pd46	0.916873	0.375522	0.197117
Pd	Pd47	0.915683	0.624961	0.196945
Pd	Pd48	0.913623	0.873997	0.196921
Pd	Pd49	0.829568	0.000131	0.297179
Pd	Pd50	0.827971	0.750283	0.297715
Pd	Pd51	0.830669	0.499566	0.297294
Pd	Pd52	0.831460	0.249233	0.296796
Pd	Pd53	0.581096	0.124252	0.296902
Pd	Pd54	0.580680	0.876796	0.296987
Pd	Pd55	0.579778	0.625002	0.301378

Pd	Pd56	0.584314	0.370609	0.295018
Pd	Pd57	0.329402	0.002378	0.296480
Pd	Pd58	0.324401	0.755309	0.296846
Pd	Pd59	0.329020	0.502172	0.301723
Pd	Pd60	0.330416	0.248703	0.297542
Pd	Pd61	0.079396	0.125672	0.297123
Pd	Pd62	0.076703	0.877098	0.296678
Pd	Pd63	0.075511	0.626597	0.297585
Pd	Pd64	0.079311	0.375071	0.298104
C	C65	0.467376	0.550488	0.369909
C	C66	0.432483	0.639823	0.418502
O	O67	0.371418	0.753932	0.400606
H	H68	0.526354	0.474219	0.389919
H	H69	0.530112	0.657500	0.443306
H	H70	0.355945	0.599100	0.449063
H	H71	0.448559	0.809777	0.390058
H	H72	0.321795	0.465069	0.368826

Transition state of R38 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515

Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165506	0.000083	0.196917
Pd	Pd34	0.165001	0.249783	0.196981
Pd	Pd35	0.165996	0.499756	0.197433
Pd	Pd36	0.168318	0.750240	0.199219
Pd	Pd37	0.415347	0.125092	0.196811
Pd	Pd38	0.414792	0.375693	0.197384
Pd	Pd39	0.415125	0.625198	0.197649
Pd	Pd40	0.415809	0.874611	0.198048
Pd	Pd41	0.664711	0.999260	0.197414
Pd	Pd42	0.664964	0.249500	0.196878
Pd	Pd43	0.665532	0.499753	0.196602
Pd	Pd44	0.666011	0.750406	0.196866
Pd	Pd45	0.914742	0.124616	0.197003
Pd	Pd46	0.914991	0.374708	0.196902
Pd	Pd47	0.916148	0.625191	0.196716
Pd	Pd48	0.916079	0.874844	0.196875
Pd	Pd49	0.829555	0.000168	0.297242
Pd	Pd50	0.831045	0.749842	0.297140
Pd	Pd51	0.830402	0.498899	0.297000
Pd	Pd52	0.830204	0.249444	0.297308
Pd	Pd53	0.580571	0.124966	0.297363
Pd	Pd54	0.581792	0.875521	0.298920
Pd	Pd55	0.584270	0.623247	0.295163
Pd	Pd56	0.581585	0.373803	0.296900
Pd	Pd57	0.329339	0.002685	0.296870
Pd	Pd58	0.327333	0.750577	0.302080
Pd	Pd59	0.329849	0.498109	0.298072
Pd	Pd60	0.330735	0.248962	0.296989
Pd	Pd61	0.079320	0.125224	0.297055
Pd	Pd62	0.077626	0.876300	0.297184
Pd	Pd63	0.077610	0.624189	0.296837
Pd	Pd64	0.079082	0.373911	0.296864
C	C65	0.359745	0.743796	0.398464
C	C66	0.422963	0.628433	0.422805
O	O67	0.345854	0.523672	0.401294
H	H68	0.400983	0.823692	0.421670
H	H69	0.244469	0.745390	0.402264
H	H70	0.535326	0.620473	0.410818
H	H71	0.414295	0.629851	0.471262
H	H72	0.398322	0.450105	0.411172
H	H73	0.459745	0.784597	0.348662

Transition state of R39 CCOO* + H* = CHCOO* + * on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol

```

_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166379	0.999533	0.196829
Pd Pd34	0.167218	0.249234	0.196643
Pd Pd35	0.166033	0.499189	0.196605
Pd Pd36	0.168954	0.749614	0.199034
Pd Pd37	0.416597	0.123221	0.196926
Pd Pd38	0.417921	0.373533	0.197527
Pd Pd39	0.416268	0.625175	0.196662
Pd Pd40	0.415692	0.872558	0.199055
Pd Pd41	0.666038	0.000657	0.196985
Pd Pd42	0.664667	0.251691	0.200085
Pd Pd43	0.666747	0.498593	0.197251
Pd Pd44	0.667619	0.750691	0.196683
Pd Pd45	0.915338	0.125913	0.196959
Pd Pd46	0.916444	0.374401	0.196844
Pd Pd47	0.916960	0.624661	0.196662
Pd Pd48	0.917510	0.875167	0.196796
Pd Pd49	0.083332	0.122019	0.296531
Pd Pd50	0.081150	0.371061	0.296722
Pd Pd51	0.081880	0.624306	0.296760
Pd Pd52	0.084633	0.874445	0.297315
Pd Pd53	0.334424	0.997874	0.297121
Pd Pd54	0.330972	0.244734	0.296997
Pd Pd55	0.325539	0.494628	0.294991
Pd Pd56	0.336223	0.745908	0.304887

Pd	Pd57	0.583334	0.123940	0.298074
Pd	Pd58	0.583666	0.373698	0.306727
Pd	Pd59	0.591835	0.628292	0.294815
Pd	Pd60	0.585849	0.875775	0.297062
Pd	Pd61	0.833851	0.999881	0.296969
Pd	Pd62	0.833151	0.248036	0.297923
Pd	Pd63	0.837627	0.498832	0.296906
Pd	Pd64	0.836429	0.751336	0.296913
C	C65	0.488502	0.517208	0.346445
C	C66	0.444276	0.582923	0.401909
O	O67	0.472464	0.541620	0.450653
O	O68	0.375516	0.684763	0.391679
H	H69	0.573184	0.394103	0.375882

Transition state of R40 $\text{CHCOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COO}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515

Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165167	0.999941	0.196670
Pd	Pd34	0.165838	0.249943	0.197091
Pd	Pd35	0.167530	0.499641	0.198847
Pd	Pd36	0.166469	0.749818	0.197852
Pd	Pd37	0.415513	0.125037	0.196899
Pd	Pd38	0.415785	0.374501	0.197249
Pd	Pd39	0.415398	0.623857	0.198372
Pd	Pd40	0.414843	0.874074	0.197799
Pd	Pd41	0.664939	0.999094	0.196641
Pd	Pd42	0.666279	0.249774	0.196230
Pd	Pd43	0.666122	0.500398	0.197366
Pd	Pd44	0.664284	0.748300	0.198491
Pd	Pd45	0.915391	0.124602	0.196673
Pd	Pd46	0.917011	0.375259	0.197044
Pd	Pd47	0.916208	0.624922	0.196763
Pd	Pd48	0.914523	0.874078	0.196712
Pd	Pd49	0.830810	0.999801	0.296834
Pd	Pd50	0.829369	0.750125	0.297378
Pd	Pd51	0.831619	0.499734	0.297091
Pd	Pd52	0.832048	0.248873	0.296720
Pd	Pd53	0.582242	0.124473	0.296770
Pd	Pd54	0.581888	0.876871	0.297121
Pd	Pd55	0.580436	0.624673	0.300867
Pd	Pd56	0.585458	0.370643	0.295283
Pd	Pd57	0.330820	0.002478	0.296699
Pd	Pd58	0.328180	0.754685	0.298569
Pd	Pd59	0.329759	0.499153	0.300474
Pd	Pd60	0.331175	0.248253	0.297673
Pd	Pd61	0.080391	0.125222	0.296915
Pd	Pd62	0.078222	0.876580	0.296377
Pd	Pd63	0.076970	0.626090	0.297219
Pd	Pd64	0.079257	0.374321	0.297904
C	C65	0.463941	0.550792	0.368323
C	C66	0.409180	0.648423	0.409382
O	O67	0.431458	0.637694	0.462444
O	O68	0.339030	0.741119	0.387457
H	H69	0.525107	0.483129	0.393257
H	H70	0.326159	0.452984	0.366711

Transition state of R41 $\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COO}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000

Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167187	0.999478	0.197229
Pd	Pd34	0.167213	0.248744	0.196720
Pd	Pd35	0.167319	0.498863	0.197334
Pd	Pd36	0.166543	0.749415	0.197369
Pd	Pd37	0.417060	0.123742	0.197143
Pd	Pd38	0.415827	0.375641	0.198736
Pd	Pd39	0.415038	0.626310	0.198750
Pd	Pd40	0.416668	0.874663	0.197560
Pd	Pd41	0.667427	0.999027	0.196444
Pd	Pd42	0.666185	0.249696	0.196650
Pd	Pd43	0.664784	0.500881	0.198576
Pd	Pd44	0.666385	0.748698	0.197459
Pd	Pd45	0.916704	0.124314	0.196669
Pd	Pd46	0.916113	0.374151	0.196559
Pd	Pd47	0.916321	0.623579	0.196440
Pd	Pd48	0.917375	0.873927	0.196709
Pd	Pd49	0.834723	0.999399	0.296867
Pd	Pd50	0.835351	0.748387	0.296560
Pd	Pd51	0.836073	0.495004	0.296895
Pd	Pd52	0.834616	0.247304	0.297014
Pd	Pd53	0.584797	0.122730	0.297013
Pd	Pd54	0.588483	0.876016	0.295866
Pd	Pd55	0.589775	0.620089	0.299134
Pd	Pd56	0.585984	0.368788	0.297489
Pd	Pd57	0.333235	0.999794	0.298837
Pd	Pd58	0.333338	0.748692	0.299365
Pd	Pd59	0.333512	0.492774	0.299386
Pd	Pd60	0.333434	0.244659	0.297235
Pd	Pd61	0.082813	0.123311	0.297233
Pd	Pd62	0.080049	0.874603	0.297346
Pd	Pd63	0.079823	0.621410	0.295852

Pd	Pd64	0.083247	0.371053	0.296428
C	C65	0.323186	0.767646	0.398733
C	C66	0.400035	0.650880	0.389547
O	O67	0.536790	0.653966	0.387400
O	O68	0.327726	0.550265	0.387466
H	H69	0.386341	0.838098	0.420056
H	H70	0.217184	0.757328	0.416545
H	H71	0.283820	0.857329	0.349607

Transition state of R42 CCOOH* + H* = CHCOOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166246	0.000845	0.196770
Pd	Pd34	0.167295	0.250795	0.197158
Pd	Pd35	0.168501	0.500700	0.197900

Pd	Pd36	0.167373	0.750801	0.196887
Pd	Pd37	0.416893	0.125899	0.197011
Pd	Pd38	0.417447	0.375218	0.197526
Pd	Pd39	0.417780	0.626029	0.197641
Pd	Pd40	0.417176	0.876006	0.196927
Pd	Pd41	0.666494	0.000458	0.197080
Pd	Pd42	0.666474	0.251578	0.198133
Pd	Pd43	0.667489	0.500713	0.197568
Pd	Pd44	0.666120	0.749057	0.199229
Pd	Pd45	0.916048	0.126213	0.196881
Pd	Pd46	0.917591	0.376044	0.197051
Pd	Pd47	0.917812	0.625702	0.197068
Pd	Pd48	0.915916	0.875168	0.196953
Pd	Pd49	0.083578	0.126005	0.296912
Pd	Pd50	0.083591	0.375336	0.297350
Pd	Pd51	0.083676	0.627912	0.297305
Pd	Pd52	0.084161	0.878089	0.296747
Pd	Pd53	0.334127	0.002064	0.296797
Pd	Pd54	0.332511	0.249325	0.297960
Pd	Pd55	0.329005	0.502530	0.298072
Pd	Pd56	0.331836	0.754964	0.297073
Pd	Pd57	0.584196	0.126523	0.297427
Pd	Pd58	0.586622	0.374341	0.299805
Pd	Pd59	0.587083	0.631199	0.301379
Pd	Pd60	0.584408	0.878890	0.297778
Pd	Pd61	0.834274	0.002056	0.297206
Pd	Pd62	0.834622	0.250884	0.297478
Pd	Pd63	0.838346	0.501449	0.297141
Pd	Pd64	0.836438	0.753619	0.297665
C	C65	0.496432	0.497959	0.350490
C	C66	0.450636	0.464604	0.410870
O	O67	0.412436	0.361463	0.424215
O	O68	0.452358	0.559182	0.449411
H	H69	0.416220	0.527767	0.486812
H	H70	0.589563	0.614956	0.370609

Transition state of R43 $\text{CHCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COOH}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164795	0.000442	0.196689
Pd	Pd34	0.165556	0.250262	0.197217
Pd	Pd35	0.167567	0.499936	0.198949
Pd	Pd36	0.165674	0.750299	0.197425
Pd	Pd37	0.415550	0.125307	0.196756
Pd	Pd38	0.415476	0.375159	0.197372
Pd	Pd39	0.414830	0.624506	0.198431
Pd	Pd40	0.414482	0.874513	0.197435
Pd	Pd41	0.664810	0.999196	0.196611
Pd	Pd42	0.666187	0.250024	0.196288
Pd	Pd43	0.666037	0.500373	0.197378
Pd	Pd44	0.663580	0.747734	0.198915
Pd	Pd45	0.915179	0.125017	0.196710
Pd	Pd46	0.916980	0.375713	0.197169
Pd	Pd47	0.915891	0.625046	0.196840
Pd	Pd48	0.913940	0.874277	0.196744
Pd	Pd49	0.830884	0.000690	0.296949
Pd	Pd50	0.829808	0.751086	0.297509
Pd	Pd51	0.831052	0.500088	0.297388
Pd	Pd52	0.831772	0.249370	0.296844
Pd	Pd53	0.581969	0.125056	0.296761
Pd	Pd54	0.582201	0.878030	0.297008
Pd	Pd55	0.580910	0.625848	0.300790
Pd	Pd56	0.585061	0.370967	0.295242
Pd	Pd57	0.330379	0.003192	0.296571
Pd	Pd58	0.327487	0.756353	0.298213
Pd	Pd59	0.328643	0.499935	0.301014
Pd	Pd60	0.330713	0.248316	0.297345
Pd	Pd61	0.079861	0.125719	0.297107
Pd	Pd62	0.078120	0.877274	0.296369
Pd	Pd63	0.076254	0.626514	0.297164
Pd	Pd64	0.078646	0.374718	0.298141
C	C65	0.463720	0.547015	0.368824
C	C66	0.425652	0.649531	0.406747
O	O67	0.344538	0.735874	0.393814
O	O68	0.485981	0.647176	0.460447

H	H69	0.458376	0.722347	0.480632
H	H70	0.521128	0.476680	0.393225
H	H71	0.307888	0.466484	0.368115

Transition state of R44 CH₂COOH* + H* = CH₃COOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166762	0.999965	0.197275
Pd	Pd34	0.167235	0.249495	0.196936
Pd	Pd35	0.166094	0.499415	0.196303
Pd	Pd36	0.167457	0.749835	0.198189
Pd	Pd37	0.417344	0.123966	0.197169
Pd	Pd38	0.417179	0.374238	0.196588
Pd	Pd39	0.415527	0.626984	0.198999
Pd	Pd40	0.416402	0.874946	0.197776

Pd	Pd41	0.667631	0.999518	0.196500
Pd	Pd42	0.667040	0.249771	0.196930
Pd	Pd43	0.665134	0.500829	0.197952
Pd	Pd44	0.666463	0.748869	0.197385
Pd	Pd45	0.917087	0.124973	0.196944
Pd	Pd46	0.916038	0.374783	0.196842
Pd	Pd47	0.916417	0.624426	0.196789
Pd	Pd48	0.917612	0.874479	0.196921
Pd	Pd49	0.835111	0.000423	0.296918
Pd	Pd50	0.835470	0.749373	0.296717
Pd	Pd51	0.835000	0.497554	0.296976
Pd	Pd52	0.834300	0.249199	0.297415
Pd	Pd53	0.584573	0.124716	0.297140
Pd	Pd54	0.588247	0.876980	0.295492
Pd	Pd55	0.586776	0.622336	0.299474
Pd	Pd56	0.584136	0.372137	0.297277
Pd	Pd57	0.333540	0.001573	0.297915
Pd	Pd58	0.334622	0.747606	0.302094
Pd	Pd59	0.332465	0.494908	0.294842
Pd	Pd60	0.333474	0.248101	0.297285
Pd	Pd61	0.083246	0.125027	0.297470
Pd	Pd62	0.081861	0.875217	0.297738
Pd	Pd63	0.081969	0.622318	0.296600
Pd	Pd64	0.083467	0.373294	0.296819
C	C65	0.345472	0.791022	0.401292
C	C66	0.411943	0.670094	0.405488
O	O67	0.539673	0.647498	0.396687
O	O68	0.324044	0.581987	0.425697
H	H69	0.420134	0.863204	0.412189
H	H70	0.246901	0.797131	0.425778
H	H71	0.376475	0.504991	0.424453
H	H72	0.286544	0.858839	0.350275

Transition state of R45 CCHOO* + H* = CHCHOO* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000

Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167113	0.000065	0.196189
Pd	Pd34	0.166944	0.249648	0.196369
Pd	Pd35	0.167338	0.500047	0.197375
Pd	Pd36	0.168630	0.750640	0.198116
Pd	Pd37	0.416319	0.125091	0.196808
Pd	Pd38	0.417295	0.375610	0.198196
Pd	Pd39	0.417041	0.624323	0.198484
Pd	Pd40	0.417497	0.874577	0.198022
Pd	Pd41	0.665359	0.999115	0.197821
Pd	Pd42	0.664435	0.251146	0.199114
Pd	Pd43	0.667410	0.499135	0.196963
Pd	Pd44	0.666553	0.749680	0.197853
Pd	Pd45	0.915155	0.124554	0.196414
Pd	Pd46	0.917019	0.373827	0.196149
Pd	Pd47	0.917393	0.625365	0.196272
Pd	Pd48	0.917001	0.875101	0.196445
Pd	Pd49	0.831851	0.000065	0.297064
Pd	Pd50	0.839995	0.753741	0.296949
Pd	Pd51	0.843119	0.495027	0.295590
Pd	Pd52	0.836354	0.245115	0.297168
Pd	Pd53	0.582788	0.122549	0.297847
Pd	Pd54	0.583484	0.875067	0.300675
Pd	Pd55	0.603348	0.623058	0.297799
Pd	Pd56	0.590677	0.369498	0.300570
Pd	Pd57	0.331545	0.002966	0.296852
Pd	Pd58	0.322937	0.756751	0.301798
Pd	Pd59	0.323669	0.498893	0.299210
Pd	Pd60	0.335012	0.249337	0.296734
Pd	Pd61	0.083581	0.124609	0.296099
Pd	Pd62	0.081310	0.879321	0.296826
Pd	Pd63	0.078333	0.626363	0.296554
Pd	Pd64	0.082865	0.370483	0.296316
C	C65	0.430564	0.633183	0.345029
C	C66	0.457830	0.540714	0.394434
O	O67	0.591427	0.491303	0.374262
O	O68	0.347361	0.462111	0.390061
H	H69	0.475466	0.574668	0.439640
H	H70	0.476839	0.756369	0.348963

Transition state of R46 CHCHOO* + H* = CH₂CHOO* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167489	0.999831	0.196717
Pd	Pd34	0.166388	0.249418	0.196457
Pd	Pd35	0.166076	0.499748	0.196612
Pd	Pd36	0.169413	0.750049	0.198617
Pd	Pd37	0.417062	0.123855	0.196839
Pd	Pd38	0.416449	0.374742	0.197525
Pd	Pd39	0.417765	0.625231	0.198682
Pd	Pd40	0.417027	0.873763	0.198203
Pd	Pd41	0.667188	0.000352	0.196572
Pd	Pd42	0.664392	0.252634	0.198874
Pd	Pd43	0.665286	0.501324	0.197886
Pd	Pd44	0.667321	0.748940	0.198337

Pd	Pd45	0.916042	0.125751	0.196500
Pd	Pd46	0.915098	0.375142	0.196191
Pd	Pd47	0.918065	0.625892	0.196431
Pd	Pd48	0.918679	0.875385	0.196777
Pd	Pd49	0.835296	0.000985	0.296833
Pd	Pd50	0.840599	0.753850	0.297323
Pd	Pd51	0.837918	0.499244	0.295210
Pd	Pd52	0.834880	0.247607	0.297312
Pd	Pd53	0.584643	0.124822	0.297446
Pd	Pd54	0.588133	0.880046	0.295913
Pd	Pd55	0.595082	0.631258	0.301604
Pd	Pd56	0.585438	0.372439	0.300142
Pd	Pd57	0.334172	0.000396	0.297291
Pd	Pd58	0.333318	0.746829	0.302056
Pd	Pd59	0.318449	0.490010	0.294761
Pd	Pd60	0.332702	0.245755	0.296750
Pd	Pd61	0.083743	0.122677	0.296813
Pd	Pd62	0.085212	0.875985	0.297701
Pd	Pd63	0.080186	0.624414	0.297385
Pd	Pd64	0.078156	0.369362	0.296257
C	C65	0.460235	0.684983	0.368035
C	C66	0.451892	0.556426	0.395814
O	O67	0.335289	0.491219	0.383557
O	O68	0.581696	0.502753	0.370584
H	H69	0.505194	0.754079	0.397481
H	H70	0.468034	0.557911	0.444135
H	H71	0.284300	0.735031	0.368389

Transition state of R47 $\text{CH}_2\text{CHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOO}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000

Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166812	0.999970	0.196635
Pd	Pd34	0.167464	0.249792	0.197068
Pd	Pd35	0.168183	0.499953	0.197850
Pd	Pd36	0.167101	0.750190	0.196788
Pd	Pd37	0.417146	0.124647	0.197014
Pd	Pd38	0.416214	0.374457	0.197929
Pd	Pd39	0.416999	0.625053	0.198100
Pd	Pd40	0.417095	0.875040	0.196884
Pd	Pd41	0.666902	0.999842	0.196798
Pd	Pd42	0.666815	0.249997	0.197502
Pd	Pd43	0.665759	0.498264	0.198828
Pd	Pd44	0.665773	0.748254	0.198615
Pd	Pd45	0.917004	0.125132	0.196725
Pd	Pd46	0.917220	0.375051	0.196530
Pd	Pd47	0.916453	0.624715	0.196542
Pd	Pd48	0.916249	0.874851	0.196693
Pd	Pd49	0.083947	0.124250	0.296942
Pd	Pd50	0.081426	0.374120	0.296615
Pd	Pd51	0.082589	0.626335	0.296457
Pd	Pd52	0.084414	0.875288	0.296773
Pd	Pd53	0.332975	0.999337	0.296864
Pd	Pd54	0.331477	0.247977	0.298202
Pd	Pd55	0.328258	0.500785	0.298044
Pd	Pd56	0.334623	0.751016	0.297212
Pd	Pd57	0.584822	0.122970	0.297093
Pd	Pd58	0.585306	0.374746	0.299494
Pd	Pd59	0.588097	0.628687	0.298888
Pd	Pd60	0.584879	0.877401	0.297164
Pd	Pd61	0.834849	0.000457	0.297130
Pd	Pd62	0.835561	0.249019	0.296592
Pd	Pd63	0.836004	0.500509	0.296709
Pd	Pd64	0.836689	0.752112	0.296974
C	C65	0.554257	0.380896	0.395151
C	C66	0.490422	0.508295	0.404568
O	O67	0.351731	0.515626	0.385154
O	O68	0.580591	0.600508	0.385238
H	H69	0.499197	0.312662	0.421989
H	H70	0.667319	0.375462	0.404530
H	H71	0.483606	0.521950	0.453288
H	H72	0.482206	0.298329	0.347230

Transition state of R48 CCHOOH* + H* = CHCHOOH* + * on Pd(111)
data_

_cell_length_a	9.514851		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166551	0.999218	0.196838
Pd Pd34	0.167567	0.248933	0.196682
Pd Pd35	0.167020	0.498903	0.196839
Pd Pd36	0.168192	0.749277	0.198580
Pd Pd37	0.416847	0.122785	0.196958
Pd Pd38	0.418581	0.373061	0.197751
Pd Pd39	0.416630	0.624451	0.196781
Pd Pd40	0.415435	0.871832	0.199467
Pd Pd41	0.665967	0.999989	0.197012
Pd Pd42	0.665184	0.251040	0.200002
Pd Pd43	0.667342	0.498067	0.197218
Pd Pd44	0.667712	0.750045	0.196729
Pd Pd45	0.915490	0.125375	0.196973
Pd Pd46	0.917089	0.373979	0.196934
Pd Pd47	0.917207	0.624107	0.196769

Pd	Pd48	0.917232	0.874727	0.196807
Pd	Pd49	0.083602	0.121444	0.296625
Pd	Pd50	0.082081	0.370559	0.296801
Pd	Pd51	0.083287	0.623803	0.296686
Pd	Pd52	0.084771	0.873977	0.297175
Pd	Pd53	0.335051	0.997895	0.297387
Pd	Pd54	0.331339	0.243956	0.297054
Pd	Pd55	0.327512	0.493381	0.295919
Pd	Pd56	0.338034	0.746941	0.303604
Pd	Pd57	0.583935	0.123316	0.298054
Pd	Pd58	0.584607	0.373007	0.306389
Pd	Pd59	0.591358	0.626988	0.294951
Pd	Pd60	0.586660	0.875039	0.297390
Pd	Pd61	0.834220	0.999148	0.297003
Pd	Pd62	0.833810	0.247499	0.297936
Pd	Pd63	0.838501	0.498435	0.297061
Pd	Pd64	0.836609	0.750344	0.297026
C	C65	0.489741	0.516012	0.347547
C	C66	0.446377	0.586194	0.402938
O	O67	0.346824	0.673182	0.387103
O	O68	0.572145	0.636797	0.427041
H	H69	0.395997	0.524817	0.435582
H	H70	0.543308	0.690936	0.458838
H	H71	0.584378	0.397061	0.375216

Transition state of R49 CHCHOH* + H* = CH₂CHOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515

Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165335	0.000206	0.196679
Pd	Pd34	0.166119	0.249998	0.197121
Pd	Pd35	0.167702	0.499659	0.199159
Pd	Pd36	0.165241	0.749872	0.197348
Pd	Pd37	0.415721	0.125391	0.196921
Pd	Pd38	0.415823	0.374902	0.197509
Pd	Pd39	0.415040	0.623758	0.198558
Pd	Pd40	0.414866	0.874147	0.198043
Pd	Pd41	0.664710	0.999041	0.196909
Pd	Pd42	0.666338	0.249794	0.196320
Pd	Pd43	0.666534	0.499993	0.197181
Pd	Pd44	0.664234	0.748288	0.198232
Pd	Pd45	0.915397	0.124551	0.196709
Pd	Pd46	0.917521	0.375028	0.197186
Pd	Pd47	0.916171	0.624830	0.196866
Pd	Pd48	0.914145	0.874451	0.196675
Pd	Pd49	0.830680	0.000379	0.297057
Pd	Pd50	0.829460	0.750239	0.297131
Pd	Pd51	0.832012	0.499911	0.297060
Pd	Pd52	0.831911	0.249374	0.296795
Pd	Pd53	0.582277	0.125060	0.296998
Pd	Pd54	0.582070	0.876748	0.297735
Pd	Pd55	0.580496	0.624987	0.299916
Pd	Pd56	0.585226	0.371252	0.295464
Pd	Pd57	0.331047	0.003662	0.296893
Pd	Pd58	0.327191	0.758377	0.297507
Pd	Pd59	0.330590	0.500239	0.301791
Pd	Pd60	0.331235	0.248587	0.297689
Pd	Pd61	0.080204	0.125927	0.297069
Pd	Pd62	0.077528	0.877652	0.296128
Pd	Pd63	0.077662	0.626581	0.297446
Pd	Pd64	0.079932	0.374658	0.298249
C	C65	0.462860	0.556711	0.368265
C	C66	0.413605	0.661184	0.408012
O	O67	0.311293	0.735180	0.384748
O	O68	0.541147	0.726336	0.422450
H	H69	0.524263	0.489341	0.393319
H	H70	0.369060	0.622622	0.449378
H	H71	0.510362	0.803161	0.439801
H	H72	0.314229	0.464100	0.369016

Transition state of R50 $\text{CH}_2\text{CHOOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + *$ on Pd(111)

data	
_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.165884      0.999932      0.196782
Pd Pd34     0.165245      0.249763      0.196691
Pd Pd35     0.166805      0.499879      0.197386
Pd Pd36     0.168604      0.750165      0.198818
Pd Pd37     0.415902      0.125001      0.196631
Pd Pd38     0.415231      0.375425      0.197254
Pd Pd39     0.416335      0.625101      0.198507
Pd Pd40     0.416379      0.874956      0.197786
Pd Pd41     0.665480      0.999008      0.197121
Pd Pd42     0.665477      0.249762      0.196614
Pd Pd43     0.665383      0.500593      0.197857
Pd Pd44     0.665522      0.748947      0.198376
Pd Pd45     0.915104      0.124553      0.196720
Pd Pd46     0.915369      0.374899      0.196558
Pd Pd47     0.916535      0.625146      0.196646
Pd Pd48     0.916200      0.874520      0.196712
Pd Pd49     0.831154      0.000851      0.297093
Pd Pd50     0.833838      0.751312      0.297111

```

Pd	Pd51	0.833418	0.497880	0.296691
Pd	Pd52	0.831824	0.249068	0.296934
Pd	Pd53	0.581745	0.125132	0.296971
Pd	Pd54	0.583098	0.877224	0.298423
Pd	Pd55	0.588596	0.623391	0.299269
Pd	Pd56	0.582898	0.372374	0.296497
Pd	Pd57	0.329968	0.002967	0.296925
Pd	Pd58	0.327142	0.751768	0.300992
Pd	Pd59	0.328961	0.497921	0.297656
Pd	Pd60	0.331208	0.248642	0.296619
Pd	Pd61	0.080669	0.125206	0.296924
Pd	Pd62	0.078633	0.876670	0.297144
Pd	Pd63	0.078615	0.624618	0.296754
Pd	Pd64	0.079814	0.373606	0.296602
C	C65	0.364081	0.739614	0.396133
C	C66	0.445367	0.624798	0.411732
O	O67	0.576028	0.612337	0.388914
O	O68	0.350659	0.520659	0.396074
H	H69	0.404827	0.817010	0.421479
H	H70	0.250612	0.732794	0.404565
H	H71	0.455175	0.619528	0.460392
H	H72	0.402587	0.447034	0.406875
H	H73	0.451752	0.804298	0.346934

Transition state of R51 CCO* + H* = CCHO* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515

Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166147	0.000068	0.196694
Pd	Pd34	0.166945	0.250208	0.196948
Pd	Pd35	0.168566	0.500289	0.198138
Pd	Pd36	0.166927	0.750066	0.196816
Pd	Pd37	0.416645	0.125345	0.196863
Pd	Pd38	0.417066	0.375285	0.197818
Pd	Pd39	0.418086	0.625283	0.198432
Pd	Pd40	0.416723	0.875315	0.196813
Pd	Pd41	0.666398	0.000251	0.196892
Pd	Pd42	0.666093	0.251453	0.198097
Pd	Pd43	0.666607	0.501062	0.198265
Pd	Pd44	0.666091	0.749132	0.198090
Pd	Pd45	0.915937	0.125565	0.196787
Pd	Pd46	0.917109	0.375493	0.196855
Pd	Pd47	0.917481	0.625021	0.196991
Pd	Pd48	0.915873	0.874876	0.196731
Pd	Pd49	0.083305	0.124091	0.296784
Pd	Pd50	0.081306	0.373173	0.297096
Pd	Pd51	0.081471	0.626881	0.297317
Pd	Pd52	0.083606	0.876712	0.296788
Pd	Pd53	0.333696	0.000600	0.296707
Pd	Pd54	0.331450	0.247323	0.297502
Pd	Pd55	0.323726	0.499842	0.299627
Pd	Pd56	0.330237	0.753698	0.296948
Pd	Pd57	0.583878	0.123802	0.297307
Pd	Pd58	0.587514	0.368465	0.299589
Pd	Pd59	0.587067	0.631608	0.302502
Pd	Pd60	0.583707	0.877842	0.297095
Pd	Pd61	0.834188	0.000273	0.297127
Pd	Pd62	0.834847	0.248095	0.297378
Pd	Pd63	0.837221	0.499556	0.297040
Pd	Pd64	0.836016	0.752581	0.297068
C	C65	0.494194	0.492304	0.348083
C	C66	0.528435	0.541862	0.402623
O	O67	0.528771	0.542754	0.454955
H	H68	0.602711	0.649350	0.375526

Transition state of R52 CHCO* + H* = CHCHO* + * on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_

```

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165959	0.999695	0.196718
Pd	Pd34	0.166300	0.249734	0.196628
Pd	Pd35	0.168169	0.499447	0.198286
Pd	Pd36	0.167808	0.749524	0.197663
Pd	Pd37	0.416559	0.124167	0.196636
Pd	Pd38	0.417257	0.375028	0.197681
Pd	Pd39	0.416268	0.624906	0.197752
Pd	Pd40	0.416679	0.874278	0.197229
Pd	Pd41	0.666469	0.000414	0.196760
Pd	Pd42	0.665165	0.252085	0.198894
Pd	Pd43	0.666794	0.500941	0.198122
Pd	Pd44	0.667184	0.749486	0.197168
Pd	Pd45	0.915073	0.125842	0.196901
Pd	Pd46	0.916559	0.375151	0.196898
Pd	Pd47	0.918293	0.624754	0.196916
Pd	Pd48	0.916729	0.875075	0.196751
Pd	Pd49	0.081874	0.123221	0.296638
Pd	Pd50	0.080853	0.371953	0.297304
Pd	Pd51	0.083786	0.623378	0.297550
Pd	Pd52	0.083935	0.874340	0.297038
Pd	Pd53	0.332765	0.998250	0.296828
Pd	Pd54	0.330501	0.244709	0.296085
Pd	Pd55	0.329146	0.494626	0.300188

Pd	Pd56	0.332556	0.749024	0.299152
Pd	Pd57	0.582530	0.123052	0.297398
Pd	Pd58	0.581640	0.373545	0.301499
Pd	Pd59	0.588229	0.628956	0.297729
Pd	Pd60	0.584513	0.876654	0.296707
Pd	Pd61	0.833669	0.999778	0.297094
Pd	Pd62	0.831687	0.249057	0.297720
Pd	Pd63	0.835365	0.498941	0.296961
Pd	Pd64	0.836575	0.750892	0.296663
C	C65	0.531237	0.561108	0.390184
C	C66	0.462552	0.453737	0.365901
O	O67	0.591350	0.579150	0.436459
H	H68	0.430623	0.384814	0.398456
H	H69	0.493545	0.661295	0.361898

Transition state of R53 $\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHO}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515

Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164964	0.999737	0.196866
Pd	Pd34	0.165966	0.249858	0.196915
Pd	Pd35	0.166705	0.500100	0.196510
Pd	Pd36	0.166268	0.749876	0.196821
Pd	Pd37	0.415545	0.124877	0.196940
Pd	Pd38	0.416682	0.374689	0.198125
Pd	Pd39	0.418575	0.625268	0.198657
Pd	Pd40	0.415615	0.875090	0.196844
Pd	Pd41	0.665148	0.000305	0.197003
Pd	Pd42	0.664534	0.250963	0.198560
Pd	Pd43	0.665903	0.499648	0.197481
Pd	Pd44	0.665874	0.749602	0.197986
Pd	Pd45	0.914992	0.124980	0.196819
Pd	Pd46	0.915962	0.374794	0.196535
Pd	Pd47	0.915975	0.625354	0.196803
Pd	Pd48	0.914592	0.874405	0.197181
Pd	Pd49	0.081190	0.124543	0.296980
Pd	Pd50	0.081107	0.373611	0.296696
Pd	Pd51	0.081232	0.624997	0.296637
Pd	Pd52	0.080317	0.875714	0.296827
Pd	Pd53	0.330710	0.000201	0.296842
Pd	Pd54	0.330463	0.248909	0.297303
Pd	Pd55	0.327295	0.498664	0.296381
Pd	Pd56	0.328058	0.751538	0.297104
Pd	Pd57	0.581477	0.124108	0.297594
Pd	Pd58	0.581086	0.374288	0.301997
Pd	Pd59	0.579540	0.625979	0.300253
Pd	Pd60	0.580666	0.876317	0.297010
Pd	Pd61	0.831106	0.999899	0.297200
Pd	Pd62	0.831838	0.248733	0.296879
Pd	Pd63	0.835016	0.499067	0.295368
Pd	Pd64	0.832393	0.750788	0.298521
C	C65	0.595265	0.431164	0.388771
C	C66	0.553000	0.559955	0.390644
O	O67	0.471846	0.613087	0.422613
H	H68	0.526905	0.373851	0.416004
H	H69	0.707699	0.419799	0.398590
H	H70	0.663946	0.635879	0.364875

Transition state of R54 $\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + ^*$ on Pd(111)

data

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000

Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165031	0.999286	0.196827
Pd	Pd34	0.165867	0.249217	0.196858
Pd	Pd35	0.167527	0.499475	0.198594
Pd	Pd36	0.164685	0.749505	0.196628
Pd	Pd37	0.416067	0.124366	0.196805
Pd	Pd38	0.415787	0.374922	0.197846
Pd	Pd39	0.416074	0.624454	0.197489
Pd	Pd40	0.415849	0.874706	0.196526
Pd	Pd41	0.665836	0.999017	0.196816
Pd	Pd42	0.664899	0.250963	0.198789
Pd	Pd43	0.665684	0.499667	0.197674
Pd	Pd44	0.664574	0.747318	0.198319
Pd	Pd45	0.915097	0.124189	0.196880
Pd	Pd46	0.916596	0.374303	0.196851
Pd	Pd47	0.916123	0.623993	0.196830
Pd	Pd48	0.914452	0.873568	0.196998
Pd	Pd49	0.082072	0.123299	0.296963
Pd	Pd50	0.081873	0.373223	0.297420
Pd	Pd51	0.078453	0.625399	0.297630
Pd	Pd52	0.079428	0.874386	0.297227
Pd	Pd53	0.330761	0.998952	0.296807
Pd	Pd54	0.331923	0.247229	0.296235
Pd	Pd55	0.328288	0.501899	0.299303
Pd	Pd56	0.327950	0.753320	0.295555
Pd	Pd57	0.582517	0.119833	0.297430
Pd	Pd58	0.587492	0.366918	0.298667
Pd	Pd59	0.576580	0.622704	0.301741
Pd	Pd60	0.580781	0.873147	0.297042
Pd	Pd61	0.831701	0.997450	0.297419
Pd	Pd62	0.835337	0.245995	0.297334

Pd	Pd63	0.833245	0.498447	0.296301
Pd	Pd64	0.829389	0.747960	0.297301
C	C65	0.490469	0.535056	0.375546
C	C66	0.476358	0.626041	0.425523
O	O67	0.557019	0.435981	0.385213
H	H68	0.406682	0.701056	0.412802
H	H69	0.433585	0.579377	0.464436
H	H70	0.580993	0.662180	0.436288
H	H71	0.336344	0.507647	0.369664

Transition state of R55 CCHO* + H* = CCH₂O* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166204	0.000573	0.196794
Pd	Pd34	0.166612	0.250167	0.196785

Pd	Pd35	0.166616	0.500190	0.196788
Pd	Pd36	0.168899	0.750824	0.198895
Pd	Pd37	0.416339	0.124408	0.196787
Pd	Pd38	0.418109	0.374066	0.197482
Pd	Pd39	0.417371	0.625224	0.197581
Pd	Pd40	0.416102	0.873558	0.198778
Pd	Pd41	0.666146	0.001432	0.196768
Pd	Pd42	0.664860	0.252708	0.198923
Pd	Pd43	0.666832	0.500083	0.197926
Pd	Pd44	0.668111	0.750826	0.197142
Pd	Pd45	0.915217	0.126871	0.196899
Pd	Pd46	0.916319	0.375660	0.196722
Pd	Pd47	0.917703	0.625741	0.196887
Pd	Pd48	0.917290	0.876222	0.196818
Pd	Pd49	0.081903	0.124323	0.296814
Pd	Pd50	0.079421	0.372210	0.296947
Pd	Pd51	0.082932	0.625737	0.297121
Pd	Pd52	0.085485	0.877420	0.297375
Pd	Pd53	0.334173	0.000556	0.296834
Pd	Pd54	0.329981	0.245549	0.297266
Pd	Pd55	0.322971	0.494156	0.295527
Pd	Pd56	0.335120	0.749026	0.303080
Pd	Pd57	0.582581	0.127427	0.297557
Pd	Pd58	0.581628	0.376202	0.306066
Pd	Pd59	0.595958	0.633052	0.296611
Pd	Pd60	0.586563	0.880574	0.296868
Pd	Pd61	0.833892	0.002781	0.296948
Pd	Pd62	0.830584	0.251054	0.297734
Pd	Pd63	0.838190	0.500040	0.297095
Pd	Pd64	0.840606	0.755198	0.297421
C	C65	0.484555	0.511769	0.345536
C	C66	0.487171	0.610151	0.390315
O	O67	0.382486	0.688972	0.390815
H	H68	0.539774	0.592298	0.432738
H	H69	0.612692	0.670320	0.368456

Transition state of R56 $\text{CHCHO}^* + \text{H}^* = \text{CHCH}_2\text{O}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165895	0.000595	0.196897
Pd	Pd34	0.166793	0.250177	0.196928
Pd	Pd35	0.168817	0.500055	0.198346
Pd	Pd36	0.167549	0.750721	0.198022
Pd	Pd37	0.416863	0.125111	0.196707
Pd	Pd38	0.417663	0.374905	0.197273
Pd	Pd39	0.417392	0.625183	0.198026
Pd	Pd40	0.416116	0.874938	0.197798
Pd	Pd41	0.666447	0.000107	0.196566
Pd	Pd42	0.666939	0.251515	0.197005
Pd	Pd43	0.666894	0.501727	0.198228
Pd	Pd44	0.666004	0.748911	0.198268
Pd	Pd45	0.916115	0.125585	0.196812
Pd	Pd46	0.917738	0.375880	0.196875
Pd	Pd47	0.917890	0.625348	0.196821
Pd	Pd48	0.915921	0.874931	0.196648
Pd	Pd49	0.833575	0.001263	0.296871
Pd	Pd50	0.836351	0.751955	0.297085
Pd	Pd51	0.838634	0.498947	0.297167
Pd	Pd52	0.833658	0.250153	0.297094
Pd	Pd53	0.583915	0.125921	0.296736
Pd	Pd54	0.585248	0.879171	0.296557
Pd	Pd55	0.590942	0.624851	0.301392
Pd	Pd56	0.585535	0.372319	0.297446
Pd	Pd57	0.333230	0.002818	0.296786
Pd	Pd58	0.329309	0.754704	0.298108
Pd	Pd59	0.328983	0.496840	0.298699
Pd	Pd60	0.332065	0.248056	0.296971
Pd	Pd61	0.082350	0.125539	0.297290
Pd	Pd62	0.081526	0.878067	0.296970
Pd	Pd63	0.082214	0.625735	0.297257
Pd	Pd64	0.082849	0.373609	0.297699
C	C65	0.467138	0.526180	0.362122
C	C66	0.466044	0.645401	0.393356
O	O67	0.362079	0.725902	0.385833
H	H68	0.512188	0.450340	0.388151

H	H69	0.504957	0.642561	0.439245
H	H70	0.582518	0.694593	0.371333

Transition state of R57 $\text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + ^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166924	0.999873	0.196898
Pd	Pd34	0.167012	0.249593	0.197005
Pd	Pd35	0.167158	0.499751	0.197422
Pd	Pd36	0.167275	0.749940	0.197642
Pd	Pd37	0.417117	0.124823	0.197001
Pd	Pd38	0.416725	0.375261	0.197783
Pd	Pd39	0.416584	0.624895	0.197956
Pd	Pd40	0.416329	0.873972	0.198153
Pd	Pd41	0.666544	0.999221	0.196808

Pd	Pd42	0.667070	0.249896	0.196785
Pd	Pd43	0.666289	0.500256	0.197883
Pd	Pd44	0.665713	0.748340	0.198551
Pd	Pd45	0.916616	0.124522	0.196883
Pd	Pd46	0.917257	0.374775	0.196771
Pd	Pd47	0.916721	0.624983	0.196693
Pd	Pd48	0.916440	0.874567	0.196715
Pd	Pd49	0.834249	0.000156	0.297108
Pd	Pd50	0.834980	0.751149	0.297010
Pd	Pd51	0.835249	0.498262	0.296468
Pd	Pd52	0.834875	0.248866	0.297047
Pd	Pd53	0.584018	0.124252	0.297120
Pd	Pd54	0.584322	0.876654	0.296971
Pd	Pd55	0.587138	0.624279	0.299946
Pd	Pd56	0.585326	0.371506	0.296647
Pd	Pd57	0.333288	0.000256	0.297019
Pd	Pd58	0.331483	0.749638	0.300870
Pd	Pd59	0.332607	0.499702	0.298688
Pd	Pd60	0.333758	0.248970	0.297184
Pd	Pd61	0.084003	0.124813	0.297112
Pd	Pd62	0.082986	0.875434	0.296781
Pd	Pd63	0.080915	0.624796	0.296427
Pd	Pd64	0.083709	0.374155	0.297245
C	C65	0.339663	0.715422	0.390059
C	C66	0.420088	0.602313	0.401515
O	O67	0.554401	0.596592	0.389325
H	H68	0.399388	0.796106	0.404210
H	H69	0.232236	0.713730	0.407540
H	H70	0.389124	0.550660	0.441619
H	H71	0.343376	0.503942	0.370756

Transition state of R58 $\text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + ^*$ on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000

Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165005	0.000960	0.196895
Pd	Pd34	0.165496	0.251154	0.196826
Pd	Pd35	0.169143	0.500670	0.199196
Pd	Pd36	0.164497	0.750702	0.196694
Pd	Pd37	0.415831	0.125632	0.196679
Pd	Pd38	0.417798	0.375485	0.197828
Pd	Pd39	0.415217	0.625552	0.196911
Pd	Pd40	0.415764	0.876447	0.196669
Pd	Pd41	0.666128	0.000423	0.196792
Pd	Pd42	0.666288	0.250874	0.197141
Pd	Pd43	0.666684	0.501334	0.197090
Pd	Pd44	0.664479	0.749392	0.198578
Pd	Pd45	0.915364	0.126109	0.196952
Pd	Pd46	0.916902	0.376303	0.197337
Pd	Pd47	0.915748	0.624950	0.197489
Pd	Pd48	0.914742	0.875331	0.196883
Pd	Pd49	0.079802	0.127023	0.297252
Pd	Pd50	0.080118	0.376832	0.297861
Pd	Pd51	0.079237	0.628694	0.297704
Pd	Pd52	0.080165	0.878127	0.297077
Pd	Pd53	0.329920	0.003022	0.296985
Pd	Pd54	0.328437	0.250027	0.296076
Pd	Pd55	0.328779	0.503407	0.299720
Pd	Pd56	0.328297	0.756129	0.295517
Pd	Pd57	0.581296	0.125433	0.296860
Pd	Pd58	0.583181	0.373335	0.296781
Pd	Pd59	0.580309	0.635276	0.297432
Pd	Pd60	0.581389	0.881160	0.297581
Pd	Pd61	0.831876	0.002619	0.297550
Pd	Pd62	0.832828	0.250653	0.297339
Pd	Pd63	0.831875	0.503381	0.298259
Pd	Pd64	0.832397	0.754253	0.297553
C	C65	0.484350	0.350604	0.425605
C	C66	0.556415	0.455426	0.395067
O	O67	0.475298	0.545367	0.373361
H	H68	0.396792	0.314565	0.398975
H	H69	0.441216	0.383548	0.467664
H	H70	0.558837	0.276520	0.434373
H	H71	0.645194	0.493032	0.420698
H	H72	0.674820	0.414945	0.355845

Transition state of R59 CCOH* + H* = CCHOH* + * on Pd(111)

data_					
_cell_length_a		9.514851			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		22.764721			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'				
loop_					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166929	0.999266	0.196673	
Pd	Pd34	0.166367	0.248865	0.196710	
Pd	Pd35	0.165346	0.498438	0.196549	
Pd	Pd36	0.170196	0.749076	0.199235	
Pd	Pd37	0.416094	0.123398	0.196945	
Pd	Pd38	0.417454	0.373967	0.198100	
Pd	Pd39	0.417099	0.624849	0.197436	
Pd	Pd40	0.416967	0.872574	0.199058	
Pd	Pd41	0.665947	0.001045	0.197464	
Pd	Pd42	0.663525	0.252350	0.199526	
Pd	Pd43	0.667127	0.498965	0.197508	
Pd	Pd44	0.669459	0.752162	0.196372	

Pd	Pd45	0.914669	0.126000	0.196823
Pd	Pd46	0.915910	0.374176	0.196559
Pd	Pd47	0.917675	0.625176	0.196696
Pd	Pd48	0.918885	0.875953	0.196785
Pd	Pd49	0.082405	0.121758	0.296568
Pd	Pd50	0.078724	0.368714	0.296892
Pd	Pd51	0.079716	0.624417	0.297133
Pd	Pd52	0.087472	0.875145	0.297667
Pd	Pd53	0.333893	0.997486	0.297194
Pd	Pd54	0.330530	0.244043	0.297202
Pd	Pd55	0.318223	0.493483	0.295408
Pd	Pd56	0.334208	0.744301	0.307909
Pd	Pd57	0.581303	0.126206	0.298016
Pd	Pd58	0.579700	0.377135	0.308255
Pd	Pd59	0.604016	0.630624	0.293829
Pd	Pd60	0.586797	0.877807	0.299090
Pd	Pd61	0.833471	0.001525	0.297060
Pd	Pd62	0.829685	0.248522	0.297666
Pd	Pd63	0.839173	0.496265	0.297007
Pd	Pd64	0.842478	0.754648	0.297098
C	C65	0.485763	0.522622	0.343870
C	C66	0.427457	0.624918	0.372705
O	O67	0.399391	0.631976	0.430550
H	H68	0.354735	0.710297	0.438916
H	H69	0.491870	0.732840	0.351583

Transition state of R60 CHCOH* + H* = CHCHOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515

Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165868	0.000548	0.196783
Pd	Pd34	0.167783	0.250942	0.197814
Pd	Pd35	0.167661	0.500940	0.198207
Pd	Pd36	0.165746	0.750597	0.196668
Pd	Pd37	0.416473	0.126221	0.197498
Pd	Pd38	0.416097	0.375824	0.197891
Pd	Pd39	0.417008	0.625410	0.197844
Pd	Pd40	0.416228	0.876204	0.196661
Pd	Pd41	0.666213	0.999801	0.196758
Pd	Pd42	0.666366	0.251161	0.197805
Pd	Pd43	0.666567	0.500057	0.197951
Pd	Pd44	0.664729	0.748076	0.198728
Pd	Pd45	0.916539	0.125412	0.196769
Pd	Pd46	0.917581	0.375523	0.196877
Pd	Pd47	0.916165	0.625101	0.196839
Pd	Pd48	0.914812	0.874488	0.196904
Pd	Pd49	0.833342	0.000303	0.297199
Pd	Pd50	0.830769	0.751624	0.297573
Pd	Pd51	0.834586	0.501581	0.297050
Pd	Pd52	0.837303	0.248334	0.297068
Pd	Pd53	0.585089	0.122334	0.296948
Pd	Pd54	0.581803	0.876904	0.297328
Pd	Pd55	0.580489	0.627256	0.301980
Pd	Pd56	0.591316	0.370610	0.298519
Pd	Pd57	0.332338	0.002558	0.297004
Pd	Pd58	0.329330	0.756458	0.296219
Pd	Pd59	0.324846	0.508685	0.299844
Pd	Pd60	0.333279	0.252693	0.300289
Pd	Pd61	0.084071	0.126151	0.297095
Pd	Pd62	0.081266	0.877876	0.296709
Pd	Pd63	0.078287	0.629497	0.297353
Pd	Pd64	0.081705	0.376795	0.297291
C	C65	0.460970	0.544065	0.367018
C	C66	0.526505	0.431667	0.377509
O	O67	0.578691	0.399118	0.430091
H	H68	0.434498	0.606191	0.403102
H	H69	0.625120	0.319962	0.426411
H	H70	0.445930	0.332298	0.350233

Transition state of R61 $\text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOH}^* + *$ on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000

```

_cell_angle_beta      90.000000
_cell_angle_gamma     90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.165149      0.000208      0.196689
Pd Pd34     0.166340      0.250294      0.196916
Pd Pd35     0.168417      0.500316      0.199026
Pd Pd36     0.164492      0.750249      0.196604
Pd Pd37     0.416021      0.125459      0.196825
Pd Pd38     0.416709      0.375687      0.198360
Pd Pd39     0.415625      0.624517      0.198068
Pd Pd40     0.415713      0.875497      0.196514
Pd Pd41     0.665234      0.999745      0.196829
Pd Pd42     0.665571      0.251304      0.198287
Pd Pd43     0.666441      0.499914      0.197896
Pd Pd44     0.664017      0.747621      0.198282
Pd Pd45     0.915149      0.125072      0.196820
Pd Pd46     0.917605      0.375147      0.196937
Pd Pd47     0.916298      0.624630      0.196823
Pd Pd48     0.914019      0.874357      0.196828
Pd Pd49     0.081797      0.125202      0.296763
Pd Pd50     0.080965      0.374633      0.297775
Pd Pd51     0.077482      0.628377      0.297707

```

Pd	Pd52	0.079365	0.876879	0.296793
Pd	Pd53	0.331324	0.001443	0.296826
Pd	Pd54	0.332565	0.249129	0.296441
Pd	Pd55	0.326661	0.504417	0.301170
Pd	Pd56	0.327816	0.756685	0.295788
Pd	Pd57	0.582835	0.123243	0.297296
Pd	Pd58	0.588962	0.370876	0.300377
Pd	Pd59	0.578431	0.622358	0.301290
Pd	Pd60	0.580704	0.874490	0.297118
Pd	Pd61	0.830997	0.999274	0.297124
Pd	Pd62	0.834190	0.248044	0.297219
Pd	Pd63	0.834065	0.500105	0.296790
Pd	Pd64	0.829075	0.749849	0.297177
C	C65	0.551557	0.430230	0.385460
C	C66	0.465618	0.537237	0.371634
O	O67	0.457206	0.625303	0.413777
H	H68	0.648156	0.451846	0.409634
H	H69	0.494913	0.351511	0.403513
H	H70	0.409418	0.696854	0.396304
H	H71	0.311976	0.487444	0.370821

Transition state of R62 $\text{CH}_3\text{COH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515

Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164992	0.999883	0.196858
Pd	Pd34	0.165536	0.249915	0.197170
Pd	Pd35	0.168692	0.500341	0.199458
Pd	Pd36	0.164159	0.750045	0.196269
Pd	Pd37	0.415621	0.125473	0.196872
Pd	Pd38	0.415366	0.375126	0.197517
Pd	Pd39	0.415965	0.623770	0.198593
Pd	Pd40	0.415926	0.875733	0.196305
Pd	Pd41	0.665346	0.998935	0.196909
Pd	Pd42	0.666664	0.249499	0.196085
Pd	Pd43	0.666087	0.500631	0.197635
Pd	Pd44	0.663375	0.747373	0.199069
Pd	Pd45	0.915447	0.124284	0.196858
Pd	Pd46	0.917477	0.375448	0.197031
Pd	Pd47	0.916112	0.624734	0.197030
Pd	Pd48	0.913772	0.873744	0.197079
Pd	Pd49	0.080896	0.125002	0.297058
Pd	Pd50	0.081524	0.375047	0.298005
Pd	Pd51	0.078139	0.626918	0.297785
Pd	Pd52	0.078660	0.875999	0.296847
Pd	Pd53	0.330645	0.001293	0.296882
Pd	Pd54	0.331538	0.248530	0.297115
Pd	Pd55	0.331204	0.502330	0.302727
Pd	Pd56	0.327001	0.756249	0.294147
Pd	Pd57	0.581914	0.123561	0.296835
Pd	Pd58	0.585551	0.369739	0.294187
Pd	Pd59	0.576912	0.623013	0.304685
Pd	Pd60	0.580153	0.875201	0.297497
Pd	Pd61	0.830582	0.999222	0.297213
Pd	Pd62	0.833152	0.248724	0.296649
Pd	Pd63	0.832000	0.499513	0.296905
Pd	Pd64	0.828300	0.749285	0.297673
C	C65	0.548373	0.472038	0.415236
C	C66	0.464177	0.559181	0.377603
O	O67	0.421088	0.652872	0.412480
H	H68	0.572960	0.386663	0.391576
H	H69	0.489093	0.448583	0.455269
H	H70	0.647496	0.516146	0.428116
H	H71	0.368858	0.713082	0.387975
H	H72	0.328398	0.481671	0.372119

Transition state of R63 CCHOH* + H* = CCH₂OH* + * on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
```

loop_	_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165573	0.000169	0.196665	
Pd	Pd34	0.165506	0.250280	0.197085	
Pd	Pd35	0.166900	0.499786	0.198352	
Pd	Pd36	0.165734	0.750025	0.196889	
Pd	Pd37	0.416088	0.125058	0.196624	
Pd	Pd38	0.416563	0.375210	0.197814	
Pd	Pd39	0.415735	0.624141	0.198303	
Pd	Pd40	0.415894	0.874884	0.196705	
Pd	Pd41	0.665332	0.999860	0.197029	
Pd	Pd42	0.665398	0.251120	0.198172	
Pd	Pd43	0.666212	0.499980	0.197920	
Pd	Pd44	0.664458	0.748711	0.198272	
Pd	Pd45	0.915097	0.125391	0.196885	
Pd	Pd46	0.916710	0.375418	0.197346	
Pd	Pd47	0.915942	0.624857	0.196918	
Pd	Pd48	0.914920	0.874653	0.196836	
Pd	Pd49	0.081608	0.123545	0.296886	
Pd	Pd50	0.078353	0.372189	0.298780	
Pd	Pd51	0.077869	0.628510	0.297242	
Pd	Pd52	0.081521	0.876759	0.296753	
Pd	Pd53	0.332328	0.000153	0.296800	
Pd	Pd54	0.330789	0.245227	0.296372	

Pd	Pd55	0.321051	0.500165	0.299732
Pd	Pd56	0.330348	0.754644	0.296726
Pd	Pd57	0.582404	0.124169	0.297438
Pd	Pd58	0.586079	0.370626	0.300616
Pd	Pd59	0.585909	0.629637	0.300944
Pd	Pd60	0.582182	0.876075	0.297595
Pd	Pd61	0.831472	0.000118	0.297234
Pd	Pd62	0.832843	0.247949	0.297528
Pd	Pd63	0.835625	0.500184	0.297639
Pd	Pd64	0.832282	0.752435	0.297326
C	C65	0.502654	0.500193	0.347564
C	C66	0.414945	0.497207	0.398704
O	O67	0.399872	0.601738	0.430680
H	H68	0.406283	0.410946	0.422718
H	H69	0.338227	0.586657	0.464127
H	H70	0.265592	0.465357	0.366069

Transition state of R64 CHCHOH* + H* = CHCH₂OH* + * on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515

Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164715	0.000106	0.196755
Pd	Pd34	0.166230	0.250013	0.196924
Pd	Pd35	0.169049	0.499815	0.198557
Pd	Pd36	0.165760	0.749933	0.196774
Pd	Pd37	0.415734	0.124815	0.196719
Pd	Pd38	0.417613	0.374763	0.198207
Pd	Pd39	0.416393	0.624469	0.198036
Pd	Pd40	0.415776	0.875055	0.196734
Pd	Pd41	0.665421	0.999484	0.196819
Pd	Pd42	0.666484	0.250541	0.197591
Pd	Pd43	0.667356	0.500792	0.197221
Pd	Pd44	0.664933	0.748700	0.198704
Pd	Pd45	0.914746	0.125498	0.197289
Pd	Pd46	0.917712	0.375048	0.197337
Pd	Pd47	0.917041	0.624913	0.196935
Pd	Pd48	0.914668	0.874577	0.196924
Pd	Pd49	0.080629	0.124707	0.296947
Pd	Pd50	0.084162	0.375349	0.297647
Pd	Pd51	0.082253	0.626434	0.297298
Pd	Pd52	0.080660	0.875859	0.296807
Pd	Pd53	0.330946	0.000060	0.296707
Pd	Pd54	0.329337	0.247196	0.296981
Pd	Pd55	0.333530	0.500161	0.302291
Pd	Pd56	0.329538	0.753470	0.296358
Pd	Pd57	0.581385	0.122486	0.296820
Pd	Pd58	0.582862	0.371643	0.297009
Pd	Pd59	0.581583	0.627186	0.301493
Pd	Pd60	0.581621	0.876120	0.297645
Pd	Pd61	0.831485	0.999956	0.297285
Pd	Pd62	0.833358	0.249550	0.298906
Pd	Pd63	0.836299	0.501308	0.296588
Pd	Pd64	0.831328	0.750303	0.297561
C	C65	0.482039	0.531944	0.364571
C	C66	0.560341	0.429530	0.391648
O	O67	0.474494	0.347962	0.421727
H	H68	0.428649	0.591678	0.396742
H	H69	0.650544	0.462177	0.417686
H	H70	0.532614	0.286890	0.441220
H	H71	0.672584	0.359179	0.358052

Transition state of R65 $\text{CH}_2\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract	_z		
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165847	0.000044	0.197079	
Pd	Pd34	0.165931	0.249778	0.196991	
Pd	Pd35	0.167823	0.499935	0.198261	
Pd	Pd36	0.166594	0.750166	0.198282	
Pd	Pd37	0.415417	0.124421	0.197188	
Pd	Pd38	0.416012	0.375232	0.197976	
Pd	Pd39	0.415629	0.625918	0.197150	
Pd	Pd40	0.414556	0.873520	0.198823	
Pd	Pd41	0.665046	0.000060	0.197016	
Pd	Pd42	0.664761	0.250367	0.197454	
Pd	Pd43	0.665504	0.499606	0.197000	
Pd	Pd44	0.665927	0.750489	0.196552	
Pd	Pd45	0.915217	0.125198	0.197071	
Pd	Pd46	0.915812	0.374843	0.196721	
Pd	Pd47	0.916075	0.624859	0.196492	
Pd	Pd48	0.916052	0.875304	0.196922	
Pd	Pd49	0.831387	0.000678	0.297172	
Pd	Pd50	0.831279	0.751535	0.296686	
Pd	Pd51	0.831446	0.499224	0.296640	
Pd	Pd52	0.830417	0.249317	0.297291	
Pd	Pd53	0.580816	0.125015	0.297566	
Pd	Pd54	0.582033	0.875970	0.297114	
Pd	Pd55	0.585832	0.626447	0.295450	
Pd	Pd56	0.581967	0.374252	0.299185	
Pd	Pd57	0.331696	0.999389	0.297667	
Pd	Pd58	0.331577	0.747079	0.303937	
Pd	Pd59	0.331273	0.501382	0.298596	

Pd	Pd60	0.330470	0.248634	0.297430
Pd	Pd61	0.081311	0.124471	0.297060
Pd	Pd62	0.081215	0.875272	0.297267
Pd	Pd63	0.076697	0.625502	0.296347
Pd	Pd64	0.079224	0.373547	0.296658
C	C65	0.335511	0.684086	0.390537
C	C66	0.348260	0.551375	0.399947
O	O67	0.224260	0.497264	0.419241
H	H68	0.426377	0.735185	0.407054
H	H69	0.234846	0.718348	0.407453
H	H70	0.439715	0.527409	0.427573
H	H71	0.232191	0.408693	0.416482
H	H72	0.428337	0.477067	0.357449

Transition state of R66 $\text{CH}_3\text{CHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515

Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167437	0.000498	0.197060
Pd	Pd34	0.167069	0.250251	0.197311
Pd	Pd35	0.166852	0.500216	0.197582
Pd	Pd36	0.167437	0.750941	0.197134
Pd	Pd37	0.417098	0.125920	0.197249
Pd	Pd38	0.417147	0.374950	0.197405
Pd	Pd39	0.415360	0.623387	0.199215
Pd	Pd40	0.417256	0.875140	0.197174
Pd	Pd41	0.666914	0.000458	0.197001
Pd	Pd42	0.667714	0.250485	0.196861
Pd	Pd43	0.667205	0.500610	0.196965
Pd	Pd44	0.666463	0.750315	0.196968
Pd	Pd45	0.917293	0.125436	0.197036
Pd	Pd46	0.917800	0.375620	0.197109
Pd	Pd47	0.916674	0.625706	0.196703
Pd	Pd48	0.917188	0.875630	0.196980
Pd	Pd49	0.834366	0.000781	0.297113
Pd	Pd50	0.834903	0.751789	0.296988
Pd	Pd51	0.835246	0.501646	0.297076
Pd	Pd52	0.834874	0.250403	0.297120
Pd	Pd53	0.585036	0.125914	0.297202
Pd	Pd54	0.584697	0.876475	0.297347
Pd	Pd55	0.586761	0.627557	0.297296
Pd	Pd56	0.587717	0.375552	0.296496
Pd	Pd57	0.334440	0.001719	0.297244
Pd	Pd58	0.334570	0.753589	0.297826
Pd	Pd59	0.336486	0.502888	0.299878
Pd	Pd60	0.334846	0.249343	0.297755
Pd	Pd61	0.083871	0.125125	0.297427
Pd	Pd62	0.084502	0.876477	0.297424
Pd	Pd63	0.083206	0.628174	0.296511
Pd	Pd64	0.082275	0.375422	0.297669
C	C65	0.359656	0.364000	0.438379
C	C66	0.317071	0.474029	0.403020
O	O67	0.194605	0.524809	0.423208
H	H68	0.274811	0.296533	0.440569
H	H69	0.385326	0.393977	0.483286
H	H70	0.453039	0.321546	0.418776
H	H71	0.403637	0.539467	0.396294
H	H72	0.176622	0.601212	0.401736
H	H73	0.276861	0.398054	0.349422

Transition state of R71 CCOOH* + H* = CCHOH* + * on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

```

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166185	0.999837	0.196799
Pd	Pd34	0.166379	0.249179	0.196713
Pd	Pd35	0.166055	0.498865	0.196704
Pd	Pd36	0.168525	0.749770	0.198790
Pd	Pd37	0.415856	0.123763	0.196904
Pd	Pd38	0.416794	0.374608	0.198268
Pd	Pd39	0.415999	0.624524	0.197449
Pd	Pd40	0.415137	0.872810	0.199114
Pd	Pd41	0.665266	0.000658	0.196881
Pd	Pd42	0.663734	0.251562	0.199038
Pd	Pd43	0.666551	0.498266	0.197516
Pd	Pd44	0.666990	0.750748	0.196593
Pd	Pd45	0.914851	0.125992	0.196800
Pd	Pd46	0.915749	0.374624	0.196760
Pd	Pd47	0.916770	0.624749	0.196529
Pd	Pd48	0.916857	0.875389	0.196728
Pd	Pd49	0.081291	0.122125	0.296719
Pd	Pd50	0.077424	0.369434	0.296769
Pd	Pd51	0.080179	0.625540	0.296460
Pd	Pd52	0.083778	0.875486	0.296974
Pd	Pd53	0.333746	0.999030	0.297504
Pd	Pd54	0.330090	0.243438	0.297179
Pd	Pd55	0.321569	0.492194	0.297075
Pd	Pd56	0.335952	0.749121	0.303616
Pd	Pd57	0.581874	0.126061	0.297904
Pd	Pd58	0.582067	0.375940	0.306801
Pd	Pd59	0.592761	0.629903	0.295068
Pd	Pd60	0.586002	0.877054	0.297221

Pd	Pd61	0.832168	0.000850	0.296811
Pd	Pd62	0.829858	0.248999	0.297614
Pd	Pd63	0.837227	0.499075	0.297216
Pd	Pd64	0.836184	0.752280	0.296839
C	C65	0.495752	0.517850	0.345535
C	C66	0.404762	0.569033	0.394071
O	O67	0.378396	0.688690	0.390976
O	O68	0.430915	0.524000	0.449725
H	H69	0.374732	0.572814	0.476940
H	H70	0.291461	0.515298	0.375744

Transition state of R72 CHCOOH* + H* = CHCHOOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165907	0.000105	0.196826

Pd	Pd34	0.167128	0.249837	0.196912
Pd	Pd35	0.168987	0.499828	0.198358
Pd	Pd36	0.167803	0.750167	0.198053
Pd	Pd37	0.416843	0.124733	0.196758
Pd	Pd38	0.417503	0.374642	0.197321
Pd	Pd39	0.417818	0.624869	0.198083
Pd	Pd40	0.416132	0.874452	0.197749
Pd	Pd41	0.666353	0.999646	0.196626
Pd	Pd42	0.667215	0.250655	0.196827
Pd	Pd43	0.667241	0.500798	0.197797
Pd	Pd44	0.666031	0.748335	0.198114
Pd	Pd45	0.916397	0.124970	0.196822
Pd	Pd46	0.918180	0.375310	0.196934
Pd	Pd47	0.917916	0.624819	0.196860
Pd	Pd48	0.915711	0.874375	0.196635
Pd	Pd49	0.833060	0.000382	0.296864
Pd	Pd50	0.834534	0.750331	0.297126
Pd	Pd51	0.838514	0.497999	0.297219
Pd	Pd52	0.834650	0.249328	0.297028
Pd	Pd53	0.584134	0.125005	0.296880
Pd	Pd54	0.584621	0.877137	0.296444
Pd	Pd55	0.589578	0.622193	0.301577
Pd	Pd56	0.586502	0.371210	0.296735
Pd	Pd57	0.333208	0.002186	0.296747
Pd	Pd58	0.327939	0.754595	0.298002
Pd	Pd59	0.331532	0.498324	0.299351
Pd	Pd60	0.332919	0.248188	0.297087
Pd	Pd61	0.082853	0.125158	0.297178
Pd	Pd62	0.080217	0.877464	0.296742
Pd	Pd63	0.081684	0.625178	0.297316
Pd	Pd64	0.084595	0.373905	0.297652
C	C65	0.466578	0.533781	0.363516
C	C66	0.452837	0.649713	0.398375
O	O67	0.348812	0.730056	0.386235
O	O68	0.469989	0.630795	0.458634
H	H69	0.512494	0.458871	0.389706
H	H70	0.449576	0.708467	0.477795
H	H71	0.562908	0.697177	0.379117

Transition state of R74 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
 Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
 Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
 Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
 Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000

Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165354	0.000964	0.197025
Pd	Pd34	0.165639	0.250868	0.197193
Pd	Pd35	0.168495	0.500600	0.199115
Pd	Pd36	0.164789	0.750860	0.196707
Pd	Pd37	0.416298	0.125820	0.196909
Pd	Pd38	0.416185	0.375744	0.197483
Pd	Pd39	0.415740	0.625794	0.196931
Pd	Pd40	0.415966	0.876526	0.196637
Pd	Pd41	0.666113	0.000499	0.197024
Pd	Pd42	0.666533	0.250659	0.197158
Pd	Pd43	0.665971	0.501038	0.197276
Pd	Pd44	0.664826	0.749460	0.198176
Pd	Pd45	0.915739	0.125816	0.197079
Pd	Pd46	0.916922	0.375977	0.197207
Pd	Pd47	0.916196	0.625386	0.197030
Pd	Pd48	0.914750	0.875403	0.196922
Pd	Pd49	0.080982	0.126896	0.297415
Pd	Pd50	0.080744	0.376624	0.298248
Pd	Pd51	0.079615	0.628289	0.297727
Pd	Pd52	0.080400	0.877509	0.297014
Pd	Pd53	0.330678	0.002878	0.297099
Pd	Pd54	0.330143	0.250651	0.296622
Pd	Pd55	0.329448	0.503884	0.299084
Pd	Pd56	0.329433	0.755576	0.295333
Pd	Pd57	0.582098	0.125333	0.297446
Pd	Pd58	0.585358	0.371905	0.296378
Pd	Pd59	0.582011	0.630720	0.298042
Pd	Pd60	0.581473	0.879301	0.297350
Pd	Pd61	0.832363	0.001822	0.297527
Pd	Pd62	0.833331	0.250635	0.297482
Pd	Pd63	0.832551	0.502392	0.296757
Pd	Pd64	0.831963	0.752865	0.297469
C	C65	0.625524	0.491064	0.449137

C	C66	0.504867	0.460343	0.408208
O	O67	0.449330	0.550712	0.378050
O	O68	0.414315	0.377083	0.432140
H	H69	0.671244	0.407965	0.467634
H	H70	0.584064	0.548208	0.484848
H	H71	0.705703	0.541853	0.424733
H	H72	0.332057	0.371500	0.405875
H	H73	0.585061	0.386036	0.368805

Transition state of R75 CO* + H* = COH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166050	0.999733	0.196790
Pd	Pd34	0.166686	0.249592	0.196836
Pd	Pd35	0.169306	0.499804	0.198248

Pd	Pd36	0.166957	0.749911	0.196795
Pd	Pd37	0.416498	0.124768	0.196793
Pd	Pd38	0.417005	0.374943	0.198262
Pd	Pd39	0.417385	0.624559	0.198279
Pd	Pd40	0.416948	0.874814	0.196801
Pd	Pd41	0.666170	0.000171	0.197045
Pd	Pd42	0.665710	0.251416	0.198171
Pd	Pd43	0.666699	0.499833	0.198123
Pd	Pd44	0.666699	0.749477	0.197817
Pd	Pd45	0.915567	0.125153	0.196811
Pd	Pd46	0.917638	0.375089	0.196794
Pd	Pd47	0.917726	0.624629	0.196894
Pd	Pd48	0.915998	0.874633	0.196945
Pd	Pd49	0.082243	0.123100	0.296856
Pd	Pd50	0.082846	0.372587	0.297082
Pd	Pd51	0.083940	0.625255	0.297080
Pd	Pd52	0.083177	0.875250	0.296941
Pd	Pd53	0.333817	0.998939	0.296726
Pd	Pd54	0.330537	0.245173	0.297291
Pd	Pd55	0.329022	0.497698	0.302303
Pd	Pd56	0.331590	0.752083	0.296711
Pd	Pd57	0.583002	0.123733	0.297294
Pd	Pd58	0.583832	0.370442	0.301999
Pd	Pd59	0.587487	0.630080	0.301134
Pd	Pd60	0.583905	0.875594	0.297636
Pd	Pd61	0.833130	0.999482	0.297222
Pd	Pd62	0.833077	0.248729	0.297018
Pd	Pd63	0.837286	0.499125	0.296593
Pd	Pd64	0.835245	0.750653	0.297513
C	C65	0.499006	0.497490	0.351839
O	O66	0.524562	0.535087	0.403618
H	H67	0.587839	0.629093	0.378293

Transition state of R76 $\text{HCO}^* + \text{H}^* = \text{HCOH}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000

Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165626	0.000079	0.196903
Pd	Pd34	0.166647	0.250143	0.197137
Pd	Pd35	0.168252	0.500266	0.198241
Pd	Pd36	0.165373	0.750001	0.196553
Pd	Pd37	0.416464	0.125528	0.196944
Pd	Pd38	0.416139	0.375507	0.198252
Pd	Pd39	0.416660	0.624336	0.198106
Pd	Pd40	0.415975	0.875510	0.196541
Pd	Pd41	0.665911	0.999419	0.196957
Pd	Pd42	0.667319	0.249006	0.196635
Pd	Pd43	0.666104	0.500431	0.198216
Pd	Pd44	0.664574	0.748635	0.198304
Pd	Pd45	0.916255	0.124680	0.196950
Pd	Pd46	0.917063	0.375267	0.197058
Pd	Pd47	0.915973	0.624547	0.197014
Pd	Pd48	0.914746	0.874189	0.196919
Pd	Pd49	0.082223	0.125347	0.296983
Pd	Pd50	0.084219	0.375496	0.297392
Pd	Pd51	0.081323	0.625756	0.296928
Pd	Pd52	0.080739	0.875929	0.296647
Pd	Pd53	0.332364	0.001161	0.296801
Pd	Pd54	0.332437	0.249797	0.297347
Pd	Pd55	0.333892	0.502530	0.302994
Pd	Pd56	0.329125	0.754511	0.295445
Pd	Pd57	0.582819	0.124490	0.297353
Pd	Pd58	0.586117	0.370033	0.297356
Pd	Pd59	0.578933	0.624967	0.303003
Pd	Pd60	0.581783	0.875732	0.297084
Pd	Pd61	0.832013	0.999641	0.297047
Pd	Pd62	0.833390	0.249317	0.297104
Pd	Pd63	0.833419	0.499644	0.297338
Pd	Pd64	0.830397	0.749321	0.297371
C	C65	0.453449	0.568025	0.372790
O	O66	0.503635	0.492829	0.408562
H	H67	0.398958	0.649567	0.391556
H	H68	0.571932	0.391676	0.366053

Transition state of R77 $\text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.166378      0.001118      0.196948
Pd Pd34     0.166430      0.250784      0.197084
Pd Pd35     0.166960      0.500545      0.197877
Pd Pd36     0.167091      0.750938      0.197460
Pd Pd37     0.416224      0.126140      0.197047
Pd Pd38     0.415651      0.376708      0.198309
Pd Pd39     0.416140      0.624898      0.197557
Pd Pd40     0.415803      0.874962      0.198273
Pd Pd41     0.665317      0.000365      0.197378
Pd Pd42     0.665775      0.250774      0.196947
Pd Pd43     0.666029      0.500739      0.196990
Pd Pd44     0.665835      0.751534      0.197168
Pd Pd45     0.915709      0.125535      0.197004
Pd Pd46     0.916205      0.375699      0.196893

```

Pd	Pd47	0.915918	0.625706	0.196560
Pd	Pd48	0.916232	0.875845	0.196823
Pd	Pd49	0.831966	0.001899	0.297217
Pd	Pd50	0.833362	0.752713	0.297036
Pd	Pd51	0.832598	0.500545	0.297023
Pd	Pd52	0.832021	0.250972	0.297094
Pd	Pd53	0.582337	0.126535	0.297397
Pd	Pd54	0.582780	0.877027	0.298860
Pd	Pd55	0.587261	0.627933	0.297020
Pd	Pd56	0.583142	0.376518	0.296912
Pd	Pd57	0.332230	0.003469	0.297100
Pd	Pd58	0.329839	0.751732	0.298483
Pd	Pd59	0.331311	0.502789	0.302810
Pd	Pd60	0.332580	0.252323	0.297502
Pd	Pd61	0.082073	0.127112	0.296925
Pd	Pd62	0.081235	0.877789	0.296713
Pd	Pd63	0.078743	0.626259	0.296008
Pd	Pd64	0.081812	0.376105	0.297087
C	C65	0.343612	0.569172	0.390372
O	O66	0.372040	0.688398	0.389884
H	H67	0.430412	0.508606	0.403963
H	H68	0.238286	0.546463	0.407367
H	H69	0.499240	0.706629	0.350723

Transition state of R78 $\text{H}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515

Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166082	0.000509	0.196899
Pd	Pd34	0.166338	0.250270	0.196980
Pd	Pd35	0.166953	0.500207	0.197132
Pd	Pd36	0.166139	0.750392	0.196820
Pd	Pd37	0.416581	0.125379	0.196863
Pd	Pd38	0.416329	0.375295	0.197382
Pd	Pd39	0.415828	0.625046	0.197661
Pd	Pd40	0.416251	0.875596	0.196901
Pd	Pd41	0.666310	0.000281	0.196973
Pd	Pd42	0.666392	0.250797	0.197173
Pd	Pd43	0.666272	0.500273	0.197735
Pd	Pd44	0.665080	0.748925	0.199021
Pd	Pd45	0.915856	0.125554	0.196871
Pd	Pd46	0.916734	0.375348	0.196912
Pd	Pd47	0.916555	0.625199	0.197019
Pd	Pd48	0.915732	0.875299	0.196747
Pd	Pd49	0.833272	0.001974	0.297129
Pd	Pd50	0.835532	0.752776	0.297101
Pd	Pd51	0.834624	0.500629	0.296829
Pd	Pd52	0.832152	0.251272	0.297182
Pd	Pd53	0.582332	0.126334	0.297140
Pd	Pd54	0.583358	0.879079	0.297498
Pd	Pd55	0.586125	0.631556	0.299178
Pd	Pd56	0.580951	0.374286	0.298060
Pd	Pd57	0.332084	0.001033	0.297015
Pd	Pd58	0.332133	0.752241	0.296688
Pd	Pd59	0.332577	0.499002	0.298439
Pd	Pd60	0.330887	0.248861	0.297278
Pd	Pd61	0.082129	0.125839	0.296977
Pd	Pd62	0.082926	0.876164	0.296777
Pd	Pd63	0.084323	0.625643	0.296941
Pd	Pd64	0.082690	0.375575	0.297205
C	C65	0.666586	0.560430	0.420934
O	O66	0.547026	0.590424	0.386524
H	H67	0.730903	0.641997	0.429327
H	H68	0.629251	0.522052	0.462960
H	H69	0.734412	0.490800	0.399501
H	H70	0.493363	0.483251	0.345263

Transition state of R79 CCO* + H* = CCOH* + * on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.333333 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.333333 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.583333 0.125000 0.000000
Pd Pd10 0.583333 0.375000 0.000000
Pd Pd11 0.583333 0.625000 0.000000
Pd Pd12 0.583333 0.875000 0.000000
Pd Pd13 0.833333 0.000000 0.000000
Pd Pd14 0.833333 0.250000 0.000000
Pd Pd15 0.833333 0.500000 0.000000
Pd Pd16 0.833333 0.750000 0.000000
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.098515
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.098515
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.098515
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.098515
Pd Pd21 0.250000 0.125000 0.098515
Pd Pd22 0.250000 0.375000 0.098515
Pd Pd23 0.250000 0.625000 0.098515
Pd Pd24 0.250000 0.875000 0.098515
Pd Pd25 0.500000 0.000000 0.098515
Pd Pd26 0.500000 0.250000 0.098515
Pd Pd27 0.500000 0.500000 0.098515
Pd Pd28 0.500000 0.750000 0.098515
Pd Pd29 0.750000 0.125000 0.098515
Pd Pd30 0.750000 0.375000 0.098515
Pd Pd31 0.750000 0.625000 0.098515
Pd Pd32 0.750000 0.875000 0.098515
Pd Pd33 0.165986 0.000314 0.196781
Pd Pd34 0.166894 0.250752 0.196951
Pd Pd35 0.168127 0.500709 0.198678
Pd Pd36 0.165509 0.750297 0.197290
Pd Pd37 0.416610 0.125371 0.196960
Pd Pd38 0.417214 0.375277 0.197670
Pd Pd39 0.415681 0.626561 0.197311
Pd Pd40 0.416641 0.875994 0.197211
Pd Pd41 0.666434 0.000268 0.196843
Pd Pd42 0.666095 0.251192 0.198475
Pd Pd43 0.666442 0.499829 0.197449
Pd Pd44 0.665350 0.749098 0.198521
Pd Pd45 0.915969 0.125458 0.196710
Pd Pd46 0.917187 0.375384 0.197091
Pd Pd47 0.916233 0.624955 0.197019
Pd Pd48 0.915578 0.874821 0.196863
Pd Pd49 0.083581 0.125297 0.296761
Pd Pd50 0.081717 0.375428 0.297430
Pd Pd51 0.078937 0.628447 0.297588
Pd Pd52 0.080959 0.877258 0.297279
Pd Pd53 0.332361 0.001999 0.297315

```

Pd	Pd54	0.331784	0.249000	0.297240
Pd	Pd55	0.325826	0.503105	0.298574
Pd	Pd56	0.327034	0.758936	0.299888
Pd	Pd57	0.583540	0.122434	0.297480
Pd	Pd58	0.590136	0.365130	0.299625
Pd	Pd59	0.584314	0.630857	0.298348
Pd	Pd60	0.582468	0.877989	0.297578
Pd	Pd61	0.833642	0.000618	0.297187
Pd	Pd62	0.836787	0.247837	0.297420
Pd	Pd63	0.834838	0.500504	0.297303
Pd	Pd64	0.832512	0.752619	0.297515
C	C65	0.509526	0.485754	0.351243
C	C66	0.443047	0.579459	0.375879
O	O67	0.394230	0.654935	0.412017
H	H68	0.341609	0.734703	0.373966

Transition state of R80 CHCO* + H* = CHCOH* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515

Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165460	0.000373	0.196590
Pd	Pd34	0.166543	0.250364	0.197055
Pd	Pd35	0.168104	0.500138	0.198604
Pd	Pd36	0.166315	0.750252	0.196952
Pd	Pd37	0.416262	0.125589	0.196841
Pd	Pd38	0.416749	0.375108	0.197778
Pd	Pd39	0.416076	0.624652	0.197609
Pd	Pd40	0.416127	0.875393	0.196869
Pd	Pd41	0.665689	0.000510	0.196931
Pd	Pd42	0.665995	0.251852	0.197985
Pd	Pd43	0.667296	0.500412	0.198038
Pd	Pd44	0.665331	0.748921	0.199050
Pd	Pd45	0.915564	0.125558	0.196817
Pd	Pd46	0.917927	0.375246	0.197266
Pd	Pd47	0.916734	0.625331	0.197293
Pd	Pd48	0.915101	0.874895	0.196876
Pd	Pd49	0.832527	0.001622	0.297118
Pd	Pd50	0.833541	0.751980	0.297631
Pd	Pd51	0.840484	0.499523	0.299219
Pd	Pd52	0.833713	0.250209	0.297168
Pd	Pd53	0.582767	0.127038	0.297162
Pd	Pd54	0.583039	0.878931	0.297540
Pd	Pd55	0.582701	0.631171	0.300164
Pd	Pd56	0.583486	0.376325	0.299994
Pd	Pd57	0.332664	0.001745	0.296582
Pd	Pd58	0.330620	0.754256	0.297205
Pd	Pd59	0.327042	0.501077	0.300554
Pd	Pd60	0.332049	0.249541	0.297504
Pd	Pd61	0.082476	0.125392	0.296890
Pd	Pd62	0.082063	0.877387	0.296588
Pd	Pd63	0.081124	0.628069	0.297433
Pd	Pd64	0.083414	0.374261	0.298095
C	C65	0.450007	0.555310	0.366066
C	C66	0.576212	0.489063	0.370217
O	O67	0.672800	0.474655	0.407774
H	H68	0.405545	0.607789	0.402557
H	H69	0.793252	0.466381	0.366760

Transition state of R81 $\text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + ^*$ on Pd(111)

data

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000

Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167249	0.000139	0.196983
Pd	Pd34	0.166573	0.249813	0.196648
Pd	Pd35	0.166487	0.500642	0.196484
Pd	Pd36	0.167553	0.750596	0.196968
Pd	Pd37	0.418387	0.124905	0.198224
Pd	Pd38	0.415951	0.375192	0.196631
Pd	Pd39	0.418286	0.625643	0.198522
Pd	Pd40	0.417287	0.875393	0.197372
Pd	Pd41	0.665764	0.999993	0.198631
Pd	Pd42	0.666103	0.249108	0.197990
Pd	Pd43	0.667215	0.502182	0.196754
Pd	Pd44	0.664727	0.748895	0.200002
Pd	Pd45	0.916346	0.124498	0.196865
Pd	Pd46	0.916113	0.375021	0.196461
Pd	Pd47	0.916854	0.626331	0.196705
Pd	Pd48	0.915460	0.875093	0.197095
Pd	Pd49	0.083317	0.124324	0.296933
Pd	Pd50	0.083012	0.375174	0.296452
Pd	Pd51	0.083071	0.627410	0.296744
Pd	Pd52	0.083207	0.876071	0.296832
Pd	Pd53	0.334410	0.000934	0.297584
Pd	Pd54	0.330764	0.249714	0.296540
Pd	Pd55	0.328521	0.501597	0.295966
Pd	Pd56	0.333898	0.751139	0.297654
Pd	Pd57	0.583117	0.129496	0.305315
Pd	Pd58	0.582834	0.377368	0.294427
Pd	Pd59	0.583816	0.621574	0.307664
Pd	Pd60	0.583108	0.876354	0.298931
Pd	Pd61	0.832040	0.000979	0.297840
Pd	Pd62	0.835475	0.249579	0.296440

Pd	Pd63	0.836999	0.501222	0.295614
Pd	Pd64	0.832844	0.751460	0.297782
C	C65	0.584621	0.532238	0.389611
C	C66	0.584899	0.401692	0.377341
O	O67	0.584103	0.309245	0.410153
H	H68	0.488905	0.561980	0.412623
H	H69	0.681047	0.563003	0.411725
H	H70	0.583102	0.218470	0.371052

Transition state of R82 $\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + ^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166031	0.000023	0.196996
Pd	Pd34	0.166292	0.250187	0.197079
Pd	Pd35	0.169577	0.500565	0.198885

Pd	Pd36	0.165350	0.750043	0.196572
Pd	Pd37	0.416405	0.125476	0.196878
Pd	Pd38	0.415774	0.375674	0.197541
Pd	Pd39	0.417440	0.623970	0.199173
Pd	Pd40	0.416851	0.876023	0.196571
Pd	Pd41	0.666468	0.999169	0.196974
Pd	Pd42	0.667151	0.249638	0.196095
Pd	Pd43	0.667036	0.500990	0.197507
Pd	Pd44	0.664612	0.747869	0.198755
Pd	Pd45	0.916313	0.124545	0.196958
Pd	Pd46	0.917833	0.375592	0.197074
Pd	Pd47	0.917234	0.624830	0.197133
Pd	Pd48	0.915077	0.874100	0.197030
Pd	Pd49	0.832559	0.999654	0.297072
Pd	Pd50	0.830651	0.749121	0.297500
Pd	Pd51	0.834461	0.499927	0.297111
Pd	Pd52	0.834641	0.249626	0.296685
Pd	Pd53	0.583264	0.124327	0.296801
Pd	Pd54	0.582145	0.875386	0.297315
Pd	Pd55	0.579973	0.623122	0.305237
Pd	Pd56	0.585984	0.371433	0.293934
Pd	Pd57	0.332751	0.001674	0.297045
Pd	Pd58	0.328966	0.756032	0.295570
Pd	Pd59	0.336412	0.501688	0.305232
Pd	Pd60	0.332866	0.249939	0.297002
Pd	Pd61	0.083058	0.125568	0.297097
Pd	Pd62	0.080695	0.875979	0.296821
Pd	Pd63	0.082600	0.626018	0.297468
Pd	Pd64	0.085133	0.376027	0.297601
C	C65	0.460598	0.557297	0.379559
C	C66	0.529151	0.454126	0.413992
O	O67	0.406629	0.639843	0.409650
H	H68	0.576540	0.381865	0.386290
H	H69	0.612169	0.493270	0.441801
H	H70	0.448553	0.412126	0.442055
H	H71	0.332811	0.749566	0.363810

Transition state of R83 CCHO* + H* = CCHOH* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000

Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166377	0.999447	0.196921
Pd	Pd34	0.167159	0.249585	0.196887
Pd	Pd35	0.168422	0.499425	0.197937
Pd	Pd36	0.168691	0.749515	0.197925
Pd	Pd37	0.416435	0.124145	0.196965
Pd	Pd38	0.418016	0.374060	0.197694
Pd	Pd39	0.417487	0.625153	0.197759
Pd	Pd40	0.417003	0.874350	0.197569
Pd	Pd41	0.666322	0.999679	0.197045
Pd	Pd42	0.665799	0.250782	0.198462
Pd	Pd43	0.667437	0.499558	0.197684
Pd	Pd44	0.667296	0.749367	0.197771
Pd	Pd45	0.915709	0.125276	0.196898
Pd	Pd46	0.917472	0.374778	0.197003
Pd	Pd47	0.918278	0.624535	0.196909
Pd	Pd48	0.917208	0.874293	0.196944
Pd	Pd49	0.083476	0.122836	0.296684
Pd	Pd50	0.082294	0.372089	0.297357
Pd	Pd51	0.083470	0.625618	0.297462
Pd	Pd52	0.084378	0.874829	0.297315
Pd	Pd53	0.334530	0.998752	0.297313
Pd	Pd54	0.331884	0.245629	0.297330
Pd	Pd55	0.326783	0.496820	0.298099
Pd	Pd56	0.334313	0.750910	0.301394
Pd	Pd57	0.583527	0.124036	0.297473
Pd	Pd58	0.585689	0.371569	0.302675
Pd	Pd59	0.587229	0.627417	0.298876
Pd	Pd60	0.584522	0.875406	0.297624
Pd	Pd61	0.833705	0.999382	0.296877
Pd	Pd62	0.833586	0.248526	0.297448
Pd	Pd63	0.837832	0.499235	0.297159
Pd	Pd64	0.835216	0.750307	0.297172
C	C65	0.497071	0.502396	0.347648
C	C66	0.460542	0.529036	0.408393
O	O67	0.424689	0.632810	0.425331

H	H68	0.464056	0.452987	0.440260
H	H69	0.407862	0.708797	0.363090

Transition state of R84 CHCHO* + H* = CHCHOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165380	0.999585	0.196713
Pd	Pd34	0.165768	0.249630	0.197085
Pd	Pd35	0.169020	0.499659	0.199286
Pd	Pd36	0.166026	0.749696	0.196549
Pd	Pd37	0.415852	0.124847	0.196832
Pd	Pd38	0.415965	0.374484	0.197556
Pd	Pd39	0.416689	0.624000	0.197759
Pd	Pd40	0.416771	0.875219	0.197038
Pd	Pd41	0.665139	0.998378	0.197666

Pd	Pd42	0.666215	0.249342	0.196853
Pd	Pd43	0.667143	0.499533	0.197188
Pd	Pd44	0.665189	0.748634	0.198900
Pd	Pd45	0.915095	0.123869	0.196863
Pd	Pd46	0.917641	0.374681	0.197085
Pd	Pd47	0.916887	0.624544	0.196999
Pd	Pd48	0.914802	0.873847	0.196991
Pd	Pd49	0.081111	0.124819	0.296912
Pd	Pd50	0.082903	0.374146	0.298008
Pd	Pd51	0.080060	0.625629	0.297499
Pd	Pd52	0.079222	0.876154	0.296572
Pd	Pd53	0.330348	0.001265	0.296806
Pd	Pd54	0.331577	0.248381	0.297198
Pd	Pd55	0.330962	0.500871	0.302127
Pd	Pd56	0.327364	0.753777	0.295311
Pd	Pd57	0.581633	0.122715	0.297165
Pd	Pd58	0.584722	0.370189	0.295883
Pd	Pd59	0.585673	0.622763	0.299725
Pd	Pd60	0.579841	0.873042	0.300792
Pd	Pd61	0.830389	0.998841	0.297468
Pd	Pd62	0.832843	0.248216	0.296893
Pd	Pd63	0.834826	0.497948	0.297108
Pd	Pd64	0.831870	0.749309	0.297799
C	C65	0.481203	0.538419	0.365621
C	C66	0.419545	0.617456	0.408987
O	O67	0.415212	0.732698	0.408142
H	H68	0.522049	0.453825	0.386060
H	H69	0.372339	0.573051	0.447900
H	H70	0.475926	0.772266	0.351345

Transition state of R85 $\text{CH}_2\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CHOH}^* + *$ on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000

Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165763	0.999446	0.197104
Pd	Pd34	0.166181	0.249342	0.196752
Pd	Pd35	0.166438	0.499445	0.197188
Pd	Pd36	0.165982	0.749694	0.197390
Pd	Pd37	0.415960	0.124329	0.196914
Pd	Pd38	0.416405	0.375394	0.198402
Pd	Pd39	0.415963	0.625514	0.197418
Pd	Pd40	0.415875	0.874438	0.197418
Pd	Pd41	0.665683	0.999480	0.196899
Pd	Pd42	0.664612	0.250726	0.198453
Pd	Pd43	0.665502	0.499419	0.197546
Pd	Pd44	0.665317	0.748360	0.197711
Pd	Pd45	0.915135	0.124774	0.196869
Pd	Pd46	0.915790	0.374287	0.196571
Pd	Pd47	0.916096	0.624699	0.196587
Pd	Pd48	0.915543	0.874541	0.196907
Pd	Pd49	0.081596	0.123276	0.296851
Pd	Pd50	0.080411	0.372397	0.296732
Pd	Pd51	0.080264	0.625019	0.296856
Pd	Pd52	0.081510	0.874587	0.297429
Pd	Pd53	0.332028	0.998820	0.297447
Pd	Pd54	0.331273	0.247401	0.296588
Pd	Pd55	0.327628	0.497929	0.297187
Pd	Pd56	0.330979	0.750213	0.299488
Pd	Pd57	0.582081	0.122838	0.297263
Pd	Pd58	0.584895	0.372953	0.301656
Pd	Pd59	0.584356	0.623328	0.298777
Pd	Pd60	0.582099	0.874126	0.296939
Pd	Pd61	0.831866	0.998872	0.297191
Pd	Pd62	0.832598	0.247603	0.297147
Pd	Pd63	0.834565	0.499189	0.295948
Pd	Pd64	0.832826	0.749868	0.297074
C	C65	0.577971	0.413379	0.392350
C	C66	0.515709	0.532977	0.392143
O	O67	0.379480	0.547511	0.394165
H	H68	0.509188	0.340330	0.408152
H	H69	0.686692	0.409020	0.407912
H	H70	0.583270	0.614493	0.399330
H	H71	0.340020	0.655942	0.356048

Transition state of R86 $\text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOH}^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd   Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd   Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd   Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd   Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd   Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd   Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd   Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd   Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd   Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd   Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd   Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd   Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd   Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd   Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd   Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd   Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd   Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd   Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd   Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd   Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd   Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd   Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd   Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd   Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd   Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd   Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd   Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd   Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd   Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd   Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd   Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd   Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd   Pd33     0.167160      0.999869      0.197011
Pd   Pd34     0.167491      0.249908      0.197145
Pd   Pd35     0.167569      0.499686      0.197147
Pd   Pd36     0.168450      0.749845      0.198146
Pd   Pd37     0.417522      0.124549      0.196879
Pd   Pd38     0.417973      0.374351      0.197076
Pd   Pd39     0.416521      0.625293      0.197848
Pd   Pd40     0.416843      0.874250      0.197698
Pd   Pd41     0.667658      0.000050      0.196716
Pd   Pd42     0.667542      0.250415      0.197108
Pd   Pd43     0.666832      0.500725      0.197735
Pd   Pd44     0.667097      0.749373      0.197112
Pd   Pd45     0.917274      0.125255      0.197059
Pd   Pd46     0.917441      0.375222      0.197032

```

Pd	Pd47	0.917789	0.624894	0.196962
Pd	Pd48	0.917585	0.874782	0.196932
Pd	Pd49	0.835748	0.000403	0.297100
Pd	Pd50	0.835952	0.750132	0.296749
Pd	Pd51	0.835984	0.499292	0.297048
Pd	Pd52	0.834986	0.249828	0.297243
Pd	Pd53	0.584987	0.125215	0.297128
Pd	Pd54	0.586974	0.877261	0.295947
Pd	Pd55	0.585735	0.625298	0.298224
Pd	Pd56	0.585077	0.373398	0.297717
Pd	Pd57	0.334959	0.000715	0.296675
Pd	Pd58	0.336830	0.751981	0.302450
Pd	Pd59	0.334322	0.496518	0.297428
Pd	Pd60	0.334683	0.248612	0.297347
Pd	Pd61	0.084927	0.124706	0.297204
Pd	Pd62	0.085489	0.875050	0.297222
Pd	Pd63	0.085218	0.624583	0.296947
Pd	Pd64	0.084688	0.374330	0.297320
C	C65	0.418373	0.838748	0.427995
C	C66	0.388509	0.719978	0.397985
O	O67	0.487833	0.638677	0.397156
H	H68	0.519028	0.877193	0.412817
H	H69	0.428018	0.821804	0.475647
H	H70	0.333691	0.904914	0.420767
H	H71	0.277973	0.686562	0.397784
H	H72	0.447102	0.543143	0.350569

Transition state of R87 CCH₂O* + H* = CCH₂OH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165469	0.999729	0.196853
Pd	Pd34	0.166304	0.249375	0.196713
Pd	Pd35	0.166347	0.499275	0.196804
Pd	Pd36	0.168734	0.750036	0.199145
Pd	Pd37	0.415591	0.123634	0.196941
Pd	Pd38	0.418171	0.373343	0.197853
Pd	Pd39	0.416124	0.624835	0.196519
Pd	Pd40	0.415719	0.873404	0.198985
Pd	Pd41	0.664625	0.999958	0.197675
Pd	Pd42	0.664176	0.250797	0.199275
Pd	Pd43	0.667131	0.497767	0.197318
Pd	Pd44	0.667000	0.751080	0.197113
Pd	Pd45	0.914209	0.125385	0.196982
Pd	Pd46	0.916339	0.374275	0.196851
Pd	Pd47	0.917039	0.624787	0.196634
Pd	Pd48	0.916464	0.875178	0.196838
Pd	Pd49	0.080339	0.123228	0.296636
Pd	Pd50	0.080472	0.371083	0.297119
Pd	Pd51	0.081172	0.623426	0.297173
Pd	Pd52	0.081456	0.875555	0.297231
Pd	Pd53	0.331678	0.999010	0.297146
Pd	Pd54	0.329702	0.244854	0.297277
Pd	Pd55	0.326142	0.494621	0.295979
Pd	Pd56	0.329357	0.745760	0.303108
Pd	Pd57	0.580518	0.125577	0.297995
Pd	Pd58	0.579329	0.377921	0.308767
Pd	Pd59	0.591390	0.626066	0.294593
Pd	Pd60	0.583155	0.873834	0.300080
Pd	Pd61	0.830548	0.000243	0.297176
Pd	Pd62	0.828967	0.249886	0.297798
Pd	Pd63	0.837225	0.498144	0.297031
Pd	Pd64	0.836074	0.750455	0.297058
C	C65	0.486769	0.519496	0.347646
C	C66	0.448479	0.582108	0.404799
O	O67	0.398052	0.701141	0.392809
H	H68	0.366328	0.528296	0.427490
H	H69	0.542120	0.586510	0.433667
H	H70	0.515465	0.760377	0.344807

Transition state of R88 $\text{CHCH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CHCH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

data	
_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.165283      0.999821      0.196828
Pd Pd34     0.165689      0.250096      0.196835
Pd Pd35     0.168112      0.500039      0.198296
Pd Pd36     0.168159      0.750098      0.198510
Pd Pd37     0.415708      0.124920      0.196654
Pd Pd38     0.416231      0.374708      0.197151
Pd Pd39     0.416976      0.624633      0.198173
Pd Pd40     0.416247      0.874931      0.197636
Pd Pd41     0.665367      0.998979      0.197013
Pd Pd42     0.666216      0.249723      0.196490
Pd Pd43     0.666845      0.500545      0.197598
Pd Pd44     0.665350      0.748608      0.198797
Pd Pd45     0.915178      0.124418      0.196687
Pd Pd46     0.917009      0.375470      0.197045
Pd Pd47     0.917122      0.625022      0.196837
Pd Pd48     0.915341      0.873973      0.196853
Pd Pd49     0.831315      0.000069      0.297015
Pd Pd50     0.831626      0.748950      0.297591

```

Pd	Pd51	0.833897	0.499050	0.297385
Pd	Pd52	0.832794	0.249588	0.296752
Pd	Pd53	0.582037	0.124200	0.296728
Pd	Pd54	0.583119	0.875675	0.298472
Pd	Pd55	0.582297	0.623033	0.302175
Pd	Pd56	0.585060	0.371464	0.295677
Pd	Pd57	0.330500	0.002416	0.296618
Pd	Pd58	0.322711	0.753600	0.298801
Pd	Pd59	0.332799	0.498977	0.300518
Pd	Pd60	0.331808	0.248868	0.296998
Pd	Pd61	0.081037	0.126014	0.296799
Pd	Pd62	0.077757	0.877119	0.297114
Pd	Pd63	0.079279	0.624378	0.297453
Pd	Pd64	0.083572	0.374906	0.297600
C	C65	0.464339	0.544564	0.366646
C	C66	0.405864	0.634653	0.410076
O	O67	0.374317	0.751055	0.388154
H	H68	0.509924	0.464357	0.389162
H	H69	0.483142	0.644853	0.446444
H	H70	0.309936	0.593043	0.429523
H	H71	0.511958	0.768915	0.344506

Transition state of R89 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}^* + ^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515

Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166105	0.000089	0.196903
Pd	Pd34	0.166176	0.249977	0.196864
Pd	Pd35	0.167525	0.499861	0.198072
Pd	Pd36	0.167041	0.750150	0.197371
Pd	Pd37	0.416121	0.124988	0.196901
Pd	Pd38	0.416671	0.375390	0.198693
Pd	Pd39	0.416887	0.625868	0.197573
Pd	Pd40	0.416436	0.875263	0.197171
Pd	Pd41	0.666063	0.000625	0.196862
Pd	Pd42	0.664914	0.251151	0.198290
Pd	Pd43	0.665389	0.500178	0.197922
Pd	Pd44	0.666517	0.750385	0.197072
Pd	Pd45	0.915557	0.125560	0.196906
Pd	Pd46	0.915791	0.375250	0.196598
Pd	Pd47	0.916345	0.625212	0.196591
Pd	Pd48	0.916264	0.875171	0.196904
Pd	Pd49	0.081754	0.124724	0.296948
Pd	Pd50	0.079333	0.373734	0.296893
Pd	Pd51	0.079037	0.626175	0.296869
Pd	Pd52	0.082346	0.875641	0.297112
Pd	Pd53	0.332207	0.999920	0.297156
Pd	Pd54	0.331879	0.248582	0.296698
Pd	Pd55	0.325356	0.498879	0.298070
Pd	Pd56	0.332672	0.751138	0.298793
Pd	Pd57	0.582524	0.124931	0.297417
Pd	Pd58	0.583556	0.375071	0.302388
Pd	Pd59	0.582224	0.627199	0.298260
Pd	Pd60	0.583304	0.876558	0.296933
Pd	Pd61	0.832237	0.000473	0.297054
Pd	Pd62	0.831969	0.249740	0.297017
Pd	Pd63	0.832103	0.500797	0.296309
Pd	Pd64	0.832410	0.751065	0.297110
C	C65	0.581009	0.410155	0.391447
C	C66	0.434565	0.435637	0.414430
O	O67	0.359928	0.532436	0.387010
H	H68	0.626397	0.327512	0.411062
H	H69	0.652214	0.488110	0.398176
H	H70	0.369888	0.351882	0.412279
H	H71	0.443799	0.461108	0.461584
H	H72	0.439688	0.627682	0.346341

Transition state of R90 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}^* + *$ on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.333333 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.333333 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.583333 0.125000 0.000000
Pd Pd10 0.583333 0.375000 0.000000
Pd Pd11 0.583333 0.625000 0.000000
Pd Pd12 0.583333 0.875000 0.000000
Pd Pd13 0.833333 0.000000 0.000000
Pd Pd14 0.833333 0.250000 0.000000
Pd Pd15 0.833333 0.500000 0.000000
Pd Pd16 0.833333 0.750000 0.000000
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.098515
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.098515
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.098515
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.098515
Pd Pd21 0.250000 0.125000 0.098515
Pd Pd22 0.250000 0.375000 0.098515
Pd Pd23 0.250000 0.625000 0.098515
Pd Pd24 0.250000 0.875000 0.098515
Pd Pd25 0.500000 0.000000 0.098515
Pd Pd26 0.500000 0.250000 0.098515
Pd Pd27 0.500000 0.500000 0.098515
Pd Pd28 0.500000 0.750000 0.098515
Pd Pd29 0.750000 0.125000 0.098515
Pd Pd30 0.750000 0.375000 0.098515
Pd Pd31 0.750000 0.625000 0.098515
Pd Pd32 0.750000 0.875000 0.098515
Pd Pd33 0.165965 0.000017 0.197038
Pd Pd34 0.165442 0.249983 0.196957
Pd Pd35 0.167943 0.499749 0.198865
Pd Pd36 0.165041 0.750045 0.196977
Pd Pd37 0.415926 0.124856 0.196773
Pd Pd38 0.415643 0.374800 0.196972
Pd Pd39 0.415853 0.625170 0.197406
Pd Pd40 0.416349 0.875541 0.197166
Pd Pd41 0.666291 0.999528 0.196839
Pd Pd42 0.665870 0.250137 0.196495
Pd Pd43 0.666081 0.500149 0.197145
Pd Pd44 0.665435 0.747973 0.198910
Pd Pd45 0.915680 0.124909 0.196771
Pd Pd46 0.916579 0.375402 0.196858
Pd Pd47 0.916621 0.625035 0.197004
Pd Pd48 0.915325 0.874760 0.197028
Pd Pd49 0.832485 0.001323 0.297330
Pd Pd50 0.834280 0.752785 0.297765
Pd Pd51 0.832905 0.500186 0.296758
Pd Pd52 0.832447 0.249486 0.296660
Pd Pd53 0.581737 0.124644 0.296649

```

Pd	Pd54	0.582263	0.878309	0.297451
Pd	Pd55	0.586861	0.629370	0.298668
Pd	Pd56	0.583638	0.372082	0.295318
Pd	Pd57	0.331443	0.001763	0.297579
Pd	Pd58	0.329059	0.754264	0.297163
Pd	Pd59	0.326416	0.498369	0.298284
Pd	Pd60	0.330464	0.249314	0.296790
Pd	Pd61	0.081292	0.125340	0.297177
Pd	Pd62	0.081002	0.876820	0.297412
Pd	Pd63	0.079442	0.626709	0.297823
Pd	Pd64	0.079077	0.373996	0.297807
C	C65	0.576067	0.394521	0.427720
C	C66	0.491554	0.511301	0.429820
O	O67	0.463105	0.557890	0.372083
H	H68	0.518563	0.323801	0.402816
H	H69	0.678829	0.410152	0.406513
H	H70	0.595852	0.358303	0.472038
H	H71	0.548599	0.582732	0.454131
H	H72	0.389490	0.496563	0.451640
H	H73	0.358905	0.661752	0.350957

Transition state of R91 CCOO* + H* = CCOOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515

Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166368	0.999774	0.196889
Pd	Pd34	0.167119	0.249406	0.196890
Pd	Pd35	0.168169	0.499336	0.197678
Pd	Pd36	0.168301	0.749879	0.197426
Pd	Pd37	0.416521	0.124482	0.196900
Pd	Pd38	0.417977	0.374410	0.198078
Pd	Pd39	0.416933	0.625134	0.197215
Pd	Pd40	0.417239	0.874454	0.197852
Pd	Pd41	0.665731	0.999642	0.197664
Pd	Pd42	0.665528	0.250892	0.198687
Pd	Pd43	0.667533	0.499005	0.197555
Pd	Pd44	0.667374	0.750553	0.197357
Pd	Pd45	0.915292	0.125151	0.196964
Pd	Pd46	0.917608	0.374481	0.196920
Pd	Pd47	0.918086	0.624654	0.196807
Pd	Pd48	0.916971	0.874875	0.196871
Pd	Pd49	0.082716	0.123270	0.296760
Pd	Pd50	0.083691	0.372170	0.297290
Pd	Pd51	0.084910	0.625235	0.297210
Pd	Pd52	0.084137	0.875472	0.297042
Pd	Pd53	0.333848	0.999814	0.297070
Pd	Pd54	0.331942	0.245662	0.297306
Pd	Pd55	0.329395	0.497647	0.298940
Pd	Pd56	0.333665	0.751708	0.299581
Pd	Pd57	0.583029	0.124408	0.297751
Pd	Pd58	0.584117	0.373649	0.304648
Pd	Pd59	0.589901	0.626379	0.296883
Pd	Pd60	0.583695	0.873785	0.300210
Pd	Pd61	0.832584	0.999368	0.297121
Pd	Pd62	0.832761	0.249107	0.297465
Pd	Pd63	0.839377	0.498787	0.296816
Pd	Pd64	0.836836	0.750262	0.296972
C	C65	0.496329	0.507248	0.347926
C	C66	0.482950	0.553355	0.411230
O	O67	0.481523	0.477040	0.450976
O	O68	0.474549	0.670242	0.414457
H	H69	0.484131	0.735669	0.347450

Transition state of R92 $\text{CHCOO}^* + \text{H}^* = \text{CHCOOH}^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label

```

_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166305	0.000549	0.196803	
Pd	Pd34	0.167141	0.250442	0.196967	
Pd	Pd35	0.168626	0.500282	0.198775	
Pd	Pd36	0.166742	0.749966	0.197376	
Pd	Pd37	0.417051	0.125098	0.196748	
Pd	Pd38	0.417177	0.375309	0.197357	
Pd	Pd39	0.417545	0.624705	0.197802	
Pd	Pd40	0.415793	0.874186	0.197882	
Pd	Pd41	0.666214	0.999696	0.196812	
Pd	Pd42	0.667346	0.250401	0.196583	
Pd	Pd43	0.668001	0.500800	0.197466	
Pd	Pd44	0.666172	0.749033	0.198749	
Pd	Pd45	0.916482	0.125190	0.196787	
Pd	Pd46	0.918183	0.375832	0.197161	
Pd	Pd47	0.917868	0.625319	0.197369	
Pd	Pd48	0.915685	0.874583	0.196795	
Pd	Pd49	0.833791	0.001156	0.296814	
Pd	Pd50	0.833731	0.750312	0.297637	
Pd	Pd51	0.836336	0.500313	0.297570	
Pd	Pd52	0.835003	0.250629	0.296942	
Pd	Pd53	0.584700	0.125880	0.297044	
Pd	Pd54	0.585481	0.877767	0.297451	
Pd	Pd55	0.584183	0.625363	0.301406	
Pd	Pd56	0.586949	0.372358	0.295798	
Pd	Pd57	0.333846	0.003978	0.296939	

Pd	Pd58	0.334218	0.757447	0.297551
Pd	Pd59	0.335404	0.498247	0.300809
Pd	Pd60	0.333755	0.249593	0.297158
Pd	Pd61	0.083362	0.126416	0.297041
Pd	Pd62	0.081418	0.878320	0.296309
Pd	Pd63	0.084569	0.626040	0.299482
Pd	Pd64	0.084981	0.375131	0.297832
C	C65	0.469934	0.545403	0.365743
C	C66	0.411834	0.635382	0.409333
O	O67	0.453797	0.632216	0.460366
O	O68	0.316325	0.717109	0.391945
H	H69	0.524402	0.470881	0.389105
H	H70	0.217372	0.657326	0.348378

Transition state of R93 $\text{CH}_2\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COOH}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515

Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166488	0.999510	0.197019
Pd	Pd34	0.166104	0.249370	0.196618
Pd	Pd35	0.166482	0.499305	0.197065
Pd	Pd36	0.166963	0.749652	0.197513
Pd	Pd37	0.416547	0.124039	0.196794
Pd	Pd38	0.416472	0.374979	0.197936
Pd	Pd39	0.416805	0.625289	0.198131
Pd	Pd40	0.416488	0.874167	0.197533
Pd	Pd41	0.666452	0.999841	0.196801
Pd	Pd42	0.665217	0.250533	0.198163
Pd	Pd43	0.665299	0.499364	0.198236
Pd	Pd44	0.666978	0.749519	0.197407
Pd	Pd45	0.915744	0.125155	0.196756
Pd	Pd46	0.915641	0.374578	0.196639
Pd	Pd47	0.916544	0.624557	0.196674
Pd	Pd48	0.916798	0.875019	0.196756
Pd	Pd49	0.082120	0.123420	0.296849
Pd	Pd50	0.079966	0.372093	0.296735
Pd	Pd51	0.081246	0.624618	0.296942
Pd	Pd52	0.083651	0.874695	0.297511
Pd	Pd53	0.332333	0.998366	0.297408
Pd	Pd54	0.330551	0.246573	0.296128
Pd	Pd55	0.327619	0.495894	0.296621
Pd	Pd56	0.332359	0.748276	0.300347
Pd	Pd57	0.582727	0.123187	0.297186
Pd	Pd58	0.582946	0.371203	0.301753
Pd	Pd59	0.590454	0.629644	0.297424
Pd	Pd60	0.583758	0.877044	0.296902
Pd	Pd61	0.833732	0.000119	0.297184
Pd	Pd62	0.832808	0.248023	0.297200
Pd	Pd63	0.834982	0.498803	0.296359
Pd	Pd64	0.836922	0.752165	0.296730
C	C65	0.562402	0.389590	0.393306
C	C66	0.505247	0.514544	0.393164
O	O67	0.367932	0.528900	0.394067
O	O68	0.589441	0.606286	0.390752
H	H69	0.490199	0.319184	0.408941
H	H70	0.669386	0.382564	0.410596
H	H71	0.334174	0.640126	0.352943

Transition state of R94 $\text{CH}_3\text{COO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COOH}^* + *$ on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000

Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166216	0.000086	0.196935
Pd	Pd34	0.166484	0.249854	0.196874
Pd	Pd35	0.166749	0.499667	0.197021
Pd	Pd36	0.167077	0.749857	0.197906
Pd	Pd37	0.416309	0.124562	0.196839
Pd	Pd38	0.416249	0.375319	0.197337
Pd	Pd39	0.415986	0.625089	0.198275
Pd	Pd40	0.415392	0.873507	0.198447
Pd	Pd41	0.665731	0.999577	0.196945
Pd	Pd42	0.665841	0.250087	0.196959
Pd	Pd43	0.666064	0.499989	0.197180
Pd	Pd44	0.665855	0.749729	0.197173
Pd	Pd45	0.915850	0.124937	0.196905
Pd	Pd46	0.916228	0.375027	0.196921
Pd	Pd47	0.916127	0.624919	0.196648
Pd	Pd48	0.915935	0.874708	0.196696
Pd	Pd49	0.832602	0.000111	0.296907
Pd	Pd50	0.832251	0.750184	0.296954
Pd	Pd51	0.833077	0.499507	0.297007
Pd	Pd52	0.832486	0.249620	0.297066
Pd	Pd53	0.583214	0.125307	0.297199
Pd	Pd54	0.584090	0.876131	0.297060
Pd	Pd55	0.584314	0.624555	0.298116
Pd	Pd56	0.584058	0.373701	0.297470
Pd	Pd57	0.332959	0.001780	0.296955
Pd	Pd58	0.331892	0.751619	0.300651
Pd	Pd59	0.330911	0.497542	0.297987
Pd	Pd60	0.332307	0.248794	0.296901
Pd	Pd61	0.081842	0.125030	0.296921
Pd	Pd62	0.081087	0.875958	0.296527

Pd	Pd63	0.079954	0.624668	0.296249
Pd	Pd64	0.081786	0.374177	0.296944
C	C65	0.314214	0.682234	0.489930
C	C66	0.342818	0.660594	0.425243
O	O67	0.389799	0.557085	0.410569
O	O68	0.316182	0.751669	0.391502
H	H69	0.414524	0.679136	0.513775
H	H70	0.263180	0.770280	0.496995
H	H71	0.248138	0.608142	0.506773
H	H72	0.466205	0.555663	0.345458

Transition state of R95 CCHOO* + H* = CCHOOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167421	0.999424	0.196835

Pd	Pd34	0.166686	0.249661	0.197417
Pd	Pd35	0.164001	0.499701	0.195907
Pd	Pd36	0.168965	0.749851	0.198815
Pd	Pd37	0.416153	0.124518	0.197426
Pd	Pd38	0.416404	0.374184	0.197463
Pd	Pd39	0.415818	0.625620	0.197362
Pd	Pd40	0.416704	0.873870	0.198649
Pd	Pd41	0.666500	0.001870	0.196640
Pd	Pd42	0.664204	0.253330	0.200352
Pd	Pd43	0.665804	0.500154	0.197756
Pd	Pd44	0.667715	0.751693	0.196547
Pd	Pd45	0.915724	0.125869	0.196688
Pd	Pd46	0.916233	0.374812	0.197119
Pd	Pd47	0.916165	0.625617	0.196675
Pd	Pd48	0.918109	0.875690	0.196959
Pd	Pd49	0.834705	0.000752	0.297038
Pd	Pd50	0.836674	0.753190	0.297287
Pd	Pd51	0.835773	0.498636	0.296651
Pd	Pd52	0.834872	0.247345	0.297721
Pd	Pd53	0.582875	0.123780	0.298054
Pd	Pd54	0.587250	0.878755	0.296732
Pd	Pd55	0.592667	0.628841	0.296744
Pd	Pd56	0.585053	0.373414	0.303127
Pd	Pd57	0.334327	0.998039	0.297834
Pd	Pd58	0.336832	0.748756	0.307719
Pd	Pd59	0.324923	0.499811	0.294135
Pd	Pd60	0.332331	0.247615	0.299178
Pd	Pd61	0.083743	0.121985	0.296528
Pd	Pd62	0.086692	0.874931	0.297779
Pd	Pd63	0.078422	0.626332	0.296573
Pd	Pd64	0.081172	0.371342	0.298593
C	C65	0.430534	0.610721	0.346544
C	C66	0.437416	0.514285	0.398576
O	O67	0.553172	0.441097	0.385743
O	O68	0.305831	0.461869	0.396879
H	H69	0.457573	0.555012	0.442484
H	H70	0.266838	0.358211	0.344694

Transition state of R96 CHCHOO* + H* = CHCHOOH* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000

Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166856	0.000513	0.196727
Pd	Pd34	0.166155	0.250696	0.196824
Pd	Pd35	0.168877	0.500301	0.198392
Pd	Pd36	0.168453	0.750273	0.198207
Pd	Pd37	0.416683	0.125500	0.196826
Pd	Pd38	0.416897	0.375547	0.197607
Pd	Pd39	0.418859	0.625717	0.198543
Pd	Pd40	0.416909	0.875597	0.197406
Pd	Pd41	0.666915	0.000185	0.196688
Pd	Pd42	0.666322	0.250556	0.196842
Pd	Pd43	0.666686	0.500840	0.198069
Pd	Pd44	0.667311	0.750090	0.197731
Pd	Pd45	0.916387	0.125664	0.196589
Pd	Pd46	0.916178	0.376028	0.196869
Pd	Pd47	0.917553	0.625014	0.197159
Pd	Pd48	0.917982	0.875320	0.196725
Pd	Pd49	0.833874	0.002047	0.296949
Pd	Pd50	0.839365	0.754404	0.297034
Pd	Pd51	0.833211	0.499675	0.298694
Pd	Pd52	0.833108	0.249470	0.296623
Pd	Pd53	0.583477	0.126068	0.297115
Pd	Pd54	0.585413	0.881145	0.296544
Pd	Pd55	0.591454	0.633206	0.300711
Pd	Pd56	0.582747	0.373530	0.297999
Pd	Pd57	0.332115	0.002528	0.297081
Pd	Pd58	0.329893	0.751708	0.299867
Pd	Pd59	0.326905	0.497009	0.298172
Pd	Pd60	0.332075	0.248942	0.296818
Pd	Pd61	0.082465	0.125423	0.296926
Pd	Pd62	0.084202	0.876942	0.297379
Pd	Pd63	0.080903	0.625310	0.297310
Pd	Pd64	0.079554	0.373445	0.297080
C	C65	0.464855	0.714825	0.363529
C	C66	0.463184	0.597593	0.400861

O	O67	0.366784	0.511153	0.384580
O	O68	0.609168	0.566541	0.393389
H	H69	0.507815	0.793327	0.388287
H	H70	0.446925	0.614264	0.448565
H	H71	0.665597	0.473624	0.345387

Transition state of R97 CH₂CHOO* + H* = CH₂CHOOH* + * on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166479	0.000157	0.196840
Pd	Pd34	0.167052	0.250253	0.197133
Pd	Pd35	0.167062	0.500009	0.197473
Pd	Pd36	0.167207	0.750281	0.197959
Pd	Pd37	0.416122	0.124811	0.197192
Pd	Pd38	0.417207	0.374413	0.197754

Pd	Pd39	0.416298	0.625181	0.198071
Pd	Pd40	0.415555	0.874564	0.198334
Pd	Pd41	0.665994	0.000079	0.196652
Pd	Pd42	0.666007	0.250324	0.197261
Pd	Pd43	0.665621	0.499900	0.197749
Pd	Pd44	0.665644	0.749519	0.198217
Pd	Pd45	0.916051	0.125579	0.196675
Pd	Pd46	0.916041	0.375081	0.196569
Pd	Pd47	0.915974	0.625227	0.196517
Pd	Pd48	0.916565	0.875345	0.196701
Pd	Pd49	0.833159	0.001552	0.296812
Pd	Pd50	0.835155	0.753421	0.296855
Pd	Pd51	0.832689	0.500047	0.296417
Pd	Pd52	0.831725	0.250034	0.297103
Pd	Pd53	0.582634	0.125676	0.296869
Pd	Pd54	0.583494	0.878607	0.297065
Pd	Pd55	0.588440	0.629302	0.297661
Pd	Pd56	0.580793	0.375089	0.299814
Pd	Pd57	0.332447	0.001069	0.297604
Pd	Pd58	0.333432	0.750014	0.301807
Pd	Pd59	0.322434	0.499915	0.296331
Pd	Pd60	0.331509	0.249785	0.298782
Pd	Pd61	0.082509	0.125084	0.296817
Pd	Pd62	0.083424	0.876115	0.297206
Pd	Pd63	0.079189	0.626598	0.296427
Pd	Pd64	0.077769	0.373794	0.296835
C	C65	0.351717	0.712679	0.390488
C	C66	0.434395	0.596238	0.403924
O	O67	0.572546	0.600086	0.384054
O	O68	0.358132	0.490686	0.385946
H	H69	0.406405	0.793171	0.407870
H	H70	0.243128	0.707536	0.406762
H	H71	0.442662	0.586537	0.452706
H	H72	0.441912	0.391628	0.346626

Transition state of R98 $\text{CH}_3\text{CHOO}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CHOOH}^* + *$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000

Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165658	0.999874	0.196895
Pd	Pd34	0.165843	0.249742	0.196938
Pd	Pd35	0.167667	0.499431	0.198341
Pd	Pd36	0.168150	0.750317	0.198503
Pd	Pd37	0.416228	0.125106	0.196714
Pd	Pd38	0.416412	0.374745	0.197843
Pd	Pd39	0.416417	0.624744	0.197283
Pd	Pd40	0.416475	0.875527	0.196712
Pd	Pd41	0.666382	0.000137	0.196485
Pd	Pd42	0.666108	0.250788	0.196897
Pd	Pd43	0.665033	0.501882	0.199251
Pd	Pd44	0.666294	0.749348	0.197248
Pd	Pd45	0.915754	0.125237	0.196713
Pd	Pd46	0.915693	0.375603	0.196806
Pd	Pd47	0.916950	0.624771	0.196638
Pd	Pd48	0.916537	0.874388	0.196873
Pd	Pd49	0.080624	0.123515	0.297349
Pd	Pd50	0.078233	0.371784	0.297380
Pd	Pd51	0.076957	0.624471	0.297306
Pd	Pd52	0.079693	0.875666	0.297597
Pd	Pd53	0.331117	0.000523	0.296627
Pd	Pd54	0.330319	0.246455	0.296970
Pd	Pd55	0.322200	0.495720	0.298662
Pd	Pd56	0.325890	0.750692	0.296714
Pd	Pd57	0.582390	0.125097	0.296790
Pd	Pd58	0.583567	0.371163	0.298560
Pd	Pd59	0.583526	0.622200	0.299927
Pd	Pd60	0.584964	0.878746	0.295252
Pd	Pd61	0.832557	0.000085	0.296837
Pd	Pd62	0.832296	0.248663	0.297099
Pd	Pd63	0.833410	0.498558	0.297392
Pd	Pd64	0.832088	0.749964	0.296725
C	C65	0.274279	0.673373	0.437900
C	C66	0.408129	0.623467	0.409921
O	O67	0.460225	0.709033	0.367582
O	O68	0.388295	0.506858	0.387083
H	H69	0.190912	0.678159	0.404252

H	H70	0.292810	0.764876	0.455535
H	H71	0.239965	0.612500	0.473294
H	H72	0.492846	0.616814	0.443343
H	H73	0.527180	0.488492	0.343793

Transition state of R99 CCOOH* + H* = CCOHOH* + * on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165929	0.000046	0.196719
Pd	Pd34	0.167299	0.249939	0.196952
Pd	Pd35	0.168650	0.499856	0.198200
Pd	Pd36	0.166792	0.749846	0.196948
Pd	Pd37	0.416861	0.124917	0.196957
Pd	Pd38	0.417363	0.374754	0.197821
Pd	Pd39	0.417122	0.624856	0.197776

Pd	Pd40	0.416369	0.874824	0.196838
Pd	Pd41	0.666016	0.000041	0.197090
Pd	Pd42	0.666390	0.250578	0.198474
Pd	Pd43	0.667216	0.499745	0.197723
Pd	Pd44	0.665980	0.748939	0.198200
Pd	Pd45	0.915852	0.125440	0.197029
Pd	Pd46	0.917706	0.374904	0.197090
Pd	Pd47	0.917320	0.624490	0.197012
Pd	Pd48	0.915634	0.874615	0.196819
Pd	Pd49	0.083468	0.124009	0.296810
Pd	Pd50	0.082685	0.373489	0.297377
Pd	Pd51	0.082551	0.626282	0.297242
Pd	Pd52	0.083138	0.875961	0.296718
Pd	Pd53	0.333890	0.000025	0.296674
Pd	Pd54	0.332092	0.247225	0.297297
Pd	Pd55	0.326627	0.500089	0.300114
Pd	Pd56	0.331610	0.752818	0.297462
Pd	Pd57	0.583865	0.123542	0.298025
Pd	Pd58	0.586949	0.369700	0.301241
Pd	Pd59	0.586731	0.630078	0.300148
Pd	Pd60	0.583466	0.875852	0.297305
Pd	Pd61	0.833625	0.999810	0.297210
Pd	Pd62	0.834690	0.248444	0.297896
Pd	Pd63	0.836519	0.499805	0.297237
Pd	Pd64	0.834507	0.751054	0.297364
C	C65	0.497600	0.503435	0.347538
C	C66	0.507702	0.487324	0.411100
O	O67	0.569288	0.394389	0.431118
O	O68	0.451523	0.571494	0.446007
H	H69	0.466972	0.547383	0.486984
H	H70	0.603242	0.343655	0.374176

Transition state of R100 CHCOOH* + H* = CHCOHOH* + * on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000

Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165666	0.999937	0.196816
Pd	Pd34	0.166418	0.250099	0.197105
Pd	Pd35	0.168686	0.500154	0.199150
Pd	Pd36	0.165771	0.749553	0.196953
Pd	Pd37	0.416485	0.124916	0.196784
Pd	Pd38	0.416874	0.374427	0.197190
Pd	Pd39	0.417515	0.624239	0.197684
Pd	Pd40	0.416594	0.875305	0.196499
Pd	Pd41	0.666201	0.999153	0.196913
Pd	Pd42	0.667151	0.250020	0.196628
Pd	Pd43	0.667934	0.500598	0.197739
Pd	Pd44	0.665776	0.747873	0.199335
Pd	Pd45	0.916080	0.124705	0.196823
Pd	Pd46	0.918048	0.375604	0.197213
Pd	Pd47	0.918203	0.624928	0.197733
Pd	Pd48	0.915195	0.873954	0.197103
Pd	Pd49	0.833029	0.000245	0.297044
Pd	Pd50	0.832887	0.749991	0.298111
Pd	Pd51	0.835648	0.500241	0.297545
Pd	Pd52	0.834474	0.249809	0.296769
Pd	Pd53	0.583447	0.124605	0.296842
Pd	Pd54	0.582973	0.877008	0.297637
Pd	Pd55	0.581234	0.626998	0.302514
Pd	Pd56	0.586224	0.371280	0.295551
Pd	Pd57	0.332514	0.001063	0.296763
Pd	Pd58	0.330536	0.754571	0.294947
Pd	Pd59	0.333409	0.497066	0.300120
Pd	Pd60	0.332734	0.248008	0.297281
Pd	Pd61	0.082779	0.125252	0.297099
Pd	Pd62	0.081291	0.877039	0.296880
Pd	Pd63	0.084669	0.626399	0.300347
Pd	Pd64	0.083828	0.374524	0.298044
C	C65	0.467961	0.537344	0.366091
C	C66	0.406085	0.611999	0.412467
O	O67	0.290623	0.669567	0.410698
O	O68	0.479842	0.615100	0.462787
H	H69	0.533030	0.465308	0.386394
H	H70	0.429120	0.667569	0.490448
H	H71	0.235773	0.659379	0.354127

Transition state of R101 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COHOH}^* + *$ on Pd(111)

data_					
_cell_length_a		9.514851			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		22.764721			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'				
loop_					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165886	0.999901	0.196978	
Pd	Pd34	0.166251	0.249800	0.196882	
Pd	Pd35	0.166462	0.499744	0.196878	
Pd	Pd36	0.167413	0.749666	0.198412	
Pd	Pd37	0.416263	0.124396	0.196902	
Pd	Pd38	0.416517	0.374461	0.196665	
Pd	Pd39	0.416156	0.625827	0.198549	
Pd	Pd40	0.415659	0.874326	0.198107	
Pd	Pd41	0.666025	0.999362	0.196923	
Pd	Pd42	0.666078	0.249687	0.197012	
Pd	Pd43	0.665818	0.499982	0.197439	
Pd	Pd44	0.665959	0.749127	0.197500	

Pd	Pd45	0.915868	0.124682	0.196971
Pd	Pd46	0.915890	0.375014	0.197034
Pd	Pd47	0.916398	0.624757	0.197007
Pd	Pd48	0.916091	0.874269	0.196891
Pd	Pd49	0.832393	0.999548	0.296938
Pd	Pd50	0.831927	0.749335	0.297374
Pd	Pd51	0.832845	0.499322	0.297417
Pd	Pd52	0.832627	0.249566	0.297140
Pd	Pd53	0.582995	0.124743	0.297219
Pd	Pd54	0.583549	0.875089	0.296605
Pd	Pd55	0.582605	0.623004	0.299690
Pd	Pd56	0.583583	0.373532	0.297273
Pd	Pd57	0.332724	0.001469	0.296896
Pd	Pd58	0.331130	0.752373	0.302818
Pd	Pd59	0.332314	0.497433	0.295820
Pd	Pd60	0.332389	0.249016	0.296826
Pd	Pd61	0.081927	0.124852	0.297105
Pd	Pd62	0.080947	0.875372	0.296871
Pd	Pd63	0.081217	0.624507	0.296908
Pd	Pd64	0.082119	0.374264	0.296959
C	C65	0.341812	0.762898	0.394887
C	C66	0.321039	0.638563	0.414793
O	O67	0.195323	0.614216	0.439084
O	O68	0.410380	0.552915	0.411157
H	H69	0.260646	0.825772	0.410244
H	H70	0.448987	0.795151	0.403192
H	H71	0.189654	0.526010	0.445459
H	H72	0.488725	0.566829	0.358304

Transition state of R102 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COHOH}^* + *$ on Pd(111)

data

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop

_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000

Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167335	0.999890	0.197236
Pd	Pd34	0.167142	0.249844	0.197296
Pd	Pd35	0.166701	0.499697	0.197177
Pd	Pd36	0.166752	0.749816	0.197157
Pd	Pd37	0.417093	0.124748	0.197319
Pd	Pd38	0.417246	0.374742	0.197181
Pd	Pd39	0.416179	0.624825	0.196760
Pd	Pd40	0.417028	0.874973	0.197518
Pd	Pd41	0.666942	0.999887	0.197592
Pd	Pd42	0.667025	0.249538	0.197325
Pd	Pd43	0.667218	0.499365	0.196971
Pd	Pd44	0.666419	0.750469	0.197242
Pd	Pd45	0.917010	0.124779	0.197233
Pd	Pd46	0.917076	0.374590	0.197252
Pd	Pd47	0.916589	0.624759	0.197087
Pd	Pd48	0.917076	0.875017	0.197000
Pd	Pd49	0.084126	0.124625	0.297282
Pd	Pd50	0.083944	0.374594	0.297456
Pd	Pd51	0.083842	0.624442	0.297436
Pd	Pd52	0.083924	0.874744	0.297235
Pd	Pd53	0.334381	0.999327	0.297629
Pd	Pd54	0.334404	0.249625	0.297271
Pd	Pd55	0.333617	0.499450	0.296976
Pd	Pd56	0.333584	0.749704	0.297033
Pd	Pd57	0.584247	0.124406	0.297689
Pd	Pd58	0.584160	0.374864	0.297526
Pd	Pd59	0.583215	0.623860	0.295940
Pd	Pd60	0.583668	0.874655	0.299826
Pd	Pd61	0.833615	0.999586	0.297333
Pd	Pd62	0.833897	0.249752	0.297395
Pd	Pd63	0.833766	0.499438	0.297619
Pd	Pd64	0.834457	0.749112	0.296415
C	C65	0.452098	0.666924	0.436237
C	C66	0.605646	0.668192	0.426512
O	O67	0.675265	0.566841	0.437400
O	O68	0.676290	0.763780	0.413118
H	H69	0.411074	0.573996	0.437310
H	H70	0.428841	0.714340	0.477763
H	H71	0.400648	0.719353	0.400525
H	H72	0.772167	0.574631	0.422050
H	H73	0.630715	0.818017	0.375111

Transition state of R103 CO₂* + * = CO* + O* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166491	0.999601	0.196857
Pd	Pd34	0.165749	0.249281	0.196627
Pd	Pd35	0.166564	0.499202	0.198028
Pd	Pd36	0.167464	0.749698	0.197909
Pd	Pd37	0.415909	0.123692	0.196893
Pd	Pd38	0.415634	0.374565	0.197694
Pd	Pd39	0.415690	0.624397	0.197285
Pd	Pd40	0.415959	0.873097	0.198755
Pd	Pd41	0.665962	0.000029	0.196858
Pd	Pd42	0.664236	0.251528	0.197999
Pd	Pd43	0.665864	0.499305	0.196751
Pd	Pd44	0.666917	0.749268	0.198106
Pd	Pd45	0.915105	0.125227	0.196672

Pd	Pd46	0.915958	0.374774	0.196634
Pd	Pd47	0.916334	0.625164	0.196556
Pd	Pd48	0.916801	0.875278	0.196855
Pd	Pd49	0.082266	0.123073	0.296649
Pd	Pd50	0.077749	0.371021	0.296942
Pd	Pd51	0.076343	0.625456	0.296521
Pd	Pd52	0.084813	0.875052	0.297184
Pd	Pd53	0.333194	0.997814	0.297534
Pd	Pd54	0.330062	0.246775	0.296738
Pd	Pd55	0.321222	0.494272	0.298746
Pd	Pd56	0.336982	0.745544	0.302348
Pd	Pd57	0.581557	0.124790	0.297093
Pd	Pd58	0.582969	0.372970	0.299623
Pd	Pd59	0.593138	0.632463	0.295054
Pd	Pd60	0.585804	0.879551	0.297938
Pd	Pd61	0.833987	0.001630	0.297203
Pd	Pd62	0.831541	0.248206	0.296978
Pd	Pd63	0.833881	0.498631	0.296381
Pd	Pd64	0.836808	0.754322	0.297461
C	C65	0.347576	0.621436	0.368052
O	O66	0.308572	0.627285	0.417494
O	O67	0.497865	0.529389	0.356659

Transition state of R104 CO* + * = C* + O* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515

Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.168223	0.999732	0.196561
Pd	Pd34	0.165522	0.249568	0.196169
Pd	Pd35	0.164790	0.499603	0.197842
Pd	Pd36	0.169019	0.749697	0.198088
Pd	Pd37	0.415720	0.124288	0.196345
Pd	Pd38	0.414645	0.373907	0.197896
Pd	Pd39	0.420182	0.620161	0.205422
Pd	Pd40	0.418228	0.873445	0.198015
Pd	Pd41	0.666490	0.001965	0.196491
Pd	Pd42	0.663501	0.251862	0.197917
Pd	Pd43	0.666632	0.500257	0.197715
Pd	Pd44	0.668484	0.751235	0.197720
Pd	Pd45	0.914969	0.126683	0.196642
Pd	Pd46	0.914268	0.374850	0.195512
Pd	Pd47	0.916467	0.626370	0.196454
Pd	Pd48	0.918951	0.878409	0.195637
Pd	Pd49	0.080616	0.123320	0.296136
Pd	Pd50	0.067276	0.365543	0.295105
Pd	Pd51	0.076229	0.628977	0.296590
Pd	Pd52	0.086606	0.881644	0.297876
Pd	Pd53	0.334154	0.002496	0.297229
Pd	Pd54	0.327965	0.244277	0.296247
Pd	Pd55	0.295209	0.480003	0.306876
Pd	Pd56	0.328816	0.760021	0.305439
Pd	Pd57	0.580258	0.126342	0.297518
Pd	Pd58	0.582545	0.371813	0.298665
Pd	Pd59	0.623608	0.645231	0.307913
Pd	Pd60	0.587472	0.884262	0.296786
Pd	Pd61	0.832879	0.005972	0.297618
Pd	Pd62	0.827139	0.247438	0.297817
Pd	Pd63	0.836388	0.497247	0.295552
Pd	Pd64	0.847116	0.765154	0.295015
C	C65	0.426949	0.611331	0.293152
O	O66	0.493667	0.510773	0.346609

Transition state of R105 $\text{H}_2\text{COO}^* + ^* = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{O}^*$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x

```

_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165989	0.000028	0.196930
Pd	Pd34	0.167959	0.249853	0.198647
Pd	Pd35	0.167546	0.500640	0.198118
Pd	Pd36	0.166346	0.750284	0.196756
Pd	Pd37	0.416016	0.125743	0.198133
Pd	Pd38	0.416035	0.374385	0.196506
Pd	Pd39	0.417415	0.626385	0.196610
Pd	Pd40	0.416520	0.876119	0.196744
Pd	Pd41	0.666413	0.000084	0.196846
Pd	Pd42	0.666222	0.251149	0.198197
Pd	Pd43	0.666391	0.501117	0.196665
Pd	Pd44	0.665368	0.748735	0.198529
Pd	Pd45	0.916349	0.125241	0.196741
Pd	Pd46	0.916956	0.375228	0.196594
Pd	Pd47	0.916781	0.625044	0.196895
Pd	Pd48	0.915601	0.874546	0.196762
Pd	Pd49	0.081256	0.123655	0.297327
Pd	Pd50	0.078840	0.374639	0.297399
Pd	Pd51	0.079707	0.626766	0.297437
Pd	Pd52	0.081599	0.875516	0.296973
Pd	Pd53	0.331965	0.998986	0.297060
Pd	Pd54	0.329846	0.248986	0.300722
Pd	Pd55	0.325319	0.502526	0.294315
Pd	Pd56	0.330514	0.752614	0.296583
Pd	Pd57	0.584362	0.121574	0.297311
Pd	Pd58	0.588435	0.369801	0.294966

Pd	Pd59	0.584517	0.628998	0.300056
Pd	Pd60	0.582978	0.875891	0.297217
Pd	Pd61	0.833434	0.999235	0.297110
Pd	Pd62	0.834632	0.247933	0.297052
Pd	Pd63	0.833876	0.500408	0.296489
Pd	Pd64	0.833330	0.751236	0.297308
C	C65	0.402646	0.389652	0.409490
O	O66	0.488241	0.483814	0.353272
O	O67	0.394545	0.280640	0.389382
H	H68	0.480028	0.404957	0.444865
H	H69	0.307762	0.447591	0.411078

Transition state of R106 COH* + * = C* + OH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515

Pd	Pd33	0.166146	0.999480	0.196799
Pd	Pd34	0.166141	0.249040	0.196614
Pd	Pd35	0.165964	0.498845	0.196849
Pd	Pd36	0.169516	0.749462	0.199011
Pd	Pd37	0.415865	0.123149	0.196776
Pd	Pd38	0.417460	0.373272	0.197750
Pd	Pd39	0.416707	0.624050	0.197348
Pd	Pd40	0.415873	0.872452	0.198762
Pd	Pd41	0.665928	0.000593	0.196835
Pd	Pd42	0.663814	0.251709	0.199448
Pd	Pd43	0.666451	0.498189	0.197454
Pd	Pd44	0.667639	0.750341	0.196816
Pd	Pd45	0.914748	0.125696	0.196876
Pd	Pd46	0.915944	0.374372	0.196619
Pd	Pd47	0.917037	0.624927	0.196531
Pd	Pd48	0.917580	0.875172	0.196937
Pd	Pd49	0.081182	0.121287	0.296728
Pd	Pd50	0.077682	0.368759	0.297132
Pd	Pd51	0.080611	0.624698	0.296785
Pd	Pd52	0.085136	0.874860	0.297283
Pd	Pd53	0.333712	0.997324	0.297140
Pd	Pd54	0.328896	0.242698	0.296853
Pd	Pd55	0.319573	0.490830	0.296253
Pd	Pd56	0.335796	0.745788	0.304188
Pd	Pd57	0.580958	0.125259	0.297791
Pd	Pd58	0.580798	0.375506	0.308137
Pd	Pd59	0.596347	0.630168	0.295671
Pd	Pd60	0.585370	0.877310	0.296976
Pd	Pd61	0.832457	0.000528	0.296954
Pd	Pd62	0.829569	0.248598	0.297631
Pd	Pd63	0.838234	0.498185	0.296494
Pd	Pd64	0.837957	0.753038	0.297342
C	C65	0.485246	0.520718	0.338844
O	O66	0.391126	0.656099	0.385524
H	H67	0.471862	0.699621	0.402303

Transition state of R107 HCOH* + * = CH* + OH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165157	0.000012	0.196908
Pd	Pd34	0.166262	0.249783	0.196897
Pd	Pd35	0.167517	0.499457	0.197866
Pd	Pd36	0.168519	0.749955	0.198700
Pd	Pd37	0.415704	0.124054	0.196864
Pd	Pd38	0.417515	0.373846	0.197677
Pd	Pd39	0.416954	0.624403	0.197067
Pd	Pd40	0.415289	0.873752	0.198316
Pd	Pd41	0.665485	0.000291	0.196722
Pd	Pd42	0.665238	0.250929	0.197875
Pd	Pd43	0.667082	0.498858	0.197511
Pd	Pd44	0.666252	0.749362	0.197867
Pd	Pd45	0.915003	0.125518	0.196914
Pd	Pd46	0.917008	0.375063	0.197041
Pd	Pd47	0.917212	0.624917	0.196814
Pd	Pd48	0.915843	0.874615	0.196875
Pd	Pd49	0.080652	0.124087	0.296901
Pd	Pd50	0.080957	0.372741	0.297617
Pd	Pd51	0.080711	0.624907	0.297138
Pd	Pd52	0.081677	0.875996	0.296888
Pd	Pd53	0.332547	0.000067	0.297063
Pd	Pd54	0.330135	0.246400	0.297277
Pd	Pd55	0.328204	0.495338	0.298380
Pd	Pd56	0.332831	0.748756	0.300953
Pd	Pd57	0.581392	0.127437	0.297378
Pd	Pd58	0.580502	0.377892	0.302101
Pd	Pd59	0.589727	0.625750	0.298143
Pd	Pd60	0.583909	0.877603	0.296740
Pd	Pd61	0.831258	0.001221	0.296851
Pd	Pd62	0.829952	0.250910	0.297387
Pd	Pd63	0.836335	0.499406	0.297371
Pd	Pd64	0.833771	0.751520	0.297466
C	C65	0.478291	0.531654	0.353568
O	O66	0.384171	0.675776	0.385122
H	H67	0.496527	0.499490	0.398656
H	H68	0.463315	0.725044	0.399283

Transition state of R108 $\text{CH}_2\text{OH}^* + ^* = \text{CH}_2^* + \text{OH}^*$ on Pd(111)

data_					
_cell_length_a		9.514851			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		22.764721			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'				
loop_					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.164587	0.000174	0.197008	
Pd	Pd34	0.165048	0.249752	0.196782	
Pd	Pd35	0.165714	0.499582	0.196969	
Pd	Pd36	0.167538	0.750276	0.199256	
Pd	Pd37	0.415046	0.124103	0.196935	
Pd	Pd38	0.416604	0.373863	0.197282	
Pd	Pd39	0.415020	0.624994	0.196704	
Pd	Pd40	0.414139	0.874222	0.198281	
Pd	Pd41	0.664685	0.000365	0.196721	
Pd	Pd42	0.664173	0.251054	0.198189	
Pd	Pd43	0.665269	0.498746	0.197491	

Pd	Pd44	0.664767	0.748922	0.197664
Pd	Pd45	0.914164	0.125697	0.196977
Pd	Pd46	0.915121	0.375042	0.196877
Pd	Pd47	0.915786	0.625014	0.196668
Pd	Pd48	0.915094	0.874914	0.196846
Pd	Pd49	0.078745	0.124642	0.297004
Pd	Pd50	0.077248	0.373161	0.296989
Pd	Pd51	0.077005	0.625585	0.297066
Pd	Pd52	0.079264	0.876470	0.297263
Pd	Pd53	0.330176	0.000851	0.297490
Pd	Pd54	0.328641	0.247705	0.296702
Pd	Pd55	0.323857	0.497283	0.294957
Pd	Pd56	0.330153	0.749356	0.302362
Pd	Pd57	0.579824	0.127885	0.297599
Pd	Pd58	0.578563	0.378560	0.303399
Pd	Pd59	0.581868	0.625180	0.296564
Pd	Pd60	0.581784	0.878075	0.296189
Pd	Pd61	0.829304	0.001476	0.296929
Pd	Pd62	0.828448	0.250806	0.297681
Pd	Pd63	0.832058	0.500185	0.296875
Pd	Pd64	0.830770	0.751841	0.296982
C	C65	0.491100	0.532498	0.363695
O	O66	0.393647	0.688358	0.387071
H	H67	0.471362	0.742511	0.398030
H	H68	0.393333	0.488332	0.380816
H	H69	0.569174	0.534323	0.399333

Transition state of R109 $\text{CH}_3\text{OH}^* + ^* = \text{CH}_3^* + \text{OH}^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165108	0.000436	0.197064
Pd	Pd34	0.164799	0.250085	0.196949
Pd	Pd35	0.165046	0.500056	0.196662
Pd	Pd36	0.167991	0.750118	0.198913
Pd	Pd37	0.415521	0.125131	0.196915
Pd	Pd38	0.414985	0.374810	0.196697
Pd	Pd39	0.416848	0.625088	0.198739
Pd	Pd40	0.415071	0.875380	0.197259
Pd	Pd41	0.665807	0.000209	0.196460
Pd	Pd42	0.665420	0.250345	0.196690
Pd	Pd43	0.664253	0.501459	0.198082
Pd	Pd44	0.665042	0.749218	0.197764
Pd	Pd45	0.915143	0.125388	0.197015
Pd	Pd46	0.914283	0.375679	0.196900
Pd	Pd47	0.915666	0.625290	0.196844
Pd	Pd48	0.915933	0.875022	0.196597
Pd	Pd49	0.079788	0.125224	0.297331
Pd	Pd50	0.078466	0.373941	0.296935
Pd	Pd51	0.077779	0.623949	0.297084
Pd	Pd52	0.078850	0.876473	0.297250
Pd	Pd53	0.330392	0.001545	0.296957
Pd	Pd54	0.329428	0.249253	0.296975
Pd	Pd55	0.327154	0.496378	0.296240
Pd	Pd56	0.327053	0.749279	0.299339
Pd	Pd57	0.581116	0.125745	0.297088
Pd	Pd58	0.579866	0.372966	0.296377
Pd	Pd59	0.577541	0.625653	0.302598
Pd	Pd60	0.582128	0.878839	0.295317
Pd	Pd61	0.830661	0.000705	0.297046
Pd	Pd62	0.830047	0.250136	0.297241
Pd	Pd63	0.829884	0.499969	0.297232
Pd	Pd64	0.831385	0.751498	0.296419
C	C65	0.552966	0.635175	0.397322
O	O66	0.381892	0.739315	0.386811
H	H67	0.484514	0.570574	0.419631
H	H68	0.647961	0.583500	0.376693
H	H69	0.596834	0.706337	0.425285
H	H70	0.424474	0.819731	0.393532

Transition state of R110 COH* + H* = C* + H₂O* on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721

```

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.166022      0.999488      0.196750
Pd Pd34     0.166714      0.249612      0.196911
Pd Pd35     0.168460      0.499568      0.198346
Pd Pd36     0.167025      0.749504      0.196949
Pd Pd37     0.416317      0.124684      0.196814
Pd Pd38     0.417229      0.374692      0.198253
Pd Pd39     0.417099      0.624362      0.198038
Pd Pd40     0.416790      0.874396      0.196896
Pd Pd41     0.666067      0.999818      0.197037
Pd Pd42     0.665681      0.250908      0.198459
Pd Pd43     0.666730      0.499395      0.198063
Pd Pd44     0.666679      0.749380      0.197911
Pd Pd45     0.915609      0.124958      0.196809
Pd Pd46     0.917286      0.374908      0.196961
Pd Pd47     0.917380      0.624399      0.197050
Pd Pd48     0.916096      0.874235      0.196970
Pd Pd49     0.083061      0.122630      0.296792
Pd Pd50     0.081711      0.372065      0.297355

```

Pd	Pd51	0.081879	0.625970	0.297434
Pd	Pd52	0.083516	0.875269	0.297011
Pd	Pd53	0.334073	0.998653	0.296688
Pd	Pd54	0.331012	0.245475	0.297377
Pd	Pd55	0.323638	0.498333	0.301438
Pd	Pd56	0.331450	0.751734	0.297236
Pd	Pd57	0.583065	0.122888	0.297324
Pd	Pd58	0.586877	0.367932	0.302853
Pd	Pd59	0.588683	0.630761	0.300632
Pd	Pd60	0.583639	0.875311	0.297789
Pd	Pd61	0.833431	0.999061	0.297203
Pd	Pd62	0.834028	0.247466	0.297254
Pd	Pd63	0.836871	0.498849	0.297130
Pd	Pd64	0.834873	0.750939	0.297765
C	C65	0.496500	0.498133	0.344063
O	O66	0.520349	0.540675	0.407410
H	H67	0.428697	0.572742	0.420884
H	H68	0.580480	0.624624	0.380365

Transition state of R111 $\text{HCOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515

Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166127	0.999895	0.197010
Pd	Pd34	0.166789	0.250211	0.197194
Pd	Pd35	0.169349	0.500250	0.198988
Pd	Pd36	0.165981	0.749911	0.196802
Pd	Pd37	0.416585	0.125188	0.196919
Pd	Pd38	0.416959	0.374929	0.197582
Pd	Pd39	0.417295	0.624799	0.198156
Pd	Pd40	0.417280	0.875849	0.196854
Pd	Pd41	0.666629	0.999178	0.197040
Pd	Pd42	0.667438	0.249511	0.196446
Pd	Pd43	0.667535	0.500139	0.197655
Pd	Pd44	0.665562	0.748045	0.199154
Pd	Pd45	0.916481	0.124551	0.196875
Pd	Pd46	0.918361	0.375403	0.197245
Pd	Pd47	0.917420	0.624690	0.197272
Pd	Pd48	0.915482	0.873889	0.197159
Pd	Pd49	0.833259	0.000091	0.297136
Pd	Pd50	0.832156	0.749806	0.298018
Pd	Pd51	0.835689	0.499439	0.297564
Pd	Pd52	0.834833	0.249762	0.296817
Pd	Pd53	0.583594	0.124909	0.296955
Pd	Pd54	0.583017	0.876295	0.297736
Pd	Pd55	0.583193	0.624338	0.302771
Pd	Pd56	0.586595	0.371253	0.295728
Pd	Pd57	0.333408	0.001358	0.297312
Pd	Pd58	0.329596	0.756590	0.296771
Pd	Pd59	0.334853	0.500070	0.302024
Pd	Pd60	0.333460	0.249088	0.297446
Pd	Pd61	0.083473	0.125397	0.297108
Pd	Pd62	0.081782	0.876128	0.297099
Pd	Pd63	0.082953	0.626434	0.297678
Pd	Pd64	0.085439	0.375518	0.298092
C	C65	0.466527	0.549739	0.365902
O	O66	0.405841	0.644174	0.406503
H	H67	0.509966	0.479752	0.395484
H	H68	0.322967	0.608621	0.426005
H	H69	0.360560	0.719546	0.367979

Transition state of R112 $\text{CH}_2\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract	_z		
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166365	0.000210	0.197009	
Pd	Pd34	0.166439	0.250180	0.196896	
Pd	Pd35	0.167571	0.500043	0.198360	
Pd	Pd36	0.166329	0.750083	0.197070	
Pd	Pd37	0.416728	0.125020	0.196821	
Pd	Pd38	0.416514	0.376157	0.198608	
Pd	Pd39	0.416104	0.624480	0.198303	
Pd	Pd40	0.416218	0.874876	0.197006	
Pd	Pd41	0.666147	0.000018	0.197052	
Pd	Pd42	0.666403	0.249942	0.197149	
Pd	Pd43	0.666700	0.500042	0.197386	
Pd	Pd44	0.666148	0.749785	0.197031	
Pd	Pd45	0.916228	0.125323	0.197028	
Pd	Pd46	0.916824	0.375211	0.197064	
Pd	Pd47	0.916694	0.624777	0.196968	
Pd	Pd48	0.916030	0.875085	0.196918	
Pd	Pd49	0.082427	0.125072	0.297139	
Pd	Pd50	0.082388	0.374703	0.297213	
Pd	Pd51	0.082216	0.625776	0.297175	
Pd	Pd52	0.082649	0.875513	0.296989	
Pd	Pd53	0.333090	0.000322	0.297146	
Pd	Pd54	0.332059	0.248385	0.296132	
Pd	Pd55	0.331313	0.501754	0.302933	
Pd	Pd56	0.333209	0.751612	0.297036	
Pd	Pd57	0.582899	0.125506	0.297355	
Pd	Pd58	0.585146	0.374737	0.299114	
Pd	Pd59	0.583845	0.625553	0.297090	

Pd	Pd60	0.583117	0.875469	0.297189
Pd	Pd61	0.832655	0.000308	0.296984
Pd	Pd62	0.832822	0.250053	0.297292
Pd	Pd63	0.833232	0.500418	0.297432
Pd	Pd64	0.832926	0.750406	0.296922
C	C65	0.341380	0.495633	0.391724
O	O66	0.426491	0.389713	0.410487
H	H67	0.236339	0.485897	0.410859
H	H68	0.397202	0.575722	0.408293
H	H69	0.372825	0.315939	0.398260
H	H70	0.518104	0.382596	0.369367

Transition state of R113 $\text{CH}_3\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515

Pd	Pd33	0.166586	0.999793	0.197084
Pd	Pd34	0.166613	0.250052	0.196995
Pd	Pd35	0.166605	0.499857	0.196994
Pd	Pd36	0.166789	0.749821	0.197229
Pd	Pd37	0.416566	0.124783	0.197152
Pd	Pd38	0.417457	0.374925	0.197971
Pd	Pd39	0.416394	0.624963	0.196853
Pd	Pd40	0.416804	0.874759	0.197151
Pd	Pd41	0.666849	0.999815	0.197011
Pd	Pd42	0.665781	0.250686	0.197750
Pd	Pd43	0.666516	0.499208	0.198014
Pd	Pd44	0.667112	0.750019	0.196853
Pd	Pd45	0.916324	0.124839	0.196794
Pd	Pd46	0.916560	0.375106	0.197094
Pd	Pd47	0.916647	0.624694	0.197153
Pd	Pd48	0.916914	0.874680	0.197138
Pd	Pd49	0.083822	0.124469	0.297023
Pd	Pd50	0.083726	0.375233	0.297307
Pd	Pd51	0.083437	0.624963	0.297334
Pd	Pd52	0.083759	0.874632	0.297307
Pd	Pd53	0.333383	0.999480	0.297064
Pd	Pd54	0.332525	0.249688	0.296960
Pd	Pd55	0.332413	0.500299	0.296967
Pd	Pd56	0.333814	0.749597	0.297380
Pd	Pd57	0.583548	0.123758	0.297103
Pd	Pd58	0.583535	0.374010	0.301529
Pd	Pd59	0.583895	0.626558	0.296062
Pd	Pd60	0.583842	0.874877	0.297297
Pd	Pd61	0.833801	0.999710	0.297030
Pd	Pd62	0.835208	0.249478	0.296261
Pd	Pd63	0.833618	0.500162	0.297579
Pd	Pd64	0.833660	0.749922	0.297338
C	C65	0.606768	0.319760	0.413609
O	O66	0.535441	0.499419	0.418425
H	H67	0.545658	0.311827	0.453842
H	H68	0.577466	0.253317	0.378967
H	H69	0.717704	0.341989	0.418201
H	H70	0.600235	0.538248	0.389253
H	H71	0.448523	0.492753	0.394215

Transition state of R114 COOH* + * = CO* + OH* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000

Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165962	0.999220	0.196735
Pd	Pd34	0.164880	0.249379	0.196666
Pd	Pd35	0.167735	0.499499	0.198243
Pd	Pd36	0.166487	0.749175	0.196989
Pd	Pd37	0.416326	0.123713	0.196597
Pd	Pd38	0.415717	0.374351	0.196755
Pd	Pd39	0.416649	0.624321	0.197972
Pd	Pd40	0.416576	0.874240	0.197033
Pd	Pd41	0.666338	0.999225	0.196833
Pd	Pd42	0.664903	0.251065	0.198201
Pd	Pd43	0.665321	0.499874	0.197973
Pd	Pd44	0.665664	0.748291	0.198101
Pd	Pd45	0.915030	0.124759	0.196779
Pd	Pd46	0.915545	0.375021	0.196902
Pd	Pd47	0.916462	0.624299	0.197003
Pd	Pd48	0.915915	0.874170	0.196780
Pd	Pd49	0.081295	0.122542	0.296855
Pd	Pd50	0.077747	0.371436	0.297370
Pd	Pd51	0.079262	0.623574	0.297381
Pd	Pd52	0.082452	0.873760	0.296917
Pd	Pd53	0.331123	0.997312	0.297149
Pd	Pd54	0.329162	0.244683	0.295674
Pd	Pd55	0.323529	0.495089	0.297424
Pd	Pd56	0.330274	0.748365	0.296984
Pd	Pd57	0.582125	0.120337	0.297231
Pd	Pd58	0.582204	0.365993	0.297569
Pd	Pd59	0.587002	0.631668	0.299203
Pd	Pd60	0.582875	0.877117	0.297503
Pd	Pd61	0.833538	0.998646	0.297291
Pd	Pd62	0.832696	0.246420	0.297307
Pd	Pd63	0.831038	0.497494	0.296937
Pd	Pd64	0.835619	0.751440	0.297274

C	C65	0.565970	0.600724	0.382178
O	O66	0.583861	0.627910	0.431380
O	O67	0.469451	0.456984	0.373572
H	H68	0.441168	0.415601	0.409996

Transition state of R115 HCOOH* + * = HCO* + OH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166069	0.000275	0.196784
Pd	Pd34	0.166331	0.250169	0.196708
Pd	Pd35	0.169709	0.500209	0.199098
Pd	Pd36	0.166204	0.750309	0.196968
Pd	Pd37	0.416273	0.125061	0.196752
Pd	Pd38	0.417391	0.375191	0.198360
Pd	Pd39	0.416346	0.625011	0.197632

Pd	Pd40	0.416308	0.875235	0.196814
Pd	Pd41	0.666286	0.000517	0.196781
Pd	Pd42	0.665658	0.251281	0.198127
Pd	Pd43	0.666410	0.499375	0.197610
Pd	Pd44	0.666577	0.750174	0.196600
Pd	Pd45	0.915770	0.125764	0.196824
Pd	Pd46	0.916963	0.375629	0.196928
Pd	Pd47	0.916985	0.624785	0.196836
Pd	Pd48	0.915926	0.875383	0.196830
Pd	Pd49	0.081945	0.124990	0.296836
Pd	Pd50	0.081192	0.374758	0.297060
Pd	Pd51	0.081445	0.626861	0.297181
Pd	Pd52	0.082148	0.876011	0.296949
Pd	Pd53	0.332520	0.000608	0.296778
Pd	Pd54	0.331987	0.248568	0.296083
Pd	Pd55	0.330734	0.500791	0.300558
Pd	Pd56	0.332583	0.752442	0.296778
Pd	Pd57	0.582987	0.125010	0.296986
Pd	Pd58	0.583041	0.375894	0.303101
Pd	Pd59	0.583867	0.628343	0.295646
Pd	Pd60	0.583073	0.876477	0.296929
Pd	Pd61	0.832421	0.000831	0.296997
Pd	Pd62	0.832793	0.250188	0.296874
Pd	Pd63	0.833029	0.501159	0.296961
Pd	Pd64	0.832800	0.751193	0.296696
C	C65	0.576608	0.400270	0.390391
O	O66	0.661716	0.465100	0.414293
O	O67	0.378890	0.487465	0.387441
H	H68	0.403535	0.569832	0.400399
H	H69	0.517434	0.323638	0.410015

Transition state of R116 $\text{H}_2\text{COOH}^* + * = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000

Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166399	0.000696	0.197001
Pd	Pd34	0.167882	0.250609	0.198121
Pd	Pd35	0.164354	0.501007	0.196003
Pd	Pd36	0.165968	0.750880	0.196671
Pd	Pd37	0.416379	0.125941	0.197335
Pd	Pd38	0.415472	0.374829	0.196529
Pd	Pd39	0.416956	0.626507	0.197103
Pd	Pd40	0.416902	0.876350	0.196895
Pd	Pd41	0.667065	0.999821	0.196608
Pd	Pd42	0.667127	0.250602	0.197099
Pd	Pd43	0.664745	0.499136	0.199009
Pd	Pd44	0.664950	0.748656	0.198944
Pd	Pd45	0.917266	0.125570	0.196903
Pd	Pd46	0.916344	0.375495	0.196968
Pd	Pd47	0.914834	0.625475	0.197011
Pd	Pd48	0.915882	0.875159	0.196795
Pd	Pd49	0.083143	0.126870	0.297543
Pd	Pd50	0.081243	0.377432	0.297254
Pd	Pd51	0.081289	0.627881	0.296779
Pd	Pd52	0.082523	0.877464	0.297083
Pd	Pd53	0.331875	0.001978	0.297246
Pd	Pd54	0.331424	0.253218	0.299806
Pd	Pd55	0.327432	0.504458	0.293434
Pd	Pd56	0.330961	0.753589	0.296609
Pd	Pd57	0.584590	0.123691	0.295562
Pd	Pd58	0.584249	0.376090	0.296577
Pd	Pd59	0.582800	0.629705	0.300859
Pd	Pd60	0.582629	0.878591	0.297484
Pd	Pd61	0.834239	0.001645	0.297179
Pd	Pd62	0.834597	0.250320	0.297157
Pd	Pd63	0.834268	0.502166	0.296980
Pd	Pd64	0.834597	0.753465	0.297541
C	C65	0.478745	0.522391	0.416179
O	O66	0.576960	0.582776	0.394532
O	O67	0.484645	0.341471	0.377182
H	H68	0.371712	0.522590	0.396571
H	H69	0.490076	0.485722	0.461035
H	H70	0.540740	0.281049	0.398395

Transition state of R117 COOH* + H* = CO* + H₂O* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd   Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd   Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd   Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd   Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd   Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd   Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd   Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd   Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd   Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd   Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd   Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd   Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd   Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd   Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd   Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd   Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd   Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd   Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd   Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd   Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd   Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd   Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd   Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd   Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd   Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd   Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd   Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd   Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd   Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd   Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd   Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd   Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd   Pd33     0.166629      0.000402      0.196924
Pd   Pd34     0.167016      0.250424      0.196989
Pd   Pd35     0.167192      0.500136      0.197373
Pd   Pd36     0.168107      0.750195      0.198410
Pd   Pd37     0.416414      0.125024      0.197029
Pd   Pd38     0.417201      0.375292      0.197223
Pd   Pd39     0.416455      0.625738      0.198375
Pd   Pd40     0.416058      0.874196      0.198589
Pd   Pd41     0.665945      0.999750      0.197004
Pd   Pd42     0.666531      0.250350      0.196987
Pd   Pd43     0.666977      0.500565      0.196947
Pd   Pd44     0.666892      0.750233      0.197042
Pd   Pd45     0.916264      0.125245      0.196888
Pd   Pd46     0.917059      0.375332      0.197020

```

Pd	Pd47	0.917785	0.625452	0.196945
Pd	Pd48	0.917085	0.875162	0.196813
Pd	Pd49	0.083363	0.126108	0.296794
Pd	Pd50	0.083725	0.375595	0.297374
Pd	Pd51	0.082694	0.624821	0.297182
Pd	Pd52	0.081699	0.876509	0.296895
Pd	Pd53	0.333692	0.002632	0.297177
Pd	Pd54	0.333838	0.250915	0.297362
Pd	Pd55	0.334214	0.498545	0.299029
Pd	Pd56	0.332889	0.752787	0.302822
Pd	Pd57	0.583838	0.126019	0.297083
Pd	Pd58	0.583886	0.375340	0.297290
Pd	Pd59	0.585098	0.624926	0.296745
Pd	Pd60	0.584582	0.876605	0.297420
Pd	Pd61	0.833413	0.001061	0.296752
Pd	Pd62	0.833607	0.250696	0.296994
Pd	Pd63	0.833910	0.500215	0.296907
Pd	Pd64	0.833414	0.750596	0.296878
C	C65	0.321309	0.749581	0.388416
O	O66	0.275034	0.816012	0.425379
O	O67	0.382110	0.630487	0.411007
H	H68	0.338294	0.610291	0.449103
H	H69	0.370382	0.555193	0.367038

Transition state of R118 $\text{HCOOH}^* + \text{H}^* = \text{HCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515

Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166359	0.000026	0.196917
Pd	Pd34	0.166572	0.249842	0.196934
Pd	Pd35	0.167127	0.500114	0.198024
Pd	Pd36	0.166015	0.749656	0.197608
Pd	Pd37	0.416558	0.125378	0.196806
Pd	Pd38	0.415773	0.376686	0.198360
Pd	Pd39	0.416516	0.624977	0.197742
Pd	Pd40	0.416528	0.875261	0.196672
Pd	Pd41	0.666070	0.000713	0.197009
Pd	Pd42	0.665746	0.250938	0.197156
Pd	Pd43	0.667041	0.500461	0.197190
Pd	Pd44	0.667076	0.749892	0.196878
Pd	Pd45	0.916179	0.125257	0.196948
Pd	Pd46	0.915892	0.375135	0.196899
Pd	Pd47	0.919582	0.624838	0.199150
Pd	Pd48	0.915916	0.875286	0.196938
Pd	Pd49	0.832407	0.000805	0.296993
Pd	Pd50	0.832582	0.751092	0.297189
Pd	Pd51	0.831918	0.499241	0.297469
Pd	Pd52	0.831811	0.249910	0.297139
Pd	Pd53	0.582574	0.125924	0.297463
Pd	Pd54	0.583599	0.876218	0.296939
Pd	Pd55	0.583981	0.626211	0.297108
Pd	Pd56	0.582259	0.375667	0.297862
Pd	Pd57	0.333109	0.001410	0.297189
Pd	Pd58	0.334850	0.753921	0.295754
Pd	Pd59	0.333152	0.502458	0.302254
Pd	Pd60	0.333605	0.249485	0.296621
Pd	Pd61	0.082909	0.124831	0.297235
Pd	Pd62	0.082688	0.876582	0.296572
Pd	Pd63	0.082833	0.624445	0.301442
Pd	Pd64	0.080853	0.371222	0.297612
C	C65	0.269600	0.533007	0.389814
O	O66	0.168189	0.608683	0.389852
O	O67	0.225662	0.408663	0.411868
H	H68	0.370258	0.556368	0.411375
H	H69	0.306063	0.353279	0.404914
H	H70	0.143942	0.373086	0.366519

Transition state of R119 $\text{H}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.333333 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.333333 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.583333 0.125000 0.000000
Pd Pd10 0.583333 0.375000 0.000000
Pd Pd11 0.583333 0.625000 0.000000
Pd Pd12 0.583333 0.875000 0.000000
Pd Pd13 0.833333 0.000000 0.000000
Pd Pd14 0.833333 0.250000 0.000000
Pd Pd15 0.833333 0.500000 0.000000
Pd Pd16 0.833333 0.750000 0.000000
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.098515
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.098515
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.098515
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.098515
Pd Pd21 0.250000 0.125000 0.098515
Pd Pd22 0.250000 0.375000 0.098515
Pd Pd23 0.250000 0.625000 0.098515
Pd Pd24 0.250000 0.875000 0.098515
Pd Pd25 0.500000 0.000000 0.098515
Pd Pd26 0.500000 0.250000 0.098515
Pd Pd27 0.500000 0.500000 0.098515
Pd Pd28 0.500000 0.750000 0.098515
Pd Pd29 0.750000 0.125000 0.098515
Pd Pd30 0.750000 0.375000 0.098515
Pd Pd31 0.750000 0.625000 0.098515
Pd Pd32 0.750000 0.875000 0.098515
Pd Pd33 0.166955 0.999832 0.196961
Pd Pd34 0.166432 0.249787 0.196948
Pd Pd35 0.167817 0.499973 0.198337
Pd Pd36 0.167147 0.750149 0.197037
Pd Pd37 0.416741 0.125023 0.196906
Pd Pd38 0.416281 0.375347 0.198066
Pd Pd39 0.416686 0.624139 0.198407
Pd Pd40 0.417282 0.875089 0.196994
Pd Pd41 0.666757 0.999804 0.196892
Pd Pd42 0.666425 0.250137 0.196920
Pd Pd43 0.666269 0.500176 0.197323
Pd Pd44 0.666762 0.749692 0.197264
Pd Pd45 0.916396 0.124929 0.196881
Pd Pd46 0.916505 0.375312 0.196838
Pd Pd47 0.916728 0.625011 0.196814
Pd Pd48 0.916992 0.874721 0.197056
Pd Pd49 0.833709 0.999731 0.297037
Pd Pd50 0.834081 0.750123 0.297265
Pd Pd51 0.832989 0.500196 0.296997
Pd Pd52 0.833316 0.249732 0.296848
Pd Pd53 0.584123 0.124457 0.297154

```

Pd	Pd54	0.584873	0.876196	0.297346
Pd	Pd55	0.583626	0.626177	0.298516
Pd	Pd56	0.584427	0.374019	0.296921
Pd	Pd57	0.333561	0.999865	0.297208
Pd	Pd58	0.334467	0.751476	0.296942
Pd	Pd59	0.332002	0.497618	0.301023
Pd	Pd60	0.333461	0.247478	0.296656
Pd	Pd61	0.082807	0.124147	0.296922
Pd	Pd62	0.083825	0.874821	0.297380
Pd	Pd63	0.082397	0.625556	0.296653
Pd	Pd64	0.081735	0.373883	0.296870
C	C65	0.317242	0.580248	0.422874
O	O66	0.342596	0.482121	0.390260
O	O67	0.438702	0.672828	0.415962
H	H68	0.220661	0.631999	0.411624
H	H69	0.321045	0.556838	0.470118
H	H70	0.404611	0.753927	0.427242
H	H71	0.455958	0.687242	0.355171

Transition state of R120 HOCOH* + * = COH* + OH* on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515

Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165046	0.000779	0.196862
Pd	Pd34	0.166276	0.250558	0.196849
Pd	Pd35	0.168293	0.500394	0.198245
Pd	Pd36	0.167486	0.750908	0.198225
Pd	Pd37	0.415706	0.125352	0.196732
Pd	Pd38	0.416704	0.375417	0.197744
Pd	Pd39	0.416686	0.625382	0.197416
Pd	Pd40	0.415146	0.875043	0.197833
Pd	Pd41	0.665338	0.000311	0.196640
Pd	Pd42	0.665674	0.251055	0.197110
Pd	Pd43	0.666840	0.500134	0.197602
Pd	Pd44	0.665120	0.748787	0.198426
Pd	Pd45	0.915176	0.125636	0.196753
Pd	Pd46	0.917093	0.375867	0.196958
Pd	Pd47	0.916990	0.625329	0.196708
Pd	Pd48	0.915110	0.874860	0.196782
Pd	Pd49	0.830982	0.001851	0.296843
Pd	Pd50	0.831750	0.751944	0.297292
Pd	Pd51	0.834607	0.500235	0.297316
Pd	Pd52	0.831456	0.251069	0.296953
Pd	Pd53	0.581454	0.126979	0.297012
Pd	Pd54	0.582587	0.878161	0.296570
Pd	Pd55	0.585938	0.626204	0.300720
Pd	Pd56	0.583304	0.374501	0.298518
Pd	Pd57	0.331824	0.002780	0.296853
Pd	Pd58	0.327336	0.754045	0.299086
Pd	Pd59	0.329799	0.500374	0.300437
Pd	Pd60	0.330803	0.249548	0.297305
Pd	Pd61	0.080800	0.126302	0.296867
Pd	Pd62	0.079219	0.878043	0.296864
Pd	Pd63	0.078889	0.626299	0.296982
Pd	Pd64	0.081844	0.375111	0.297366
C	C65	0.466482	0.550094	0.359673
O	O66	0.487174	0.509325	0.413439
O	O67	0.367212	0.703704	0.387587
H	H68	0.421155	0.552774	0.439538
H	H69	0.446394	0.757729	0.396920

Transition state of R121 HOCOH* + * = CO* + H₂O* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract	_z		
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165980	0.000163	0.196866	
Pd	Pd34	0.166855	0.250248	0.197113	
Pd	Pd35	0.169527	0.500416	0.198708	
Pd	Pd36	0.166165	0.750216	0.196600	
Pd	Pd37	0.416790	0.125543	0.196805	
Pd	Pd38	0.416861	0.375350	0.197622	
Pd	Pd39	0.417446	0.624795	0.197853	
Pd	Pd40	0.416872	0.875928	0.196394	
Pd	Pd41	0.666564	0.999568	0.196943	
Pd	Pd42	0.667377	0.250315	0.196607	
Pd	Pd43	0.667273	0.500669	0.197820	
Pd	Pd44	0.665313	0.748020	0.198814	
Pd	Pd45	0.916363	0.124838	0.196855	
Pd	Pd46	0.918153	0.375723	0.197079	
Pd	Pd47	0.917563	0.624814	0.197160	
Pd	Pd48	0.915313	0.874192	0.197036	
Pd	Pd49	0.083563	0.125664	0.296994	
Pd	Pd50	0.085288	0.375710	0.297601	
Pd	Pd51	0.082779	0.626347	0.297681	
Pd	Pd52	0.082026	0.876291	0.296852	
Pd	Pd53	0.333303	0.001451	0.296686	
Pd	Pd54	0.333715	0.249435	0.297251	
Pd	Pd55	0.334123	0.501402	0.302213	
Pd	Pd56	0.330731	0.755353	0.294977	
Pd	Pd57	0.584012	0.125008	0.296958	
Pd	Pd58	0.586721	0.371540	0.295859	
Pd	Pd59	0.581350	0.626051	0.303646	

Pd	Pd60	0.583284	0.876649	0.297275
Pd	Pd61	0.833517	0.000269	0.297088
Pd	Pd62	0.835244	0.249935	0.296820
Pd	Pd63	0.835190	0.500000	0.297378
Pd	Pd64	0.832123	0.750005	0.297484
C	C65	0.465430	0.549559	0.368211
O	O66	0.510891	0.481103	0.410193
O	O67	0.391056	0.646740	0.413257
H	H68	0.441067	0.557615	0.440116
H	H69	0.289098	0.645740	0.405315

Transition state of R122 HOCHOH* + * = HCOH* + OH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165648	0.001185	0.196790

Pd	Pd34	0.165421	0.251111	0.196652
Pd	Pd35	0.168734	0.500822	0.198767
Pd	Pd36	0.164750	0.751088	0.196502
Pd	Pd37	0.416366	0.126198	0.196800
Pd	Pd38	0.416811	0.376061	0.198317
Pd	Pd39	0.415774	0.625934	0.196954
Pd	Pd40	0.416347	0.876907	0.196557
Pd	Pd41	0.666255	0.000949	0.196808
Pd	Pd42	0.666060	0.251960	0.198123
Pd	Pd43	0.665380	0.500543	0.198376
Pd	Pd44	0.664499	0.748731	0.198828
Pd	Pd45	0.915644	0.126159	0.196880
Pd	Pd46	0.916790	0.376391	0.197051
Pd	Pd47	0.915982	0.625560	0.196765
Pd	Pd48	0.914534	0.875465	0.196875
Pd	Pd49	0.081894	0.127594	0.297141
Pd	Pd50	0.080912	0.377193	0.297565
Pd	Pd51	0.078804	0.629270	0.297314
Pd	Pd52	0.080713	0.878641	0.296752
Pd	Pd53	0.331011	0.003895	0.297251
Pd	Pd54	0.329954	0.251292	0.296438
Pd	Pd55	0.326527	0.505829	0.299012
Pd	Pd56	0.328539	0.757338	0.295224
Pd	Pd57	0.582270	0.125272	0.297114
Pd	Pd58	0.585526	0.371854	0.300224
Pd	Pd59	0.581475	0.634441	0.298759
Pd	Pd60	0.581869	0.881080	0.297446
Pd	Pd61	0.832838	0.002888	0.297387
Pd	Pd62	0.834582	0.250756	0.297411
Pd	Pd63	0.832050	0.503035	0.296585
Pd	Pd64	0.832482	0.754051	0.297434
C	C65	0.566386	0.386663	0.384571
O	O66	0.479429	0.322469	0.416468
O	O67	0.466614	0.556014	0.372393
H	H68	0.428898	0.611772	0.402016
H	H69	0.645588	0.433190	0.411426
H	H70	0.413989	0.276889	0.389462

Transition state of R123 HOCHOH* + * = HCO* + H₂O* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
 Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
 Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
 Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
 Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
 Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000

Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165941	0.999995	0.196920
Pd	Pd34	0.166446	0.249653	0.196639
Pd	Pd35	0.166629	0.500750	0.197542
Pd	Pd36	0.165384	0.749792	0.197878
Pd	Pd37	0.415839	0.125586	0.196918
Pd	Pd38	0.414923	0.376583	0.198651
Pd	Pd39	0.415790	0.624988	0.197981
Pd	Pd40	0.415959	0.875334	0.196652
Pd	Pd41	0.665445	0.000869	0.196940
Pd	Pd42	0.664833	0.251085	0.197087
Pd	Pd43	0.665969	0.500474	0.197073
Pd	Pd44	0.666453	0.750053	0.196831
Pd	Pd45	0.915600	0.125393	0.196943
Pd	Pd46	0.915054	0.375207	0.196357
Pd	Pd47	0.918327	0.625128	0.198716
Pd	Pd48	0.915542	0.875466	0.196965
Pd	Pd49	0.831391	0.000893	0.296998
Pd	Pd50	0.831774	0.751398	0.297168
Pd	Pd51	0.830191	0.499718	0.297150
Pd	Pd52	0.830291	0.249995	0.296982
Pd	Pd53	0.581280	0.126184	0.297325
Pd	Pd54	0.582496	0.876524	0.296859
Pd	Pd55	0.582971	0.626629	0.297005
Pd	Pd56	0.581054	0.375673	0.297827
Pd	Pd57	0.332103	0.001846	0.297108
Pd	Pd58	0.333872	0.754007	0.296122
Pd	Pd59	0.331473	0.502197	0.302107
Pd	Pd60	0.331375	0.250264	0.297695
Pd	Pd61	0.081455	0.125315	0.297234
Pd	Pd62	0.081899	0.876940	0.296839
Pd	Pd63	0.081556	0.624548	0.301024
Pd	Pd64	0.079261	0.372195	0.294412
C	C65	0.277779	0.531627	0.386350
O	O66	0.230170	0.414055	0.417874

O	O67	0.152270	0.590601	0.392693
H	H68	0.227568	0.348423	0.387030
H	H69	0.128131	0.479462	0.413755
H	H70	0.367294	0.569194	0.411048

Transition state of R124 HOCOH* + H* = COH* + H₂O* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166056	0.999852	0.197010
Pd	Pd34	0.166631	0.250082	0.197135
Pd	Pd35	0.169747	0.500316	0.199307
Pd	Pd36	0.165386	0.749899	0.196597
Pd	Pd37	0.416589	0.125428	0.196935
Pd	Pd38	0.415931	0.375484	0.197692
Pd	Pd39	0.416850	0.624484	0.198214

Pd	Pd40	0.416793	0.875909	0.196612
Pd	Pd41	0.666382	0.998896	0.197152
Pd	Pd42	0.667715	0.248922	0.196086
Pd	Pd43	0.667269	0.500783	0.197539
Pd	Pd44	0.664698	0.747710	0.199152
Pd	Pd45	0.916466	0.124309	0.197038
Pd	Pd46	0.918135	0.375359	0.197131
Pd	Pd47	0.917316	0.624543	0.197234
Pd	Pd48	0.915086	0.873787	0.197131
Pd	Pd49	0.832730	0.999512	0.297341
Pd	Pd50	0.830521	0.749289	0.297746
Pd	Pd51	0.834163	0.499155	0.297412
Pd	Pd52	0.834492	0.249143	0.297023
Pd	Pd53	0.583534	0.124368	0.297209
Pd	Pd54	0.582019	0.875771	0.297756
Pd	Pd55	0.580597	0.623679	0.304118
Pd	Pd56	0.586971	0.369802	0.294092
Pd	Pd57	0.333195	0.001261	0.297214
Pd	Pd58	0.328856	0.756193	0.295912
Pd	Pd59	0.334511	0.500983	0.304615
Pd	Pd60	0.333571	0.249417	0.297400
Pd	Pd61	0.083258	0.125239	0.297147
Pd	Pd62	0.081025	0.875956	0.297043
Pd	Pd63	0.081795	0.626194	0.297593
Pd	Pd64	0.085012	0.375373	0.297736
C	C65	0.462776	0.553905	0.370562
O	O66	0.394231	0.651619	0.407995
O	O67	0.517120	0.480648	0.412094
H	H68	0.468122	0.692063	0.431451
H	H69	0.567464	0.414090	0.390698
H	H70	0.353834	0.717892	0.370513

Transition state of R125 HOCHOH* + H* = HCOH* + H₂O* on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000

Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166610	0.000580	0.197083
Pd	Pd34	0.166904	0.250220	0.197307
Pd	Pd35	0.167697	0.500360	0.198335
Pd	Pd36	0.166369	0.750462	0.196941
Pd	Pd37	0.416776	0.125540	0.197346
Pd	Pd38	0.415650	0.376167	0.198743
Pd	Pd39	0.415978	0.624835	0.198435
Pd	Pd40	0.416076	0.875434	0.196981
Pd	Pd41	0.666116	0.000598	0.197045
Pd	Pd42	0.666403	0.250496	0.196897
Pd	Pd43	0.666439	0.500603	0.197008
Pd	Pd44	0.665892	0.750301	0.196950
Pd	Pd45	0.916565	0.125611	0.197064
Pd	Pd46	0.916591	0.375585	0.196856
Pd	Pd47	0.916547	0.625238	0.196867
Pd	Pd48	0.916046	0.875454	0.196915
Pd	Pd49	0.832507	0.001045	0.296951
Pd	Pd50	0.832605	0.751308	0.296856
Pd	Pd51	0.833108	0.500891	0.297321
Pd	Pd52	0.832710	0.250763	0.297234
Pd	Pd53	0.582510	0.126454	0.297371
Pd	Pd54	0.582702	0.876261	0.297067
Pd	Pd55	0.583908	0.626378	0.297310
Pd	Pd56	0.584675	0.375854	0.296637
Pd	Pd57	0.333031	0.001300	0.297474
Pd	Pd58	0.333032	0.752349	0.297109
Pd	Pd59	0.332557	0.503614	0.303655
Pd	Pd60	0.331793	0.249656	0.299315
Pd	Pd61	0.082503	0.125908	0.297411
Pd	Pd62	0.082695	0.876409	0.296877
Pd	Pd63	0.081619	0.626819	0.296693
Pd	Pd64	0.081697	0.374772	0.296753
C	C65	0.324153	0.498955	0.393066
O	O66	0.387298	0.378829	0.411635
O	O67	0.193403	0.507729	0.416717
H	H68	0.487865	0.383042	0.399563
H	H69	0.125998	0.460073	0.392658
H	H70	0.392209	0.569901	0.411667
H	H71	0.349591	0.306596	0.368284

Transition state of R126 CCOOH* + * = CCO* + OH* on Pd(111)

data_					
_cell_length_a		9.514851			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		22.764721			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'				
loop_					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165787	0.000090	0.196744	
Pd	Pd34	0.166598	0.250008	0.196784	
Pd	Pd35	0.167348	0.499624	0.197723	
Pd	Pd36	0.168605	0.750016	0.198686	
Pd	Pd37	0.416202	0.124250	0.196890	
Pd	Pd38	0.417379	0.374251	0.197411	
Pd	Pd39	0.416680	0.625075	0.197172	
Pd	Pd40	0.415660	0.873799	0.198363	
Pd	Pd41	0.665891	0.000526	0.196734	
Pd	Pd42	0.665095	0.251541	0.198805	
Pd	Pd43	0.666867	0.499488	0.197280	
Pd	Pd44	0.666788	0.749803	0.197660	

Pd	Pd45	0.915355	0.125937	0.196810
Pd	Pd46	0.916703	0.375180	0.196983
Pd	Pd47	0.917324	0.625004	0.196720
Pd	Pd48	0.916456	0.874985	0.196660
Pd	Pd49	0.082143	0.124066	0.296711
Pd	Pd50	0.080439	0.372956	0.297225
Pd	Pd51	0.080276	0.625607	0.297046
Pd	Pd52	0.082364	0.876156	0.296884
Pd	Pd53	0.333152	0.000456	0.297010
Pd	Pd54	0.330846	0.246628	0.297108
Pd	Pd55	0.324738	0.497545	0.297039
Pd	Pd56	0.332838	0.750387	0.301737
Pd	Pd57	0.583166	0.125010	0.297609
Pd	Pd58	0.584729	0.372470	0.302210
Pd	Pd59	0.588585	0.630704	0.296983
Pd	Pd60	0.584736	0.878044	0.296782
Pd	Pd61	0.833211	0.000764	0.296823
Pd	Pd62	0.832888	0.249187	0.297584
Pd	Pd63	0.835534	0.500173	0.297100
Pd	Pd64	0.834945	0.752162	0.297125
C	C65	0.494505	0.507355	0.347160
C	C66	0.481226	0.539459	0.405174
O	O67	0.489806	0.537879	0.456512
O	O68	0.354974	0.711924	0.388632
H	H69	0.417489	0.774989	0.404190

Transition state of R127 CHCOOH* + * = CCO* + OH* on Pd(111)

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'
_cell_length_a 9.514851
_cell_length_b 10.986804
_cell_length_c 22.764721
_cell_angle_alpha 90.000000
_cell_angle_beta 90.000000
_cell_angle_gamma 90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165293	0.999890	0.196823
Pd	Pd34	0.166035	0.249767	0.196601
Pd	Pd35	0.167990	0.499482	0.198155
Pd	Pd36	0.169164	0.749793	0.199116
Pd	Pd37	0.415785	0.124086	0.196719
Pd	Pd38	0.417083	0.374599	0.197636
Pd	Pd39	0.417257	0.624656	0.197723
Pd	Pd40	0.415704	0.873923	0.197751
Pd	Pd41	0.665746	0.000364	0.196548
Pd	Pd42	0.664470	0.251652	0.198870
Pd	Pd43	0.666756	0.500000	0.197781
Pd	Pd44	0.666806	0.749233	0.197007
Pd	Pd45	0.914607	0.125854	0.196910
Pd	Pd46	0.916118	0.375016	0.196778
Pd	Pd47	0.918245	0.624678	0.196624
Pd	Pd48	0.916440	0.874953	0.196584
Pd	Pd49	0.080435	0.123384	0.296674
Pd	Pd50	0.079153	0.371894	0.297178
Pd	Pd51	0.080987	0.623273	0.297484
Pd	Pd52	0.080680	0.875111	0.297168
Pd	Pd53	0.331800	0.999281	0.296852
Pd	Pd54	0.329508	0.245384	0.296410
Pd	Pd55	0.327831	0.494967	0.298728
Pd	Pd56	0.330467	0.748343	0.300743
Pd	Pd57	0.581494	0.124059	0.297458
Pd	Pd58	0.580814	0.375354	0.302405
Pd	Pd59	0.586759	0.628452	0.298949
Pd	Pd60	0.583336	0.876378	0.295887
Pd	Pd61	0.831535	0.999906	0.296732
Pd	Pd62	0.829919	0.249586	0.297666
Pd	Pd63	0.834140	0.499469	0.296751
Pd	Pd64	0.833657	0.750463	0.296334
C	C65	0.538330	0.578511	0.384950
C	C66	0.466738	0.469218	0.363757
O	O67	0.615441	0.606594	0.424555
O	O68	0.379379	0.704541	0.386116
H	H69	0.432904	0.773070	0.402217
H	H70	0.432165	0.406375	0.398746

Transition state of R128 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + * = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(111)

data	
_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  Pd   Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
  Pd   Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
  Pd   Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
  Pd   Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
  Pd   Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
  Pd   Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
  Pd   Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
  Pd   Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
  Pd   Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
  Pd   Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
  Pd   Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
  Pd   Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
  Pd   Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
  Pd   Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
  Pd   Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
  Pd   Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
  Pd   Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
  Pd   Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
  Pd   Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
  Pd   Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
  Pd   Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
  Pd   Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
  Pd   Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
  Pd   Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
  Pd   Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
  Pd   Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
  Pd   Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
  Pd   Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
  Pd   Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
  Pd   Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
  Pd   Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
  Pd   Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
  Pd   Pd33     0.166062      0.000053      0.196798
  Pd   Pd34     0.165619      0.250012      0.196731
  Pd   Pd35     0.168635      0.500080      0.198709
  Pd   Pd36     0.168624      0.750113      0.198548
  Pd   Pd37     0.416241      0.124920      0.196698
  Pd   Pd38     0.416162      0.375007      0.197136
  Pd   Pd39     0.416764      0.624972      0.198826
  Pd   Pd40     0.416016      0.874835      0.197348
  Pd   Pd41     0.666372      0.999902      0.196434
  Pd   Pd42     0.666302      0.250333      0.196477
  Pd   Pd43     0.665343      0.501938      0.198024
  Pd   Pd44     0.665865      0.748988      0.197765
  Pd   Pd45     0.915751      0.125142      0.196818
  Pd   Pd46     0.915913      0.375869      0.196695
  Pd   Pd47     0.917500      0.625223      0.196772
  Pd   Pd48     0.916528      0.874521      0.196799
  Pd   Pd49     0.832303      0.000256      0.296881
  Pd   Pd50     0.831687      0.750259      0.296849

```

Pd	Pd51	0.831002	0.500794	0.296777
Pd	Pd52	0.831939	0.250115	0.296817
Pd	Pd53	0.583107	0.125188	0.297041
Pd	Pd54	0.584016	0.878110	0.295487
Pd	Pd55	0.578694	0.625098	0.303804
Pd	Pd56	0.583865	0.372963	0.295635
Pd	Pd57	0.332143	0.001618	0.296819
Pd	Pd58	0.332534	0.753319	0.301310
Pd	Pd59	0.328470	0.496212	0.299409
Pd	Pd60	0.332082	0.247974	0.296357
Pd	Pd61	0.081384	0.124934	0.296900
Pd	Pd62	0.081060	0.876092	0.297078
Pd	Pd63	0.080066	0.625958	0.297119
Pd	Pd64	0.079304	0.373850	0.296875
C	C65	0.399613	0.737858	0.387090
C	C66	0.517556	0.651039	0.390279
O	O67	0.608543	0.625579	0.424697
O	O68	0.371374	0.498312	0.386661
H	H69	0.428400	0.426411	0.395622
H	H70	0.304931	0.701091	0.408099
H	H71	0.432607	0.826370	0.404833

Transition state of R129 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + * = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515

Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165528	0.000314	0.196918
Pd	Pd34	0.165263	0.250354	0.196633
Pd	Pd35	0.169029	0.500192	0.199152
Pd	Pd36	0.165511	0.750439	0.197010
Pd	Pd37	0.415686	0.124952	0.196469
Pd	Pd38	0.417060	0.375338	0.198232
Pd	Pd39	0.415700	0.625103	0.197490
Pd	Pd40	0.415946	0.875214	0.196868
Pd	Pd41	0.666004	0.000395	0.196734
Pd	Pd42	0.664979	0.251475	0.198096
Pd	Pd43	0.665626	0.499261	0.197749
Pd	Pd44	0.666073	0.750128	0.196623
Pd	Pd45	0.915103	0.125860	0.196985
Pd	Pd46	0.916310	0.375786	0.197011
Pd	Pd47	0.916271	0.624756	0.196853
Pd	Pd48	0.915655	0.875501	0.196959
Pd	Pd49	0.080352	0.125158	0.297018
Pd	Pd50	0.079212	0.374805	0.297202
Pd	Pd51	0.079890	0.626707	0.297220
Pd	Pd52	0.080947	0.876039	0.297124
Pd	Pd53	0.331191	0.000424	0.296817
Pd	Pd54	0.330031	0.248541	0.295384
Pd	Pd55	0.328889	0.500516	0.300335
Pd	Pd56	0.331315	0.752264	0.296833
Pd	Pd57	0.581553	0.124737	0.296191
Pd	Pd58	0.580616	0.375260	0.304050
Pd	Pd59	0.582568	0.628164	0.295459
Pd	Pd60	0.581852	0.876411	0.297029
Pd	Pd61	0.831139	0.000906	0.297221
Pd	Pd62	0.830819	0.250451	0.297090
Pd	Pd63	0.831029	0.501065	0.297149
Pd	Pd64	0.831615	0.751183	0.296768
C	C65	0.508648	0.288326	0.425581
C	C66	0.567483	0.397456	0.393733
O	O67	0.654391	0.469021	0.412004
O	O68	0.380699	0.487032	0.387550
H	H69	0.412570	0.568678	0.398697
H	H70	0.485974	0.315123	0.471165
H	H71	0.412558	0.254639	0.404414
H	H72	0.588789	0.216158	0.425110

Transition state of R130 CCOOH* + H* = CCO* + H₂O* on Pd(111)

```

data
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000
Pd Pd7 0.333333 0.500000 0.000000
Pd Pd8 0.333333 0.750000 0.000000
Pd Pd9 0.583333 0.125000 0.000000
Pd Pd10 0.583333 0.375000 0.000000
Pd Pd11 0.583333 0.625000 0.000000
Pd Pd12 0.583333 0.875000 0.000000
Pd Pd13 0.833333 0.000000 0.000000
Pd Pd14 0.833333 0.250000 0.000000
Pd Pd15 0.833333 0.500000 0.000000
Pd Pd16 0.833333 0.750000 0.000000
Pd Pd17 0.000000 0.000000 0.098515
Pd Pd18 0.000000 0.250000 0.098515
Pd Pd19 0.000000 0.500000 0.098515
Pd Pd20 0.000000 0.750000 0.098515
Pd Pd21 0.250000 0.125000 0.098515
Pd Pd22 0.250000 0.375000 0.098515
Pd Pd23 0.250000 0.625000 0.098515
Pd Pd24 0.250000 0.875000 0.098515
Pd Pd25 0.500000 0.000000 0.098515
Pd Pd26 0.500000 0.250000 0.098515
Pd Pd27 0.500000 0.500000 0.098515
Pd Pd28 0.500000 0.750000 0.098515
Pd Pd29 0.750000 0.125000 0.098515
Pd Pd30 0.750000 0.375000 0.098515
Pd Pd31 0.750000 0.625000 0.098515
Pd Pd32 0.750000 0.875000 0.098515
Pd Pd33 0.167177 0.999444 0.197513
Pd Pd34 0.166107 0.249359 0.196902
Pd Pd35 0.166769 0.499457 0.196927
Pd Pd36 0.168145 0.749424 0.197984
Pd Pd37 0.416770 0.124273 0.197442
Pd Pd38 0.416280 0.374081 0.196995
Pd Pd39 0.417544 0.624025 0.197763
Pd Pd40 0.416786 0.874912 0.197547
Pd Pd41 0.666891 0.999211 0.197991
Pd Pd42 0.666177 0.249925 0.196985
Pd Pd43 0.665539 0.500857 0.198584
Pd Pd44 0.667272 0.748952 0.197573
Pd Pd45 0.916441 0.124481 0.196967
Pd Pd46 0.915557 0.375205 0.196864
Pd Pd47 0.917454 0.624694 0.197098
Pd Pd48 0.917621 0.874406 0.197119
Pd Pd49 0.835554 0.000737 0.297570
Pd Pd50 0.837295 0.749181 0.297329
Pd Pd51 0.833417 0.498614 0.297420
Pd Pd52 0.833405 0.249559 0.297063
Pd Pd53 0.583959 0.125438 0.297614

```

Pd	Pd54	0.588131	0.878966	0.297963
Pd	Pd55	0.585212	0.621357	0.302733
Pd	Pd56	0.583147	0.373783	0.297532
Pd	Pd57	0.332725	0.001259	0.300315
Pd	Pd58	0.328120	0.747726	0.298763
Pd	Pd59	0.331380	0.495475	0.297330
Pd	Pd60	0.333997	0.248372	0.297297
Pd	Pd61	0.084049	0.124640	0.297380
Pd	Pd62	0.083726	0.875426	0.297602
Pd	Pd63	0.082844	0.622617	0.297454
Pd	Pd64	0.082926	0.372929	0.296785
C	C65	0.497643	0.753336	0.347694
C	C66	0.499893	0.790793	0.408585
O	O67	0.567963	0.762178	0.450908
O	O68	0.388488	0.889622	0.418209
H	H69	0.422811	0.945126	0.448888
H	H70	0.361326	0.941115	0.371398

Transition state of R131 $\text{CHCOOH}^* + \text{H}^* = \text{CHCO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515

Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164827	0.000036	0.196866
Pd	Pd34	0.165723	0.250304	0.197228
Pd	Pd35	0.168308	0.500192	0.199033
Pd	Pd36	0.165594	0.749835	0.196830
Pd	Pd37	0.415584	0.125157	0.196782
Pd	Pd38	0.415731	0.375067	0.197476
Pd	Pd39	0.416492	0.624579	0.197774
Pd	Pd40	0.415689	0.875265	0.196746
Pd	Pd41	0.665452	0.999834	0.196903
Pd	Pd42	0.665942	0.250625	0.197010
Pd	Pd43	0.667004	0.500270	0.197829
Pd	Pd44	0.664791	0.748718	0.198735
Pd	Pd45	0.915159	0.125014	0.196876
Pd	Pd46	0.917466	0.375549	0.197351
Pd	Pd47	0.916574	0.625141	0.197341
Pd	Pd48	0.914445	0.874353	0.197090
Pd	Pd49	0.081000	0.125266	0.297011
Pd	Pd50	0.082192	0.375311	0.298264
Pd	Pd51	0.080074	0.626488	0.297753
Pd	Pd52	0.080212	0.876135	0.296712
Pd	Pd53	0.331228	0.000830	0.296699
Pd	Pd54	0.330860	0.248653	0.297298
Pd	Pd55	0.330819	0.500473	0.301596
Pd	Pd56	0.329463	0.753779	0.296210
Pd	Pd57	0.581809	0.125110	0.296890
Pd	Pd58	0.582733	0.372147	0.296738
Pd	Pd59	0.581234	0.626613	0.301205
Pd	Pd60	0.581467	0.876790	0.297458
Pd	Pd61	0.831140	0.000518	0.297289
Pd	Pd62	0.832659	0.250055	0.296863
Pd	Pd63	0.833572	0.499836	0.299181
Pd	Pd64	0.830662	0.750248	0.297815
C	C65	0.471670	0.542024	0.365244
C	C66	0.534051	0.443476	0.400616
O	O67	0.687891	0.470685	0.414890
O	O68	0.482261	0.359457	0.427422
H	H69	0.420750	0.610598	0.393859
H	H70	0.725393	0.395818	0.432855
H	H71	0.750990	0.487322	0.367150

Transition state of R132 $\text{CH}_2\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x

```

_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z			
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166983	0.999669	0.197201
Pd	Pd34	0.167084	0.249637	0.196901
Pd	Pd35	0.165306	0.499534	0.196173
Pd	Pd36	0.167368	0.749768	0.197860
Pd	Pd37	0.416987	0.123971	0.197237
Pd	Pd38	0.417913	0.373893	0.197468
Pd	Pd39	0.416310	0.626121	0.196838
Pd	Pd40	0.416968	0.874524	0.197749
Pd	Pd41	0.667015	0.000611	0.197196
Pd	Pd42	0.665362	0.251447	0.199437
Pd	Pd43	0.666009	0.499171	0.197575
Pd	Pd44	0.667570	0.750576	0.196574
Pd	Pd45	0.916297	0.125614	0.197104
Pd	Pd46	0.916166	0.374546	0.196994
Pd	Pd47	0.916524	0.624857	0.196876
Pd	Pd48	0.917575	0.875273	0.197053
Pd	Pd49	0.084234	0.123899	0.296992
Pd	Pd50	0.082547	0.373446	0.297079
Pd	Pd51	0.084207	0.624455	0.297162
Pd	Pd52	0.085620	0.874075	0.297686
Pd	Pd53	0.334604	0.998507	0.297653
Pd	Pd54	0.333011	0.248484	0.296965
Pd	Pd55	0.329596	0.497043	0.293403
Pd	Pd56	0.335931	0.747288	0.301568
Pd	Pd57	0.583919	0.124254	0.297814
Pd	Pd58	0.582139	0.377622	0.304570

Pd	Pd59	0.586294	0.626477	0.294965
Pd	Pd60	0.584574	0.875022	0.297091
Pd	Pd61	0.834596	0.999926	0.297153
Pd	Pd62	0.833523	0.249230	0.297617
Pd	Pd63	0.835225	0.500172	0.296585
Pd	Pd64	0.835737	0.750626	0.296927
C	C65	0.566335	0.411187	0.395302
C	C66	0.561391	0.540671	0.409813
O	O67	0.650738	0.611911	0.424689
O	O68	0.411738	0.594749	0.410031
H	H69	0.663030	0.371011	0.412875
H	H70	0.471983	0.360619	0.408411
H	H71	0.344269	0.531091	0.396416
H	H72	0.399310	0.662693	0.366148

Transition state of R133 $\text{CH}_3\text{COOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515

Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165550	0.000218	0.197015
Pd	Pd34	0.166681	0.249764	0.196948
Pd	Pd35	0.166402	0.501139	0.197395
Pd	Pd36	0.164621	0.750128	0.197785
Pd	Pd37	0.415378	0.126084	0.197502
Pd	Pd38	0.414421	0.376543	0.198811
Pd	Pd39	0.415272	0.625259	0.197528
Pd	Pd40	0.415525	0.876017	0.196667
Pd	Pd41	0.665020	0.001510	0.197046
Pd	Pd42	0.664579	0.251110	0.197177
Pd	Pd43	0.665759	0.500458	0.196923
Pd	Pd44	0.666057	0.750657	0.196646
Pd	Pd45	0.915468	0.125678	0.196977
Pd	Pd46	0.914679	0.375241	0.196284
Pd	Pd47	0.918096	0.625351	0.198930
Pd	Pd48	0.915007	0.875856	0.197016
Pd	Pd49	0.830118	0.001358	0.297141
Pd	Pd50	0.830780	0.752050	0.297153
Pd	Pd51	0.829341	0.500497	0.297256
Pd	Pd52	0.829042	0.250401	0.297171
Pd	Pd53	0.579670	0.127026	0.297718
Pd	Pd54	0.581056	0.877232	0.296876
Pd	Pd55	0.582189	0.627278	0.296113
Pd	Pd56	0.580258	0.376665	0.297634
Pd	Pd57	0.330887	0.002876	0.297504
Pd	Pd58	0.332532	0.754344	0.295609
Pd	Pd59	0.330399	0.503604	0.302348
Pd	Pd60	0.329896	0.252309	0.300484
Pd	Pd61	0.080172	0.125839	0.297195
Pd	Pd62	0.080953	0.877423	0.296901
Pd	Pd63	0.081403	0.624654	0.301590
Pd	Pd64	0.077278	0.373354	0.293903
C	C65	0.399099	0.569101	0.425782
C	C66	0.270029	0.527607	0.392439
O	O67	0.157507	0.590768	0.391655
O	O68	0.244363	0.394105	0.410785
H	H69	0.372441	0.572065	0.472891
H	H70	0.428522	0.660739	0.411010
H	H71	0.487724	0.506772	0.419191
H	H72	0.141409	0.384126	0.406904
H	H73	0.286485	0.330484	0.363192

Transition state of R134 CCHOOH* + * = CCHO* + OH* on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract_z			
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165505	0.999699	0.196845	
Pd	Pd34	0.166380	0.249409	0.196667	
Pd	Pd35	0.166735	0.499435	0.196987	
Pd	Pd36	0.168834	0.749755	0.198731	
Pd	Pd37	0.415716	0.123766	0.196897	
Pd	Pd38	0.417343	0.373894	0.197742	
Pd	Pd39	0.417609	0.624742	0.197685	
Pd	Pd40	0.415375	0.873196	0.198449	
Pd	Pd41	0.665300	0.000490	0.196860	
Pd	Pd42	0.664540	0.251303	0.198782	
Pd	Pd43	0.666627	0.499221	0.197788	
Pd	Pd44	0.667311	0.750114	0.196525	
Pd	Pd45	0.914819	0.125702	0.196884	
Pd	Pd46	0.916220	0.374782	0.196848	
Pd	Pd47	0.917451	0.624694	0.196714	
Pd	Pd48	0.916447	0.875084	0.196678	
Pd	Pd49	0.081102	0.122737	0.296791	
Pd	Pd50	0.080487	0.371031	0.296960	
Pd	Pd51	0.081557	0.624019	0.296963	
Pd	Pd52	0.082505	0.875454	0.297012	
Pd	Pd53	0.332837	0.998607	0.297151	
Pd	Pd54	0.329314	0.244332	0.297253	
Pd	Pd55	0.324386	0.494390	0.297236	
Pd	Pd56	0.331540	0.747652	0.302125	
Pd	Pd57	0.581208	0.125366	0.297788	
Pd	Pd58	0.581039	0.374712	0.305032	
Pd	Pd59	0.591684	0.628350	0.297222	

Pd	Pd60	0.583882	0.876096	0.296425
Pd	Pd61	0.831743	0.000556	0.296766
Pd	Pd62	0.830148	0.249149	0.297680
Pd	Pd63	0.837849	0.498116	0.297130
Pd	Pd64	0.836144	0.751569	0.296740
C	C65	0.488103	0.510136	0.346235
C	C66	0.497746	0.577661	0.404750
O	O67	0.618942	0.629084	0.408100
O	O68	0.367559	0.688549	0.392096
H	H69	0.448365	0.537699	0.444230
H	H70	0.414763	0.757882	0.410729

Transition state of R135 CHCHOOH* + * = CHCHO* + OH* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515

Pd	Pd33	0.166449	0.999934	0.196801
Pd	Pd34	0.168857	0.250318	0.198252
Pd	Pd35	0.167838	0.500497	0.197315
Pd	Pd36	0.166470	0.750105	0.196367
Pd	Pd37	0.415867	0.127136	0.199028
Pd	Pd38	0.418721	0.375261	0.197933
Pd	Pd39	0.418237	0.625827	0.197333
Pd	Pd40	0.416827	0.876536	0.196714
Pd	Pd41	0.666332	0.999178	0.196786
Pd	Pd42	0.667876	0.249638	0.196748
Pd	Pd43	0.667316	0.500526	0.197874
Pd	Pd44	0.665024	0.748052	0.199210
Pd	Pd45	0.917604	0.123708	0.196418
Pd	Pd46	0.918551	0.374793	0.196648
Pd	Pd47	0.916288	0.624777	0.196747
Pd	Pd48	0.915297	0.873381	0.196942
Pd	Pd49	0.085012	0.124737	0.296958
Pd	Pd50	0.084094	0.376505	0.297032
Pd	Pd51	0.079808	0.627535	0.296760
Pd	Pd52	0.082017	0.876008	0.296621
Pd	Pd53	0.333428	0.000472	0.297428
Pd	Pd54	0.335855	0.253201	0.301435
Pd	Pd55	0.328874	0.506329	0.296670
Pd	Pd56	0.330151	0.755057	0.295704
Pd	Pd57	0.586036	0.121033	0.296794
Pd	Pd58	0.597302	0.367727	0.295606
Pd	Pd59	0.578359	0.621532	0.304847
Pd	Pd60	0.582876	0.874267	0.297747
Pd	Pd61	0.834203	0.998134	0.296913
Pd	Pd62	0.840130	0.246199	0.296077
Pd	Pd63	0.836282	0.500603	0.296837
Pd	Pd64	0.830199	0.749069	0.297962
C	C65	0.447492	0.544428	0.366715
C	C66	0.493074	0.436574	0.402394
O	O67	0.604624	0.377433	0.387934
O	O68	0.340954	0.322300	0.388867
H	H69	0.401696	0.617320	0.394054
H	H70	0.470224	0.441374	0.449956
H	H71	0.377059	0.253149	0.411523

Transition state of R137 $\text{CH}_3\text{CHOOH}^* + ^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + \text{OH}^*$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000

Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165839	0.000057	0.196914
Pd	Pd34	0.166237	0.249781	0.196795
Pd	Pd35	0.166312	0.499363	0.196580
Pd	Pd36	0.165595	0.749972	0.197230
Pd	Pd37	0.416649	0.124736	0.196825
Pd	Pd38	0.416207	0.375214	0.196801
Pd	Pd39	0.415914	0.626928	0.199856
Pd	Pd40	0.415389	0.874920	0.197450
Pd	Pd41	0.666563	0.999482	0.196653
Pd	Pd42	0.666159	0.250004	0.196788
Pd	Pd43	0.664629	0.501152	0.197879
Pd	Pd44	0.665492	0.748867	0.197665
Pd	Pd45	0.915968	0.125069	0.196914
Pd	Pd46	0.915586	0.374916	0.196801
Pd	Pd47	0.915486	0.624535	0.196579
Pd	Pd48	0.916577	0.874809	0.197033
Pd	Pd49	0.833213	0.999828	0.297102
Pd	Pd50	0.833387	0.749710	0.296486
Pd	Pd51	0.833112	0.498197	0.296692
Pd	Pd52	0.832667	0.249040	0.297277
Pd	Pd53	0.583112	0.124795	0.297047
Pd	Pd54	0.583641	0.876823	0.295526
Pd	Pd55	0.583790	0.623491	0.301175
Pd	Pd56	0.582884	0.372062	0.296717
Pd	Pd57	0.332735	0.001412	0.296448
Pd	Pd58	0.330306	0.747126	0.299054
Pd	Pd59	0.331203	0.496488	0.296796
Pd	Pd60	0.331840	0.249106	0.296791
Pd	Pd61	0.081909	0.124953	0.297007
Pd	Pd62	0.081094	0.875194	0.297504
Pd	Pd63	0.079871	0.622149	0.295889
Pd	Pd64	0.081745	0.373506	0.296933

C	C65	0.585245	0.812167	0.433412
C	C66	0.550386	0.681151	0.437400
O	O67	0.562595	0.604172	0.398103
O	O68	0.280280	0.787379	0.382685
H	H69	0.634849	0.844576	0.474137
H	H70	0.652774	0.831375	0.394912
H	H71	0.484561	0.861023	0.428127
H	H72	0.508010	0.648492	0.480089
H	H73	0.202112	0.733178	0.392654

Transition state of R138 CCOHOH* + H* = CCOH* + H₂O* on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166461	0.001027	0.197103
Pd	Pd34	0.169326	0.250883	0.199241

Pd	Pd35	0.164155	0.501218	0.196631
Pd	Pd36	0.165335	0.750934	0.196929
Pd	Pd37	0.416547	0.127518	0.199878
Pd	Pd38	0.416424	0.376073	0.196747
Pd	Pd39	0.417681	0.627720	0.197926
Pd	Pd40	0.414875	0.877383	0.197353
Pd	Pd41	0.665236	0.998608	0.197649
Pd	Pd42	0.668999	0.246598	0.196125
Pd	Pd43	0.667323	0.504130	0.196568
Pd	Pd44	0.662908	0.749313	0.199592
Pd	Pd45	0.918327	0.124072	0.197396
Pd	Pd46	0.916121	0.374549	0.196874
Pd	Pd47	0.915552	0.626236	0.196868
Pd	Pd48	0.914230	0.874467	0.197099
Pd	Pd49	0.086983	0.127066	0.297930
Pd	Pd50	0.079902	0.376635	0.297343
Pd	Pd51	0.075787	0.631874	0.297978
Pd	Pd52	0.080255	0.879310	0.296698
Pd	Pd53	0.333501	0.005169	0.298405
Pd	Pd54	0.337954	0.261152	0.306529
Pd	Pd55	0.316826	0.511911	0.294671
Pd	Pd56	0.328396	0.757453	0.297390
Pd	Pd57	0.585056	0.124128	0.300720
Pd	Pd58	0.601935	0.371350	0.290492
Pd	Pd59	0.573531	0.614406	0.311000
Pd	Pd60	0.578913	0.873212	0.298663
Pd	Pd61	0.830762	0.998700	0.297462
Pd	Pd62	0.839436	0.246470	0.298268
Pd	Pd63	0.837650	0.502613	0.297365
Pd	Pd64	0.825076	0.749638	0.297839
C	C65	0.469737	0.451069	0.343479
C	C66	0.412346	0.358251	0.382055
O	O67	0.317576	0.376510	0.426003
O	O68	0.520533	0.273039	0.410422
H	H69	0.244904	0.430935	0.410041
H	H70	0.609248	0.319955	0.412970
H	H71	0.543741	0.206700	0.372063

Transition state of R139 CHCOHOH* + H* = CHCOH* + H₂O* on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 Pd Pd1 0.083333 0.125000 0.000000
 Pd Pd2 0.083333 0.375000 0.000000
 Pd Pd3 0.083333 0.625000 0.000000
 Pd Pd4 0.083333 0.875000 0.000000
 Pd Pd5 0.333333 0.000000 0.000000
 Pd Pd6 0.333333 0.250000 0.000000

Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164717	0.999989	0.196800
Pd	Pd34	0.165677	0.250170	0.196994
Pd	Pd35	0.168357	0.499980	0.198858
Pd	Pd36	0.165481	0.749813	0.196796
Pd	Pd37	0.415853	0.124932	0.196757
Pd	Pd38	0.416404	0.374833	0.197805
Pd	Pd39	0.416286	0.624559	0.197666
Pd	Pd40	0.415652	0.875228	0.196780
Pd	Pd41	0.665305	0.000030	0.196915
Pd	Pd42	0.665628	0.251340	0.198306
Pd	Pd43	0.666862	0.500249	0.198018
Pd	Pd44	0.664832	0.748871	0.198679
Pd	Pd45	0.914935	0.125205	0.196944
Pd	Pd46	0.917623	0.375262	0.197376
Pd	Pd47	0.916625	0.625215	0.197095
Pd	Pd48	0.914257	0.874438	0.197053
Pd	Pd49	0.081408	0.125089	0.297025
Pd	Pd50	0.083137	0.374864	0.298320
Pd	Pd51	0.080151	0.626453	0.297622
Pd	Pd52	0.079946	0.876086	0.296687
Pd	Pd53	0.331052	0.001041	0.296814
Pd	Pd54	0.330554	0.248337	0.296901
Pd	Pd55	0.330882	0.501013	0.301088
Pd	Pd56	0.328678	0.754171	0.296384
Pd	Pd57	0.581819	0.124154	0.297349
Pd	Pd58	0.584234	0.370899	0.299881
Pd	Pd59	0.579704	0.628978	0.300559
Pd	Pd60	0.581157	0.877108	0.297625
Pd	Pd61	0.831270	0.000137	0.297289
Pd	Pd62	0.833514	0.249237	0.297399
Pd	Pd63	0.835243	0.499288	0.298218
Pd	Pd64	0.830391	0.749813	0.297832
C	C65	0.472639	0.541112	0.364559
C	C66	0.549544	0.431861	0.382992

O	O67	0.691051	0.460616	0.411260
O	O68	0.491925	0.349638	0.421540
H	H69	0.422470	0.597424	0.398857
H	H70	0.407188	0.316708	0.402255
H	H71	0.688700	0.548088	0.421155
H	H72	0.766804	0.460600	0.368782

Transition state of R140 $\text{CH}_2\text{COHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_2\text{COH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166896	0.999858	0.197113
Pd	Pd34	0.167281	0.249756	0.196931
Pd	Pd35	0.166288	0.499786	0.196271
Pd	Pd36	0.167082	0.749917	0.197302
Pd	Pd37	0.417167	0.124478	0.197075

Pd	Pd38	0.418268	0.374198	0.197680
Pd	Pd39	0.417196	0.625549	0.197713
Pd	Pd40	0.417494	0.874986	0.197426
Pd	Pd41	0.666748	0.999997	0.197266
Pd	Pd42	0.665493	0.251527	0.199132
Pd	Pd43	0.666330	0.499454	0.197738
Pd	Pd44	0.666143	0.748553	0.198656
Pd	Pd45	0.915980	0.125296	0.197021
Pd	Pd46	0.916683	0.374525	0.196711
Pd	Pd47	0.916890	0.625022	0.196706
Pd	Pd48	0.916830	0.875072	0.196957
Pd	Pd49	0.084088	0.124122	0.297019
Pd	Pd50	0.083168	0.373566	0.296931
Pd	Pd51	0.084570	0.625326	0.297043
Pd	Pd52	0.084673	0.875132	0.297514
Pd	Pd53	0.334825	0.999776	0.297394
Pd	Pd54	0.333737	0.249036	0.297189
Pd	Pd55	0.328958	0.497536	0.294358
Pd	Pd56	0.333984	0.751394	0.299317
Pd	Pd57	0.584055	0.124911	0.297651
Pd	Pd58	0.583993	0.377485	0.304594
Pd	Pd59	0.584840	0.622997	0.301125
Pd	Pd60	0.584565	0.874852	0.297841
Pd	Pd61	0.833910	0.999763	0.297370
Pd	Pd62	0.833915	0.249228	0.297353
Pd	Pd63	0.836844	0.499901	0.295761
Pd	Pd64	0.835723	0.750813	0.296975
C	C65	0.582399	0.446575	0.390512
C	C66	0.572797	0.580281	0.389028
O	O67	0.671612	0.641808	0.420758
O	O68	0.428852	0.626642	0.408329
H	H69	0.682543	0.415644	0.408999
H	H70	0.491168	0.399689	0.409480
H	H71	0.684083	0.723517	0.403893
H	H72	0.360130	0.562586	0.396275
H	H73	0.394720	0.699572	0.367102

Transition state of R141 $\text{CH}_3\text{COHOH}^* + \text{H}^* = \text{CH}_3\text{COH}^* + \text{H}_2\text{O}^*$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000

Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167073	0.999528	0.197140
Pd	Pd34	0.166646	0.249643	0.196977
Pd	Pd35	0.166760	0.500092	0.196845
Pd	Pd36	0.167421	0.749645	0.197005
Pd	Pd37	0.417095	0.124558	0.197130
Pd	Pd38	0.416604	0.374677	0.196953
Pd	Pd39	0.418312	0.624886	0.198636
Pd	Pd40	0.417195	0.874769	0.197125
Pd	Pd41	0.667586	0.000385	0.196922
Pd	Pd42	0.666612	0.250344	0.197062
Pd	Pd43	0.665566	0.500777	0.198517
Pd	Pd44	0.666539	0.748700	0.198684
Pd	Pd45	0.916833	0.124644	0.197041
Pd	Pd46	0.916394	0.374796	0.196604
Pd	Pd47	0.916725	0.625196	0.197142
Pd	Pd48	0.916847	0.874557	0.197070
Pd	Pd49	0.083971	0.124435	0.297131
Pd	Pd50	0.083396	0.374259	0.296796
Pd	Pd51	0.083299	0.624824	0.297404
Pd	Pd52	0.083859	0.874664	0.297231
Pd	Pd53	0.334054	0.999450	0.297463
Pd	Pd54	0.333651	0.249191	0.297005
Pd	Pd55	0.332082	0.499058	0.296522
Pd	Pd56	0.333019	0.750206	0.297106
Pd	Pd57	0.584102	0.124915	0.297487
Pd	Pd58	0.583529	0.373815	0.297312
Pd	Pd59	0.581868	0.622779	0.306053
Pd	Pd60	0.585313	0.876336	0.297031
Pd	Pd61	0.834286	0.000078	0.297318
Pd	Pd62	0.833806	0.249544	0.297090
Pd	Pd63	0.834479	0.498824	0.296069
Pd	Pd64	0.834217	0.750051	0.297911
C	C65	0.468890	0.576042	0.428496
C	C66	0.594478	0.627798	0.396473
O	O67	0.715423	0.576082	0.416943

O	O68	0.603868	0.763669	0.412105
H	H69	0.459942	0.478715	0.418377
H	H70	0.371174	0.621108	0.414772
H	H71	0.484048	0.587133	0.476231
H	H72	0.794795	0.599075	0.390951
H	H73	0.506914	0.795486	0.411555
H	H74	0.644577	0.813523	0.362020

Transition state of R142 C* + CO* = CCO* + * on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166394	0.999552	0.196737
Pd	Pd34	0.165838	0.249344	0.196504
Pd	Pd35	0.166367	0.499261	0.197752
Pd	Pd36	0.168722	0.749551	0.198420

Pd	Pd37	0.415814	0.123847	0.196814
Pd	Pd38	0.416075	0.375212	0.198289
Pd	Pd39	0.417010	0.624886	0.197684
Pd	Pd40	0.416327	0.872638	0.198755
Pd	Pd41	0.665899	0.001103	0.196766
Pd	Pd42	0.663820	0.252033	0.198819
Pd	Pd43	0.666170	0.499538	0.197391
Pd	Pd44	0.668105	0.750833	0.197019
Pd	Pd45	0.914882	0.125920	0.196745
Pd	Pd46	0.915700	0.374763	0.196522
Pd	Pd47	0.917041	0.625414	0.196696
Pd	Pd48	0.917691	0.875720	0.196917
Pd	Pd49	0.082376	0.121984	0.296504
Pd	Pd50	0.077943	0.369314	0.296916
Pd	Pd51	0.078373	0.626203	0.296856
Pd	Pd52	0.086379	0.875531	0.297433
Pd	Pd53	0.334204	0.996792	0.297162
Pd	Pd54	0.329014	0.244506	0.296364
Pd	Pd55	0.319506	0.494643	0.300109
Pd	Pd56	0.337628	0.745122	0.304574
Pd	Pd57	0.580795	0.125611	0.297633
Pd	Pd58	0.581321	0.374766	0.304603
Pd	Pd59	0.597529	0.632558	0.297191
Pd	Pd60	0.586880	0.878700	0.297108
Pd	Pd61	0.833417	0.002172	0.297027
Pd	Pd62	0.829928	0.248736	0.297388
Pd	Pd63	0.837977	0.498411	0.296384
Pd	Pd64	0.838975	0.754938	0.297579
C	C65	0.497971	0.514873	0.341296
C	C66	0.367103	0.626128	0.370571
O	O67	0.341795	0.633794	0.421559

Transition state of R143 CH* + CO* = CHCO* + * on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000

Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165987	0.999687	0.196730
Pd	Pd34	0.165595	0.249589	0.196629
Pd	Pd35	0.167422	0.499365	0.198421
Pd	Pd36	0.168017	0.749557	0.197949
Pd	Pd37	0.415666	0.124281	0.196776
Pd	Pd38	0.415770	0.375038	0.198088
Pd	Pd39	0.416657	0.624671	0.197724
Pd	Pd40	0.415994	0.873401	0.198155
Pd	Pd41	0.665392	0.000685	0.196711
Pd	Pd42	0.664427	0.251707	0.197998
Pd	Pd43	0.665951	0.500436	0.197595
Pd	Pd44	0.666737	0.749820	0.197878
Pd	Pd45	0.914724	0.125671	0.196724
Pd	Pd46	0.915956	0.375200	0.196672
Pd	Pd47	0.916955	0.625254	0.196588
Pd	Pd48	0.916469	0.875231	0.196823
Pd	Pd49	0.081513	0.122701	0.296462
Pd	Pd50	0.077911	0.370754	0.296993
Pd	Pd51	0.077379	0.625563	0.296640
Pd	Pd52	0.084250	0.875107	0.296960
Pd	Pd53	0.333357	0.997813	0.297011
Pd	Pd54	0.329129	0.245460	0.296842
Pd	Pd55	0.321595	0.494474	0.301383
Pd	Pd56	0.336311	0.745888	0.301855
Pd	Pd57	0.580903	0.126124	0.297281
Pd	Pd58	0.580079	0.375982	0.300311
Pd	Pd59	0.592188	0.630046	0.299384
Pd	Pd60	0.585972	0.878252	0.296945
Pd	Pd61	0.832682	0.001958	0.297002
Pd	Pd62	0.829894	0.249567	0.297155
Pd	Pd63	0.835363	0.499159	0.296801
Pd	Pd64	0.836032	0.753503	0.297343
C	C65	0.500087	0.510690	0.352069
C	C66	0.371161	0.625275	0.367261
O	O67	0.339607	0.645032	0.417360
H	H68	0.526757	0.484418	0.397376

Transition state of R144 $\text{CH}_2^* + \text{CO}^* = \text{CH}_2\text{CO}^* + *$ on Pd(111)
data_

_cell_length_a	9.514851		
_cell_length_b	10.986804		
_cell_length_c	22.764721		
_cell_angle_alpha	90.000000		
_cell_angle_beta	90.000000		
_cell_angle_gamma	90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'		
loop_			
_atom_site_type_symbol			
_atom_site_label			
_atom_site_fract_x			
_atom_site_fract_y			
_atom_site_fract_z			
Pd Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd Pd33	0.166463	0.000014	0.196953
Pd Pd34	0.165601	0.249652	0.196739
Pd Pd35	0.165630	0.499507	0.196618
Pd Pd36	0.168583	0.749937	0.198790
Pd Pd37	0.416229	0.124172	0.196755
Pd Pd38	0.416600	0.374217	0.197054
Pd Pd39	0.415646	0.625660	0.197671
Pd Pd40	0.416178	0.874184	0.198205
Pd Pd41	0.666168	0.001010	0.196707
Pd Pd42	0.664250	0.252770	0.198550
Pd Pd43	0.664918	0.500851	0.198070
Pd Pd44	0.666270	0.749489	0.197941
Pd Pd45	0.915021	0.126331	0.196876
Pd Pd46	0.915013	0.375518	0.196681
Pd Pd47	0.916584	0.625450	0.196673

Pd	Pd48	0.917159	0.875504	0.196875
Pd	Pd49	0.081917	0.123540	0.296831
Pd	Pd50	0.077271	0.371588	0.296654
Pd	Pd51	0.079788	0.625171	0.297025
Pd	Pd52	0.086025	0.875322	0.297512
Pd	Pd53	0.333564	0.999488	0.297412
Pd	Pd54	0.330094	0.246494	0.296651
Pd	Pd55	0.321515	0.494301	0.294452
Pd	Pd56	0.335817	0.746097	0.304819
Pd	Pd57	0.581892	0.127587	0.297461
Pd	Pd58	0.578449	0.377935	0.302092
Pd	Pd59	0.587975	0.630411	0.299183
Pd	Pd60	0.586803	0.881155	0.296452
Pd	Pd61	0.833684	0.002115	0.297001
Pd	Pd62	0.830304	0.250450	0.297523
Pd	Pd63	0.833564	0.500524	0.296666
Pd	Pd64	0.837488	0.753640	0.296745
C	C65	0.496248	0.513251	0.363985
C	C66	0.464147	0.678842	0.369899
O	O67	0.479101	0.727132	0.416642
H	H68	0.389617	0.489384	0.381450
H	H69	0.572664	0.495260	0.399234

Transition state of R145 $\text{CH}_3^* + \text{CO}^* = \text{CH}_3\text{CO}^* + ^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515

Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166045	0.000196	0.196781
Pd	Pd34	0.166502	0.250141	0.196920
Pd	Pd35	0.168141	0.500027	0.198122
Pd	Pd36	0.167872	0.749984	0.198052
Pd	Pd37	0.416398	0.125095	0.196756
Pd	Pd38	0.416016	0.375839	0.197634
Pd	Pd39	0.416476	0.624875	0.197957
Pd	Pd40	0.415618	0.874003	0.198052
Pd	Pd41	0.666125	0.999752	0.196701
Pd	Pd42	0.666451	0.250399	0.196642
Pd	Pd43	0.665837	0.501069	0.197586
Pd	Pd44	0.665204	0.748868	0.198092
Pd	Pd45	0.915984	0.125173	0.196926
Pd	Pd46	0.916781	0.375724	0.196913
Pd	Pd47	0.916647	0.625125	0.196589
Pd	Pd48	0.915820	0.874476	0.196694
Pd	Pd49	0.833137	0.000809	0.296984
Pd	Pd50	0.831584	0.750775	0.297046
Pd	Pd51	0.832559	0.499662	0.296840
Pd	Pd52	0.833621	0.249697	0.297050
Pd	Pd53	0.583023	0.125403	0.297137
Pd	Pd54	0.584357	0.878068	0.296567
Pd	Pd55	0.581684	0.625887	0.301850
Pd	Pd56	0.585222	0.372041	0.296011
Pd	Pd57	0.332941	0.001763	0.296563
Pd	Pd58	0.332708	0.749785	0.300767
Pd	Pd59	0.332403	0.501014	0.301799
Pd	Pd60	0.332819	0.250258	0.296957
Pd	Pd61	0.082944	0.125543	0.296814
Pd	Pd62	0.081402	0.876134	0.296411
Pd	Pd63	0.078488	0.625217	0.296492
Pd	Pd64	0.082999	0.375164	0.297119
C	C65	0.355036	0.716438	0.398742
C	C66	0.451732	0.571112	0.368854
O	O67	0.490075	0.513827	0.411008
H	H68	0.298580	0.801125	0.383569
H	H69	0.447289	0.745043	0.423670
H	H70	0.280486	0.661612	0.423754

Transition state of R146 C* + CO₂* = CCOO* + * on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

```

loop_	_atom_site_type_symbol	_atom_site_label	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
	Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
	Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
	Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
	Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
	Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
	Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
	Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
	Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
	Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
	Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
	Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
	Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
	Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
	Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
	Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
	Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
	Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
	Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
	Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
	Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
	Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
	Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
	Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
	Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
	Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
	Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
	Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
	Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
	Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
	Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
	Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
	Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
	Pd	Pd33	0.166622	0.999246	0.197062
	Pd	Pd34	0.165987	0.249397	0.196827
	Pd	Pd35	0.165248	0.499550	0.196911
	Pd	Pd36	0.167987	0.749393	0.198595
	Pd	Pd37	0.416266	0.123640	0.197014
	Pd	Pd38	0.416644	0.374077	0.197469
	Pd	Pd39	0.415726	0.625294	0.196883
	Pd	Pd40	0.416272	0.873531	0.198468
	Pd	Pd41	0.666702	0.000386	0.196700
	Pd	Pd42	0.665001	0.250985	0.198446
	Pd	Pd43	0.665214	0.499008	0.197569
	Pd	Pd44	0.667006	0.750310	0.196992
	Pd	Pd45	0.915812	0.124939	0.196845
	Pd	Pd46	0.915599	0.374647	0.196827
	Pd	Pd47	0.915708	0.624904	0.196852
	Pd	Pd48	0.917465	0.874676	0.197084
	Pd	Pd49	0.833955	0.000320	0.297235
	Pd	Pd50	0.835050	0.751815	0.297555
	Pd	Pd51	0.833610	0.497576	0.296801
	Pd	Pd52	0.833242	0.247357	0.297278
	Pd	Pd53	0.582109	0.123158	0.297548
	Pd	Pd54	0.585991	0.877902	0.296762

Pd	Pd55	0.589659	0.626315	0.297088
Pd	Pd56	0.583494	0.371603	0.300895
Pd	Pd57	0.333118	0.997619	0.297706
Pd	Pd58	0.333901	0.747694	0.304796
Pd	Pd59	0.327093	0.494771	0.296707
Pd	Pd60	0.332047	0.246981	0.296751
Pd	Pd61	0.083603	0.122968	0.296751
Pd	Pd62	0.084539	0.874256	0.297777
Pd	Pd63	0.077946	0.623888	0.296817
Pd	Pd64	0.080636	0.371818	0.297166
C	C65	0.423653	0.611786	0.344222
C	C66	0.470833	0.529883	0.416255
O	O67	0.424104	0.586837	0.456851
O	O68	0.537556	0.438633	0.401600

Transition state of R147 CH* + CO₂* = CHCOO* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a	9.514851
_cell_length_b	10.986804
_cell_length_c	22.764721
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000
_cell_angle_gamma	90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515

Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165887	0.000845	0.196856
Pd	Pd34	0.166290	0.250543	0.196730
Pd	Pd35	0.167423	0.500385	0.197769
Pd	Pd36	0.168514	0.751112	0.198551
Pd	Pd37	0.416498	0.125206	0.196654
Pd	Pd38	0.416688	0.375384	0.197428
Pd	Pd39	0.416337	0.625449	0.196970
Pd	Pd40	0.416209	0.875053	0.197581
Pd	Pd41	0.666210	0.000973	0.196705
Pd	Pd42	0.665570	0.252037	0.198052
Pd	Pd43	0.667008	0.500629	0.197468
Pd	Pd44	0.666441	0.749497	0.198050
Pd	Pd45	0.915408	0.126372	0.196881
Pd	Pd46	0.916895	0.375962	0.196967
Pd	Pd47	0.917910	0.625887	0.196810
Pd	Pd48	0.916162	0.875728	0.196750
Pd	Pd49	0.082002	0.125838	0.296815
Pd	Pd50	0.082156	0.374710	0.297330
Pd	Pd51	0.082026	0.626275	0.297440
Pd	Pd52	0.081788	0.878059	0.296960
Pd	Pd53	0.333187	0.002196	0.296693
Pd	Pd54	0.330883	0.248406	0.296573
Pd	Pd55	0.328928	0.499418	0.298929
Pd	Pd56	0.331072	0.751966	0.299156
Pd	Pd57	0.582809	0.127672	0.297262
Pd	Pd58	0.583970	0.377322	0.300004
Pd	Pd59	0.588919	0.629245	0.298112
Pd	Pd60	0.585036	0.879702	0.296397
Pd	Pd61	0.832826	0.002731	0.297035
Pd	Pd62	0.832777	0.251616	0.297452
Pd	Pd63	0.837072	0.501546	0.297066
Pd	Pd64	0.835505	0.753250	0.297125
C	C65	0.490687	0.508871	0.353095
C	C66	0.494971	0.649136	0.397962
O	O67	0.582760	0.640288	0.436466
O	O68	0.392964	0.721305	0.388486
H	H69	0.501303	0.446905	0.391342

Transition state of R148 $\text{CH}_2^* + \text{CO}_2^* = \text{CH}_2\text{COO}^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000

Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.164954	0.000274	0.196843
Pd	Pd34	0.164930	0.249799	0.196772
Pd	Pd35	0.166398	0.499750	0.197628
Pd	Pd36	0.167257	0.750442	0.198663
Pd	Pd37	0.415620	0.124591	0.196684
Pd	Pd38	0.415768	0.374455	0.197222
Pd	Pd39	0.414880	0.624967	0.197121
Pd	Pd40	0.414996	0.874756	0.197371
Pd	Pd41	0.665210	0.000451	0.196651
Pd	Pd42	0.664581	0.251834	0.197795
Pd	Pd43	0.665387	0.500416	0.197536
Pd	Pd44	0.664760	0.748921	0.198448
Pd	Pd45	0.914367	0.125697	0.196814
Pd	Pd46	0.915659	0.375538	0.196868
Pd	Pd47	0.916113	0.625422	0.196739
Pd	Pd48	0.915103	0.874983	0.196764
Pd	Pd49	0.079387	0.125155	0.297019
Pd	Pd50	0.078595	0.373880	0.297312
Pd	Pd51	0.078257	0.625674	0.297196
Pd	Pd52	0.079136	0.877128	0.297130
Pd	Pd53	0.330108	0.001676	0.296920
Pd	Pd54	0.328794	0.247409	0.296652
Pd	Pd55	0.325636	0.496790	0.296851
Pd	Pd56	0.328674	0.752151	0.299270
Pd	Pd57	0.580936	0.126565	0.297149
Pd	Pd58	0.580878	0.374399	0.299095
Pd	Pd59	0.582388	0.627612	0.298231
Pd	Pd60	0.582952	0.879820	0.296240
Pd	Pd61	0.830727	0.001661	0.297039
Pd	Pd62	0.830962	0.250292	0.297387
Pd	Pd63	0.832865	0.500725	0.296710

Pd	Pd64	0.832245	0.752333	0.297325
C	C65	0.497388	0.515721	0.363095
C	C66	0.510777	0.671993	0.399016
O	O67	0.608525	0.675598	0.433144
O	O68	0.400646	0.733776	0.389615
H	H69	0.570799	0.460870	0.390008
H	H70	0.388702	0.506267	0.382171

Transition state of R149 $\text{CH}_3^* + \text{CO}_2^* = \text{CH}_3\text{COO}^* + *$ on Pd(111)

data				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.167567	0.999846	0.196559
Pd	Pd34	0.166641	0.249400	0.196627
Pd	Pd35	0.169536	0.499808	0.198859
Pd	Pd36	0.166616	0.750290	0.196555

Pd	Pd37	0.417556	0.124831	0.196627
Pd	Pd38	0.415303	0.375976	0.198691
Pd	Pd39	0.415376	0.623668	0.198745
Pd	Pd40	0.417553	0.874781	0.196645
Pd	Pd41	0.667565	0.999799	0.196594
Pd	Pd42	0.666239	0.251366	0.197597
Pd	Pd43	0.665802	0.500038	0.198022
Pd	Pd44	0.666228	0.748482	0.197439
Pd	Pd45	0.916631	0.124884	0.196681
Pd	Pd46	0.917393	0.375218	0.196655
Pd	Pd47	0.917233	0.624554	0.196551
Pd	Pd48	0.916665	0.874873	0.196677
Pd	Pd49	0.835811	0.999644	0.297333
Pd	Pd50	0.836393	0.752096	0.296692
Pd	Pd51	0.834961	0.499820	0.296405
Pd	Pd52	0.836743	0.247108	0.296749
Pd	Pd53	0.585104	0.121319	0.296815
Pd	Pd54	0.585018	0.877634	0.296881
Pd	Pd55	0.587244	0.632102	0.297280
Pd	Pd56	0.587772	0.366940	0.297054
Pd	Pd57	0.333329	0.999593	0.296845
Pd	Pd58	0.332495	0.752408	0.296024
Pd	Pd59	0.331920	0.499530	0.307712
Pd	Pd60	0.332922	0.246798	0.296011
Pd	Pd61	0.084321	0.124105	0.296836
Pd	Pd62	0.084212	0.875402	0.296871
Pd	Pd63	0.081472	0.626309	0.295939
Pd	Pd64	0.081657	0.373539	0.296305
C	C65	0.270915	0.501190	0.402345
C	C66	0.475969	0.501144	0.381424
O	O67	0.524677	0.605557	0.391846
O	O68	0.531636	0.397136	0.388584
H	H69	0.174188	0.452991	0.388015
H	H70	0.249915	0.595739	0.414268
H	H71	0.311044	0.448719	0.439700

Transition state of R150 C* + HCO* = CCHO* + * on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol
 _atom_site_label
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000

Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165320	0.000652	0.196749
Pd	Pd34	0.165819	0.250372	0.196793
Pd	Pd35	0.167372	0.500719	0.198065
Pd	Pd36	0.165890	0.750827	0.196762
Pd	Pd37	0.416200	0.125535	0.196702
Pd	Pd38	0.416384	0.375651	0.197723
Pd	Pd39	0.416647	0.625287	0.198420
Pd	Pd40	0.416062	0.875490	0.196545
Pd	Pd41	0.665924	0.000754	0.196818
Pd	Pd42	0.665675	0.251698	0.197999
Pd	Pd43	0.665438	0.500782	0.198434
Pd	Pd44	0.665191	0.749207	0.198924
Pd	Pd45	0.915247	0.125935	0.196908
Pd	Pd46	0.916520	0.375657	0.196796
Pd	Pd47	0.916348	0.625664	0.196779
Pd	Pd48	0.915073	0.875537	0.196821
Pd	Pd49	0.081637	0.125199	0.296940
Pd	Pd50	0.081529	0.374595	0.297281
Pd	Pd51	0.081996	0.628340	0.297398
Pd	Pd52	0.081837	0.877838	0.296944
Pd	Pd53	0.332503	0.001477	0.296521
Pd	Pd54	0.329503	0.247336	0.296331
Pd	Pd55	0.325691	0.500881	0.300951
Pd	Pd56	0.329894	0.755208	0.296201
Pd	Pd57	0.582182	0.125990	0.297300
Pd	Pd58	0.585707	0.372153	0.301266
Pd	Pd59	0.586082	0.632853	0.304569
Pd	Pd60	0.582330	0.879167	0.296926
Pd	Pd61	0.832181	0.001939	0.297284
Pd	Pd62	0.833309	0.250451	0.297456
Pd	Pd63	0.837194	0.501924	0.296104
Pd	Pd64	0.834484	0.753620	0.297319
C	C65	0.492263	0.492658	0.345029
C	C66	0.575776	0.636233	0.396153
O	O67	0.493856	0.700428	0.421676
H	H68	0.669966	0.591984	0.415063

Transition state of R151 CH* + HCO* = CHCHO* + * on Pd(111)

data_					
_cell_length_a		9.514851			
_cell_length_b		10.986804			
_cell_length_c		22.764721			
_cell_angle_alpha		90.000000			
_cell_angle_beta		90.000000			
_cell_angle_gamma		90.000000			
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'				
loop_					
_atom_site_type_symbol					
_atom_site_label					
_atom_site_fract_x					
_atom_site_fract_y					
_atom_site_fract_z					
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.165302	0.001266	0.196785	
Pd	Pd34	0.165795	0.250878	0.196902	
Pd	Pd35	0.167046	0.500806	0.197755	
Pd	Pd36	0.167273	0.751225	0.198004	
Pd	Pd37	0.416113	0.125593	0.196661	
Pd	Pd38	0.416281	0.375489	0.197352	
Pd	Pd39	0.416036	0.625686	0.197541	
Pd	Pd40	0.415655	0.875285	0.197214	
Pd	Pd41	0.665804	0.001172	0.196624	
Pd	Pd42	0.665305	0.252545	0.198047	
Pd	Pd43	0.665991	0.501263	0.198114	

Pd	Pd44	0.665255	0.749030	0.198913
Pd	Pd45	0.914928	0.126784	0.196872
Pd	Pd46	0.916263	0.376316	0.196917
Pd	Pd47	0.916937	0.625893	0.196904
Pd	Pd48	0.915431	0.875872	0.196734
Pd	Pd49	0.080993	0.126033	0.296995
Pd	Pd50	0.079973	0.374796	0.297375
Pd	Pd51	0.081529	0.626777	0.297371
Pd	Pd52	0.082156	0.878462	0.296952
Pd	Pd53	0.332345	0.003007	0.296534
Pd	Pd54	0.329380	0.248358	0.297003
Pd	Pd55	0.325486	0.498530	0.298550
Pd	Pd56	0.330370	0.754205	0.299023
Pd	Pd57	0.581987	0.128066	0.297225
Pd	Pd58	0.583597	0.375659	0.300218
Pd	Pd59	0.587015	0.633145	0.301431
Pd	Pd60	0.584561	0.881715	0.296261
Pd	Pd61	0.832722	0.003110	0.297134
Pd	Pd62	0.831789	0.251782	0.297495
Pd	Pd63	0.835423	0.501960	0.297255
Pd	Pd64	0.835900	0.754178	0.297120
C	C65	0.489049	0.499315	0.351321
C	C66	0.518199	0.654405	0.386196
O	O67	0.412885	0.718443	0.394691
H	H68	0.599903	0.644332	0.420483
H	H69	0.485397	0.461069	0.396305

Transition state of R152 $\text{CH}_2^* + \text{HCO}^* = \text{CH}_2\text{CHO}^* + ^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'			
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515

Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165444	0.001097	0.196769
Pd	Pd34	0.165354	0.250493	0.196779
Pd	Pd35	0.165703	0.500720	0.196571
Pd	Pd36	0.166901	0.751330	0.197935
Pd	Pd37	0.416186	0.125517	0.196739
Pd	Pd38	0.415775	0.375348	0.196998
Pd	Pd39	0.415523	0.626113	0.197275
Pd	Pd40	0.415568	0.875483	0.197434
Pd	Pd41	0.665463	0.001293	0.196880
Pd	Pd42	0.664724	0.253016	0.198426
Pd	Pd43	0.664732	0.501494	0.198293
Pd	Pd44	0.664373	0.749096	0.199359
Pd	Pd45	0.914770	0.126394	0.196866
Pd	Pd46	0.915336	0.376106	0.196722
Pd	Pd47	0.915674	0.626128	0.196737
Pd	Pd48	0.915229	0.875937	0.196753
Pd	Pd49	0.080884	0.126205	0.297028
Pd	Pd50	0.079780	0.375113	0.296763
Pd	Pd51	0.080478	0.626703	0.296732
Pd	Pd52	0.081805	0.878425	0.297029
Pd	Pd53	0.331503	0.003265	0.296733
Pd	Pd54	0.329593	0.249658	0.296790
Pd	Pd55	0.325234	0.498778	0.295064
Pd	Pd56	0.329573	0.753152	0.299243
Pd	Pd57	0.581899	0.128077	0.297536
Pd	Pd58	0.581215	0.375351	0.300136
Pd	Pd59	0.584187	0.630752	0.301677
Pd	Pd60	0.584219	0.881420	0.296716
Pd	Pd61	0.832260	0.002877	0.297250
Pd	Pd62	0.832539	0.251111	0.297592
Pd	Pd63	0.834522	0.501667	0.296446
Pd	Pd64	0.835782	0.754385	0.297341
C	C65	0.533119	0.498198	0.365929
C	C66	0.531655	0.677003	0.385239
O	O67	0.415153	0.723817	0.394422
H	H68	0.619239	0.688436	0.416777
H	H69	0.615632	0.475016	0.398054
H	H70	0.426960	0.488050	0.385382

Transition state of R153 $\text{CH}_3^* + \text{HCO}^* = \text{CH}_3\text{CHO}^* + *$ on Pd(111)

data
 _cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta       90.000000
_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
Pd Pd1      0.083333      0.125000      0.000000
Pd Pd2      0.083333      0.375000      0.000000
Pd Pd3      0.083333      0.625000      0.000000
Pd Pd4      0.083333      0.875000      0.000000
Pd Pd5      0.333333      0.000000      0.000000
Pd Pd6      0.333333      0.250000      0.000000
Pd Pd7      0.333333      0.500000      0.000000
Pd Pd8      0.333333      0.750000      0.000000
Pd Pd9      0.583333      0.125000      0.000000
Pd Pd10     0.583333      0.375000      0.000000
Pd Pd11     0.583333      0.625000      0.000000
Pd Pd12     0.583333      0.875000      0.000000
Pd Pd13     0.833333      0.000000      0.000000
Pd Pd14     0.833333      0.250000      0.000000
Pd Pd15     0.833333      0.500000      0.000000
Pd Pd16     0.833333      0.750000      0.000000
Pd Pd17     0.000000      0.000000      0.098515
Pd Pd18     0.000000      0.250000      0.098515
Pd Pd19     0.000000      0.500000      0.098515
Pd Pd20     0.000000      0.750000      0.098515
Pd Pd21     0.250000      0.125000      0.098515
Pd Pd22     0.250000      0.375000      0.098515
Pd Pd23     0.250000      0.625000      0.098515
Pd Pd24     0.250000      0.875000      0.098515
Pd Pd25     0.500000      0.000000      0.098515
Pd Pd26     0.500000      0.250000      0.098515
Pd Pd27     0.500000      0.500000      0.098515
Pd Pd28     0.500000      0.750000      0.098515
Pd Pd29     0.750000      0.125000      0.098515
Pd Pd30     0.750000      0.375000      0.098515
Pd Pd31     0.750000      0.625000      0.098515
Pd Pd32     0.750000      0.875000      0.098515
Pd Pd33     0.165952      0.998956      0.196722
Pd Pd34     0.166107      0.248887      0.196494
Pd Pd35     0.168239      0.499263      0.198819
Pd Pd36     0.165519      0.749374      0.196505
Pd Pd37     0.416286      0.124098      0.196699
Pd Pd38     0.414605      0.375406      0.198801
Pd Pd39     0.415046      0.623062      0.198924
Pd Pd40     0.416098      0.874238      0.196548
Pd Pd41     0.666158      0.999245      0.196787
Pd Pd42     0.664493      0.251172      0.198373
Pd Pd43     0.665226      0.499483      0.197504
Pd Pd44     0.664645      0.747766      0.197545
Pd Pd45     0.915361      0.124154      0.196694
Pd Pd46     0.916235      0.374258      0.196469
Pd Pd47     0.915815      0.623883      0.196424
Pd Pd48     0.914907      0.873709      0.196818
Pd Pd49     0.832351      0.997309      0.297311
Pd Pd50     0.830191      0.748578      0.296926

```

Pd	Pd51	0.833426	0.498170	0.296088
Pd	Pd52	0.834921	0.245464	0.296896
Pd	Pd53	0.582989	0.119504	0.297279
Pd	Pd54	0.581296	0.873546	0.296990
Pd	Pd55	0.580499	0.624618	0.299323
Pd	Pd56	0.587454	0.365819	0.298186
Pd	Pd57	0.330909	0.998563	0.296963
Pd	Pd58	0.328846	0.752994	0.295998
Pd	Pd59	0.330011	0.500538	0.305671
Pd	Pd60	0.331656	0.245617	0.296077
Pd	Pd61	0.082037	0.122611	0.296758
Pd	Pd62	0.080124	0.874219	0.297015
Pd	Pd63	0.078041	0.625964	0.296101
Pd	Pd64	0.080651	0.372008	0.296072
C	C65	0.283175	0.503164	0.401849
C	C66	0.475963	0.521749	0.373643
O	O67	0.554687	0.429908	0.384569
H	H68	0.496541	0.607666	0.397996
H	H69	0.183687	0.460212	0.386888
H	H70	0.262086	0.595391	0.417614
H	H71	0.326673	0.443830	0.435931

Transition state of R154 $O^* + H^* = OH^* + *$ on Pd(111)

data_

_cell_length_a 9.514851
 _cell_length_b 10.986804
 _cell_length_c 22.764721
 _cell_angle_alpha 90.000000
 _cell_angle_beta 90.000000
 _cell_angle_gamma 90.000000
 _symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515

Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.166889	0.999598	0.196958
Pd	Pd34	0.166069	0.249536	0.196737
Pd	Pd35	0.166695	0.499119	0.198051
Pd	Pd36	0.167789	0.749476	0.197760
Pd	Pd37	0.416489	0.123846	0.196807
Pd	Pd38	0.416535	0.374083	0.197036
Pd	Pd39	0.416084	0.625186	0.197049
Pd	Pd40	0.417076	0.874111	0.197783
Pd	Pd41	0.666936	0.000639	0.196875
Pd	Pd42	0.664811	0.251852	0.198386
Pd	Pd43	0.666008	0.499548	0.196841
Pd	Pd44	0.667247	0.749604	0.197917
Pd	Pd45	0.915740	0.125561	0.196775
Pd	Pd46	0.916208	0.374948	0.196683
Pd	Pd47	0.916775	0.625186	0.196688
Pd	Pd48	0.917392	0.875263	0.196949
Pd	Pd49	0.083042	0.122860	0.296804
Pd	Pd50	0.078384	0.371337	0.297209
Pd	Pd51	0.079118	0.625709	0.297194
Pd	Pd52	0.085832	0.874634	0.297339
Pd	Pd53	0.334320	0.997573	0.297433
Pd	Pd54	0.330503	0.245810	0.296551
Pd	Pd55	0.320840	0.495130	0.296116
Pd	Pd56	0.336221	0.745940	0.301102
Pd	Pd57	0.582771	0.125104	0.297225
Pd	Pd58	0.582393	0.374029	0.300403
Pd	Pd59	0.593342	0.632092	0.295924
Pd	Pd60	0.586425	0.879099	0.297321
Pd	Pd61	0.834834	0.001471	0.297308
Pd	Pd62	0.832082	0.248970	0.297060
Pd	Pd63	0.834835	0.499202	0.296436
Pd	Pd64	0.837646	0.753632	0.297285
O	O65	0.488040	0.517900	0.353133
H	H66	0.413257	0.627906	0.344588

Transition state of R155 $\text{OH}^* + \text{H}^* = \text{H}_2\text{O}^* + *$ on Pd(111)

```

data_
_cell_length_a      9.514851
_cell_length_b     10.986804
_cell_length_c     22.764721
_cell_angle_alpha   90.000000
_cell_angle_beta    90.000000
_cell_angle_gamma   90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom	_site	_fract	_z		
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000	
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000	
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000	
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000	
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000	
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000	
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000	
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000	
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515	
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515	
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515	
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515	
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515	
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515	
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515	
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515	
Pd	Pd33	0.166384	0.000623	0.196887	
Pd	Pd34	0.166745	0.250369	0.196955	
Pd	Pd35	0.167445	0.500328	0.197019	
Pd	Pd36	0.166605	0.750574	0.196733	
Pd	Pd37	0.416966	0.125525	0.196834	
Pd	Pd38	0.416952	0.375499	0.197557	
Pd	Pd39	0.416559	0.625327	0.197749	
Pd	Pd40	0.416690	0.875856	0.196880	
Pd	Pd41	0.666628	0.000422	0.196963	
Pd	Pd42	0.666626	0.251012	0.197233	
Pd	Pd43	0.666655	0.500285	0.197665	
Pd	Pd44	0.665292	0.748980	0.199045	
Pd	Pd45	0.916226	0.125764	0.196865	
Pd	Pd46	0.917134	0.375592	0.196827	
Pd	Pd47	0.916847	0.625588	0.196841	
Pd	Pd48	0.915939	0.875386	0.196845	
Pd	Pd49	0.083154	0.125945	0.297068	
Pd	Pd50	0.083746	0.375737	0.297069	
Pd	Pd51	0.084672	0.626035	0.296813	
Pd	Pd52	0.083762	0.876348	0.296734	
Pd	Pd53	0.333091	0.001393	0.296968	
Pd	Pd54	0.331951	0.249187	0.297161	
Pd	Pd55	0.332758	0.499769	0.298461	
Pd	Pd56	0.332884	0.752552	0.296501	
Pd	Pd57	0.583315	0.126620	0.297097	
Pd	Pd58	0.582833	0.374603	0.298592	
Pd	Pd59	0.587669	0.631107	0.299665	

Pd	Pd60	0.584173	0.879314	0.297484
Pd	Pd61	0.834227	0.002152	0.297114
Pd	Pd62	0.833615	0.251424	0.297111
Pd	Pd63	0.836056	0.500697	0.296443
Pd	Pd64	0.836182	0.752873	0.297306
O	O65	0.554491	0.586067	0.386386
H	H66	0.641026	0.545468	0.399286
H	H67	0.486303	0.479318	0.344108

Transition state of R156 $\text{OH}^* + \text{OH}^* = \text{H}_2\text{O}^* + \text{O}^*$ on Pd(111)

data_				
_cell_length_a		9.514851		
_cell_length_b		10.986804		
_cell_length_c		22.764721		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
Pd	Pd1	0.083333	0.125000	0.000000
Pd	Pd2	0.083333	0.375000	0.000000
Pd	Pd3	0.083333	0.625000	0.000000
Pd	Pd4	0.083333	0.875000	0.000000
Pd	Pd5	0.333333	0.000000	0.000000
Pd	Pd6	0.333333	0.250000	0.000000
Pd	Pd7	0.333333	0.500000	0.000000
Pd	Pd8	0.333333	0.750000	0.000000
Pd	Pd9	0.583333	0.125000	0.000000
Pd	Pd10	0.583333	0.375000	0.000000
Pd	Pd11	0.583333	0.625000	0.000000
Pd	Pd12	0.583333	0.875000	0.000000
Pd	Pd13	0.833333	0.000000	0.000000
Pd	Pd14	0.833333	0.250000	0.000000
Pd	Pd15	0.833333	0.500000	0.000000
Pd	Pd16	0.833333	0.750000	0.000000
Pd	Pd17	0.000000	0.000000	0.098515
Pd	Pd18	0.000000	0.250000	0.098515
Pd	Pd19	0.000000	0.500000	0.098515
Pd	Pd20	0.000000	0.750000	0.098515
Pd	Pd21	0.250000	0.125000	0.098515
Pd	Pd22	0.250000	0.375000	0.098515
Pd	Pd23	0.250000	0.625000	0.098515
Pd	Pd24	0.250000	0.875000	0.098515
Pd	Pd25	0.500000	0.000000	0.098515
Pd	Pd26	0.500000	0.250000	0.098515
Pd	Pd27	0.500000	0.500000	0.098515
Pd	Pd28	0.500000	0.750000	0.098515
Pd	Pd29	0.750000	0.125000	0.098515
Pd	Pd30	0.750000	0.375000	0.098515
Pd	Pd31	0.750000	0.625000	0.098515
Pd	Pd32	0.750000	0.875000	0.098515
Pd	Pd33	0.165928	0.000121	0.196934
Pd	Pd34	0.166204	0.249860	0.196807
Pd	Pd35	0.168256	0.499598	0.198765

Pd	Pd36	0.167488	0.750232	0.198290
Pd	Pd37	0.416295	0.124310	0.196741
Pd	Pd38	0.416909	0.374203	0.196953
Pd	Pd39	0.415932	0.625232	0.196928
Pd	Pd40	0.415983	0.874558	0.198050
Pd	Pd41	0.666237	0.999492	0.196666
Pd	Pd42	0.665883	0.250418	0.197193
Pd	Pd43	0.666659	0.499250	0.196831
Pd	Pd44	0.665589	0.748063	0.198781
Pd	Pd45	0.915747	0.124999	0.196667
Pd	Pd46	0.917185	0.375057	0.196920
Pd	Pd47	0.917134	0.624856	0.196655
Pd	Pd48	0.915844	0.874325	0.196742
Pd	Pd49	0.081299	0.125321	0.297008
Pd	Pd50	0.080570	0.373903	0.297531
Pd	Pd51	0.078432	0.626053	0.297346
Pd	Pd52	0.080230	0.877189	0.296984
Pd	Pd53	0.332078	0.002475	0.297311
Pd	Pd54	0.331191	0.248308	0.296697
Pd	Pd55	0.327063	0.498431	0.296827
Pd	Pd56	0.329103	0.754910	0.299625
Pd	Pd57	0.582939	0.124852	0.296934
Pd	Pd58	0.585180	0.371110	0.297332
Pd	Pd59	0.585714	0.628395	0.296727
Pd	Pd60	0.584000	0.878911	0.297203
Pd	Pd61	0.832789	0.000905	0.296903
Pd	Pd62	0.833184	0.249378	0.296861
Pd	Pd63	0.833593	0.499651	0.296557
Pd	Pd64	0.833208	0.751652	0.297321
O	O65	0.475852	0.534300	0.360100
O	O66	0.349331	0.719012	0.388879
H	H67	0.406408	0.783326	0.406363
H	H68	0.423485	0.615866	0.380639