Electronic Supplementary Material (ESI) for Catalysis Science & Technology.
This journal is © The Royal Society of Chemistry 2021

Supporting Information for

Aqueous-phase effects on ethanol decomposition over Ru-based catalysts

Mehdi Zare[1a], Mohammad Saleheen[1a], Osman Mamun[1], and Andreas Heyden[*1]

[1]*Department of Chemical Engineering, University of South Carolina, 301 Main Street, Columbia, South Carolina 29208, USA*

*Corresponding author: email: heyden@cec.sc.edu

[a] These authors contributed equally to this work.

Table S1. Lateral interaction parameters employed in the microkinetic model for ethanol decomposition over a Ru(0001) model surface.

Adsorbate pairs	Lateral Interaction (eV)
H-H	$0.142(\theta_H - 0.063)$
CO-CO	$1.020(\theta_{CO} - 0.097)$
O-O	$2.016(\theta_O - 0.068)$
H-CO	$(0.229 + 2.140\sqrt{\theta_O\theta_{CO}})\theta_{CO}$
H-O	$(0.297 + 3.990\sqrt{\theta_O\theta_H})\theta_O$
CO-O	$(1.090 + 1.542\sqrt{\theta_{CO}\theta_O})\theta_O$

Table S2. Calculated turnover frequency (net rate), in s^{-1}, in the vapor and aqueous phases and for all elementary reaction steps in the ethanol decomposition over a Ru(0001) catalyst model surface at 473 K and 523 K. In both phases, the partial pressures of ethanol, hydrogen, and CH_4 were set to 0.80, 0.20, and 0.002 bar, respectively. Next, we set the partial pressure of other products (CO, C_2H_6, CH_3OH, C_2H_4, C_2H_2, CO_2, CH_3CHO, CH_2O) to 1.0×10^{-20} bar in both phases. Finally, the water partial pressure in vapor phase was set to 1.0×10^{-20} bar at all temperatures, while, based on the VLE assumption, it was set to 15.54 bar and 39.74 bar at 473 K and 523 K in the aqueous phase, respectively.

	473K		523K	
Reaction	**Vapor**	**APR**	**Vapor**	**APR**
1. $CH_3CH_2OH + * \leftrightarrow CH_3CH_2OH^*$	1.31×10^{-2}	3.90×10^{-3}	1.79×10^{-1}	5.58×10^{-2}
2. $CH_3CH_2OH^* + * \leftrightarrow CH_3CH_2O^* + H^*$	1.02×10^{-2}	3.17×10^{-3}	1.35×10^{-1}	4.47×10^{-2}
3. $CH_3CH_2OH^* + * \leftrightarrow CH_3CHOH^* + H^*$	1.72×10^{-3}	4.31×10^{-4}	2.65×10^{-2}	6.74×10^{-3}
4. $CH_3CH_2OH^* + * \leftrightarrow CH_2CH_2OH^* + H^*$	1.24×10^{-3}	3.03×10^{-4}	1.71×10^{-2}	4.33×10^{-3}
5. $CH_3CH_2O^* + * \leftrightarrow CH_3CHO^* + H^*$	1.00×10^{-2}	3.13×10^{-3}	1.32×10^{-1}	4.39×10^{-2}
6. $CH_3CH_2O^* + * \leftrightarrow CH_2CH_2O^* + H^*$	1.52×10^{-4}	4.07×10^{-5}	2.86×10^{-3}	8.11×10^{-4}
7. $CH_3CHOH^* + * \leftrightarrow CH_3COH^* + H^*$	1.50×10^{-3}	4.07×10^{-4}	2.52×10^{-2}	6.56×10^{-3}
8. $CH_3CHOH^* + * \leftrightarrow CH_2CHOH^* + H^*$	2.13×10^{-4}	2.13×10^{-5}	1.20×10^{-3}	1.46×10^{-4}
9. $CH_3CHOH^* + * \leftrightarrow CH_3CHO^* + H^*$	1.86×10^{-7}	6.71×10^{-8}	4.19×10^{-6}	1.63×10^{-6}
10. $CH_2CH_2OH^* + * \leftrightarrow CHCH_2OH^* + H^*$	1.01×10^{-3}	2.32×10^{-4}	1.38×10^{-2}	3.26×10^{-3}
11. $CH_2CH_2OH^* + * \leftrightarrow CH_2CHOH^* + H^*$	2.23×10^{-4}	7.11×10^{-5}	3.30×10^{-3}	1.07×10^{-3}
12. $CH_2CH_2OH^* + * \leftrightarrow CH_2CH_2O^* + H^*$	-1.36×10^{-8}	-3.20×10^{-9}	9.56×10^{-7}	4.12×10^{-7}
13. $CH_2CH_2O^* + * \leftrightarrow CH_2CHO^* + H^*$	1.19×10^{-4}	2.59×10^{-5}	2.20×10^{-3}	5.26×10^{-4}
14. $CH_2CH_2O^* + * \leftrightarrow CHCH_2O^* + H^*$	3.30×10^{-5}	1.48×10^{-5}	6.59×10^{-4}	2.85×10^{-4}
15. $CH_2CHOH^* + * \leftrightarrow CH_2CHO^* + H^*$	3.15×10^{-6}	5.87×10^{-7}	3.21×10^{-5}	8.40×10^{-6}
16. $CH_2CHOH^* + * \leftrightarrow CH_2COH^* + H^*$	3.93×10^{-4}	7.00×10^{-5}	4.19×10^{-3}	9.98×10^{-4}
17. $CH_2CHOH^* + * \leftrightarrow CHCHOH^* + H^*$	3.99×10^{-5}	2.19×10^{-5}	2.72×10^{-4}	2.06×10^{-4}
18. $CH_3CHO^* + * \leftrightarrow CH_2CHO^* + H^*$	3.16×10^{-3}	5.97×10^{-4}	4.18×10^{-2}	8.14×10^{-3}
19. $CH_3CHO^* + * \leftrightarrow CH_3CO^* + H^*$	3.06×10^{-3}	5.52×10^{-4}	4.07×10^{-2}	7.90×10^{-3}
20. $CH_3COH^* + * \leftrightarrow CH_2COH^* + H^*$	7.52×10^{-6}	9.23×10^{-7}	1.82×10^{-4}	2.27×10^{-5}
21. $CH_3COH^* + * \leftrightarrow CH_3CO^* + H^*$	1.49×10^{-3}	4.06×10^{-4}	2.50×10^{-2}	6.54×10^{-3}
22. $CHCH_2OH^* + * \leftrightarrow CCH_2OH^* + H^*$	1.01×10^{-3}	2.31×10^{-4}	1.37×10^{-2}	3.26×10^{-3}
23. $CHCH_2OH^* + * \leftrightarrow CHCHOH^* + H^*$	7.59×10^{-7}	2.45×10^{-7}	1.18×10^{-5}	3.81×10^{-6}
24. $CHCH_2OH^* + * \leftrightarrow CHCH_2O^* + H^*$	1.69×10^{-8}	6.12×10^{-9}	2.45×10^{-7}	6.47×10^{-8}
25. $CCH_2OH^* + * \leftrightarrow CCH_2O^* + H^*$	4.36×10^{-6}	1.36×10^{-6}	8.45×10^{-5}	2.44×10^{-5}
26. $CCH_2OH^* + * \leftrightarrow CCHOH^* + H^*$	9.31×10^{-4}	2.15×10^{-4}	1.30×10^{-2}	3.11×10^{-3}
27. $CH_2CHO + * \leftrightarrow CH_2CO^* + H^*$	3.19×10^{-3}	6.14×10^{-4}	4.32×10^{-2}	8.58×10^{-3}
28. $CH_2CHO + * \leftrightarrow CHCHO^* + H^*$	2.32×10^{-13}	3.45×10^{-14}	1.59×10^{-11}	2.48×10^{-12}
29. $CH_2COH + * \leftrightarrow CH_2CO^* + H^*$	1.78×10^{-5}	5.39×10^{-6}	2.51×10^{-4}	1.00×10^{-4}
30. $CH_2COH + * \leftrightarrow CHCOH^* + H^*$	3.52×10^{-4}	5.96×10^{-5}	3.90×10^{-3}	8.64×10^{-4}
31. $CH_3CO + * \leftrightarrow CH_2CO^* + H^*$	4.49×10^{-3}	9.48×10^{-4}	6.53×10^{-2}	1.44×10^{-2}
32. $CHCH_2O + * \leftrightarrow CHCHO^* + H^*$	3.30×10^{-5}	1.48×10^{-5}	6.58×10^{-4}	2.85×10^{-4}
33. $CHCH_2O + * \leftrightarrow CCH_2O^* + H^*$	1.42×10^{-8}	8.93×10^{-9}	5.78×10^{-7}	3.43×10^{-7}
34. $CHCHOH^* + * \leftrightarrow CCHOH^* + H^*$	-8.80×10^{-4}	-1.95×10^{-4}	-1.12×10^{-2}	-2.46×10^{-3}
35. $CHCHOH^* + * \leftrightarrow CHCHO^* + H^*$	1.58×10^{-5}	6.34×10^{-6}	2.71×10^{-4}	1.03×10^{-4}
36. $CHCHOH^* + * \leftrightarrow CHCOH^* + H^*$	9.05×10^{-4}	2.10×10^{-4}	1.12×10^{-2}	2.56×10^{-3}
37. $CCH_2O^* + * \leftrightarrow CCHO^* + H^*$	4.38×10^{-6}	1.37×10^{-6}	8.51×10^{-5}	2.47×10^{-5}
38. $CCHOH + * \leftrightarrow CCHO^* + H^*$	8.26×10^{-6}	3.54×10^{-6}	3.19×10^{-4}	1.28×10^{-4}
39. $CCHOH + * \leftrightarrow CCOH^* + H^*$	9.86×10^{-7}	5.62×10^{-7}	4.94×10^{-5}	2.14×10^{-5}
40. $CH_2CO^* + * \leftrightarrow CHCO^* + H^*$	6.94×10^{-3}	1.39×10^{-3}	1.02×10^{-1}	2.13×10^{-2}

41. CHCHO* + * ↔ CCHO* + H*	-1.25×10^{-5}	-4.82×10^{-6}	-3.90×10^{-4}	-1.45×10^{-4}
42. CHCHO* + * ↔ CHCO* + H*	2.35×10^{-7}	1.59×10^{-7}	9.90×10^{-6}	6.03×10^{-6}
43. CHCOH* + * ↔ CCOH* + H*	-1.58×10^{-9}	-4.9510^{-10}	-1.40×10^{-7}	-3.28×10^{-8}
44. CHCOH* + * ↔ CHCO* + H*	5.27×10^{-9}	1.53×10^{-9}	4.49×10^{-7}	1.50×10^{-7}
45. CHCO* + * ↔ CCO* + H*	4.28×10^{-9}	8.1010^{-10}	2.79×10^{-7}	5.84×10^{-8}
46. CCOH* + * ↔ CCO* + H*	1.30×10^{-8}	7.79×10^{-9}	1.06×10^{-6}	5.67×10^{-7}
47. CCHO* + * ↔ CCO* + H*	6.48×10^{-8}	2.69×10^{-8}	3.76×10^{-6}	1.64×10^{-6}
48. CH_3CH_2* + * ↔ CH3CH* + H*	-6.84×10^{-9}	-2.31×10^{-9}	-2.23×10^{-8}	-8.89×10^{-9}
49. CH_3CH_2* + * ↔ CH_2CH_2* + H*	-6.18×10^{-8}	-4.19×10^{-9}	-7.25×10^{-8}	-3.17×10^{-9}
50. CH_3CH* + * ↔ CH_3C* + H*	6.52×10^{-6}	1.78×10^{-6}	1.18×10^{-4}	3.39×10^{-5}
51. CH_3CH* + * ↔ CH_2CH* + H	2.46×10^{-9}	3.88×10^{-10}	4.86×10^{-8}	9.23×10^{-9}
52. CH_2CH_2* + * ↔ CH_2CH* + H*	-1.28×10^{-6}	-6.42×10^{-7}	-4.62×10^{-6}	-2.69×10^{-6}
53. CH_2CH* + * ↔ CH_2C* + H*	-8.02×10^{-5}	-1.19×10^{-5}	-5.30×10^{-4}	-8.05×10^{-5}
54. CH_2CH* + * ↔ CHCH* + H*	7.90×10^{-5}	1.13×10^{-5}	5.26×10^{-4}	7.79×10^{-5}
55. CH_3C* + * ↔ CH_2C* + H*	7.19×10^{-6}	1.88×10^{-6}	1.29×10^{-4}	3.53×10^{-5}
56. CH_2C* + * ↔ CCH* + H*	3.45×10^{-5}	1.06×10^{-5}	4.93×10^{-4}	1.39×10^{-4}
57. CHCH* + * ↔ CCH* + H*	-7.49×10^{-5}	-2.70×10^{-5}	-1.92×10^{-3}	-6.33×10^{-4}
58. CCH* + * ↔ CC* + H*	3.09×10^{-17}	2.37×10^{-17}	3.45×10^{-14}	2.86×10^{-14}
59. CH_3* + * ↔ CH_2* + H*	-1.02×10^{-2}	-1.95×10^{-3}	-1.36×10^{-1}	-2.86×10^{-2}
60. CH_2* + * ↔ CH* + H*	-9.35×10^{-3}	-1.77×10^{-3}	-1.28×10^{-1}	-2.68×10^{-2}
61. CH* + * ↔ C* + H*	-1.34×10^{-4}	-9.31×10^{-7}	-1.64×10^{-3}	-3.39×10^{-5}
62. CH_2OH* + * ↔ CH_2O* + H*	-8.09×10^{-13}	2.15×10^{-13}	-6.83×10^{-12}	8.59×10^{-12}
63. CH_2OH* + * ↔ CHOH* + H*	-1.39×10^{-7}	2.55×10^{-10}	-4.95×10^{-7}	6.65×10^{-9}
64. CH_2O* + * ↔ CHO* + H*	-5.23×10^{-6}	-3.05×10^{-10}	-9.42×10^{-5}	-2.66×10^{-10}
65. CHOH* + * ↔ CHO* + H*	-3.39×10^{-11}	1.92×10^{-11}	1.84×10^{-11}	1.01×10^{-9}
66. CHOH* + * ↔ COH* + H*	-6.48×10^{-4}	1.49×10^{-7}	-3.34×10^{-3}	5.65×10^{-6}
67. CHO* + * ↔ CO* + H*	1.50×10^{-4}	3.49×10^{-5}	2.03×10^{-3}	6.21×10^{-4}
68. COH* + * ↔ CO* + H*	4.77×10^{-4}	2.70×10^{-4}	1.02×10^{-2}	3.45×10^{-3}
69. CH_3CH_2OH* + * ↔ CH_3CH_2* + OH*	7.60×10^{-14}	1.86×10^{-14}	1.33×10^{-11}	3.60×10^{-12}
70. CH_3CHOH* + * ↔ CH_3CH* + OH*	6.53×10^{-6}	1.78×10^{-6}	1.18×10^{-4}	3.39×10^{-5}
71. CH_2CH_2OH* + * ↔ CH_2CH_2* + OH*	3.79×10^{-9}	4.28×10^{-10}	1.89×10^{-7}	2.54×10^{-8}
72. CH_3COH* + * ↔ CH_3C* + OH*	6.77×10^{-7}	9.81×10^{-8}	1.10×10^{-5}	1.43×10^{-6}
73. CH_2CHOH* + * ↔ CH_2CH* + OH*	1.47×10^{-11}	2.41×10^{-12}	4.96×10^{-10}	1.05×10^{-10}
74. $CHCH_2OH$* + * ↔ $CHCH_2$* + OH*	2.84×10^{-11}	5.79×10^{-12}	9.35×10^{-10}	1.90×10^{-10}
75. CH_2COH* + * ↔ CH_2C* + OH*	3.05×10^{-5}	5.87×10^{-6}	2.30×10^{-4}	5.65×10^{-5}
76. CCH_2OH* + * ↔ CCH_2* + OH*	7.71×10^{-5}	1.48×10^{-5}	6.65×10^{-4}	1.28×10^{-4}
77. CHCHOH* + * ↔ CHCH* + OH*	2.14×10^{-7}	4.48×10^{-8}	6.40×10^{-6}	1.26×10^{-6}
78. CCHOH* + * ↔ CCH* + OH*	4.04×10^{-5}	1.64×10^{-5}	1.43×10^{-3}	4.94×10^{-4}
79. CHCOH* + * ↔ CHC* + OH*	7.74×10^{-14}	3.48×10^{-14}	1.83×10^{-11}	7.59×10^{-12}
80. CCOH* + * ↔ CC* + OH*	5.57×10^{-18}	6.28×10^{-18}	6.74×10^{-15}	5.12×10^{-15}
81. CH_2OH* + * ↔ CH_2* + OH*	2.95×10^{-8}	3.83×10^{-12}	2.11×10^{-7}	1.77×10^{-11}
82. CHOH* + * ↔ CH* + OH	6.49×10^{-4}	2.00×10^{-7}	3.37×10^{-3}	5.60×10^{-7}
83. COH* + * ↔ C* + OH*	1.32×10^{-4}	1.00×10^{-7}	1.56×10^{-3}	5.04×10^{-7}
84. CH_3CH_2OH* + * ↔ CH_3* + CH_2OH*	9.31×10^{-23}	4.06×10^{-23}	8.78×10^{-20}	3.76×10^{-20}
85. CH_3CH_2O* + * ↔ CH_3* + CH_2O*	5.23×10^{-19}	2.03×10^{-19}	2.91×10^{-16}	1.22×10^{-16}
86. CH_3CHOH* + * ↔ CH_3* + CHOH*	3.55×10^{-12}	8.63×10^{-13}	1.14×10^{-10}	2.89×10^{-11}
87. CH_2CH_2OH* + * ↔ CH_2* + CH_2OH*	1.53×10^{-13}	3.53×10^{-14}	1.65×10^{-11}	4.05×10^{-12}
88. CH_3CHO* + * ↔ CH_3* + CHO*	6.33×10^{-13}	5.16×10^{-14}	5.22×10^{-11}	5.59×10^{-12}
89. CH_2CH_2O* + * ↔ CH_2* + CH_2O*	3.90×10^{-10}	7.60×10^{-11}	2.27×10^{-8}	4.95×10^{-9}
90. CH_3COH* + * ↔ CH_3* + COH*	5.06×10^{-9}	6.39×10^{-10}	1.27×10^{-7}	1.67×10^{-8}

91. $CH_2CHOH^* + * \leftrightarrow CH_2^* + CHOH^*$	7.42×10^{-10}	5.77×10^{-10}	8.39×10^{-9}	6.05×10^{-9}
92. $CHCH_2OH^* + * \leftrightarrow CH^* + CH_2OH^*$	7.20×10^{-11}	1.66×10^{-11}	1.08×10^{-9}	2.25×10^{-10}
93. $CH_2CHO^* + * \leftrightarrow CH_2^* + CHO^*$	9.42×10^{-5}	9.03×10^{-6}	8.01×10^{-4}	8.77×10^{-5}
94. $CHCH_2O^* + * \leftrightarrow CH^* + CH_2O^*$	2.89×10^{-12}	1.54×10^{-12}	2.62×10^{-10}	1.34×10^{-10}
95. $CH_2COH^* + * \leftrightarrow CH_2^* + COH^*$	8.80×10^{-12}	1.47×10^{-12}	2.94×10^{-10}	6.53×10^{-11}
96. $CHCHOH^* + * \leftrightarrow CH^* + CHOH^*$	3.63×10^{-7}	1.83×10^{-7}	4.92×10^{-6}	1.81×10^{-6}
97. $CH_3CO^* + * \leftrightarrow CH_3^* + CO^*$	6.54×10^{-5}	1.02×10^{-5}	4.15×10^{-4}	7.28×10^{-5}
98. $CCH_2OH^* + * \leftrightarrow C^* + CH_2OH^*$	1.11×10^{-9}	2.53×10^{-10}	2.79×10^{-8}	6.51×10^{-9}
99. $CCH_2O^* + * \leftrightarrow C^* + CH_2O^*$	3.34×10^{-15}	1.01×10^{-15}	7.80×10^{-13}	2.47×10^{-13}
100. $CCHOH^* + * \leftrightarrow C^* + CHOH^*$	6.67×10^{-7}	1.65×10^{-7}	1.68×10^{-5}	4.39×10^{-6}
101. $CH_2CO^* + * \leftrightarrow CH_2^* + CO^*$	7.49×10^{-4}	1.74×10^{-4}	7.08×10^{-3}	1.72×10^{-3}
102. $CHCHO^* + * \leftrightarrow CH^* + CHO^*$	6.09×10^{-5}	2.58×10^{-5}	1.31×10^{-3}	5.28×10^{-4}
103. $CHCOH^* + * \leftrightarrow CH^* + COH^*$	1.26×10^{-3}	2.70×10^{-4}	1.51×10^{-2}	3.43×10^{-3}
104. $CCHO^* + * \leftrightarrow C^* + CHO^*$	1.17×10^{-7}	7.18×10^{-8}	9.93×10^{-6}	5.66×10^{-6}
105. $CCOH^* + * \leftrightarrow C^* + COH^*$	9.72×10^{-7}	5.54×10^{-7}	4.82×10^{-5}	2.08×10^{-5}
106. $CHCO^* + * \leftrightarrow CH^* + CO^*$	6.94×10^{-3}	1.39×10^{-3}	1.02×10^{-1}	2.13×10^{-2}
107. $CCO^* + * \leftrightarrow C^* + CO^*$	8.21×10^{-8}	3.55×10^{-8}	5.10×10^{-6}	2.26×10^{-6}
108. $CH_3CH_2^* + * \leftrightarrow CH_3^* + CH_2^*$	4.40×10^{-13}	3.60×10^{-14}	3.44×10^{-12}	3.57×10^{-13}
109. $CH_3CH^* + * \leftrightarrow CH_3^* + CH^*$	2.51×10^{-9}	2.48×10^{-10}	1.69×10^{-8}	2.09×10^{-9}
110. $CH_2CH_2^* + * \leftrightarrow CH_2^* + CH_2^*$	2.71×10^{-10}	1.97×10^{-11}	2.15×10^{-9}	2.04×10^{-10}
111. $CH_3C^* + * \leftrightarrow CH_3^* + C^*$	5.76×10^{-9}	1.22×10^{-9}	7.68×10^{-8}	1.90×10^{-8}
112. $CH_2CH^* + * \leftrightarrow CH_2^* + CH^*$	1.80×10^{-10}	3.01×10^{-11}	3.03×10^{-9}	5.98×10^{-10}
113. $CH_2C^* + * \leftrightarrow CH_2^* + C^*$	2.20×10^{-14}	7.17×10^{-15}	1.92×10^{-12}	7.00×10^{-13}
114. $CHCH^* + * \leftrightarrow CH^* + CH^*$	1.54×10^{-4}	3.83×10^{-5}	2.45×10^{-3}	7.12×10^{-4}
115. $CCH^* + * \leftrightarrow C^* + CH^*$	7.11×10^{-9}	2.63×10^{-9}	5.99×10^{-7}	2.38×10^{-7}
116. $CC^* + * \leftrightarrow C^* + C^*$	3.65×10^{-17}	3.00×10^{-17}	4.12×10^{-14}	3.37×10^{-14}
117. $C^* + O^* \leftrightarrow CO^* + *$	-3.04×10^{-8}	-1.81×10^{-12}	-1.67×10^{-6}	1.16×10^{-9}
118. $OH^* + * \leftrightarrow O^* + H^*$	8.21×10^{-4}	1.88×10^{-3}	5.87×10^{-3}	2.72×10^{-2}
119. $CH_3CH_2^* + H^* \leftrightarrow CH_3CH_3^* + H^*$	6.86×10^{-8}	6.50×10^{-9}	9.49×10^{-8}	1.21×10^{-8}
120. $CH_2OH^* + H^* \leftrightarrow CH_3OH^* + H^*$	1.11×10^{-7}	1.01×10^{-11}	3.13×10^{-7}	6.48×10^{-11}
121. $H^* + OH^* \leftrightarrow H_2O^*+*$	1.15×10^{-4}	-1.84×10^{-3}	1.52×10^{-3}	-2.65×10^{-2}
122. $CO^* \leftrightarrow CO(g) + *$	7.56×10^{-3}	4.44×10^{-7}	1.16×10^{-1}	5.45×10^{-6}
123. $CH_3^* + H^* \leftrightarrow CH_4(g) + 2^*$	1.03×10^{-2}	1.96×10^{-3}	1.36×10^{-1}	2.86×10^{-2}
124. $H^* + H^* \leftrightarrow H_2(g) + 2^*$	1.12×10^{-2}	5.67×10^{-3}	1.62×10^{-1}	8.09×10^{-2}
125. $H_2O^*\leftrightarrow H_2O(g)+*$	1.15×10^{-4}	-1.84×10^{-3}	1.52×10^{-3}	-2.65×10^{-2}
126. $CH_3CH_3^* \leftrightarrow CH_3CH_3(g) + *$	6.86×10^{-8}	6.50×10^{-9}	9.49×10^{-8}	1.21×10^{-8}
127. $CH_3OH^* \leftrightarrow CH_3OH(g) + *$	1.11×10^{-7}	1.01×10^{-11}	3.13×10^{-7}	6.48×10^{-11}
128. $CH_2CH_2^* \leftrightarrow CH_2CH_2(g)+ *$	1.22×10^{-6}	6.38×10^{-7}	4.74×10^{-6}	2.72×10^{-6}
129. $CHCH^{**} \leftrightarrow CHCH(g) + 2^*$	-1.44×10^{-16}	-2.23×10^{-16}	-1.26×10^{-15}	-1.84×10^{-15}
130. $CO^* + O^* \leftrightarrow CO_2^* + *$	8.21×10^{-4}	1.88×10^{-3}	5.87×10^{-3}	2.72×10^{-2}
131. $CO_2^* \leftrightarrow CO_2(g) + *$	8.21×10^{-4}	1.88×10^{-3}	5.87×10^{-3}	2.72×10^{-2}
132. $CH_3CHO^{**} \leftrightarrow CH_3CHO(g) + 2^*$	3.82×10^{-3}	1.98×10^{-3}	4.97×10^{-2}	2.79×10^{-2}
133. $CH_2O^{**} \leftrightarrow CH_2O(g) + 2^*$	5.24×10^{-6}	3.83×10^{-10}	9.42×10^{-5}	5.36×10^{-9}
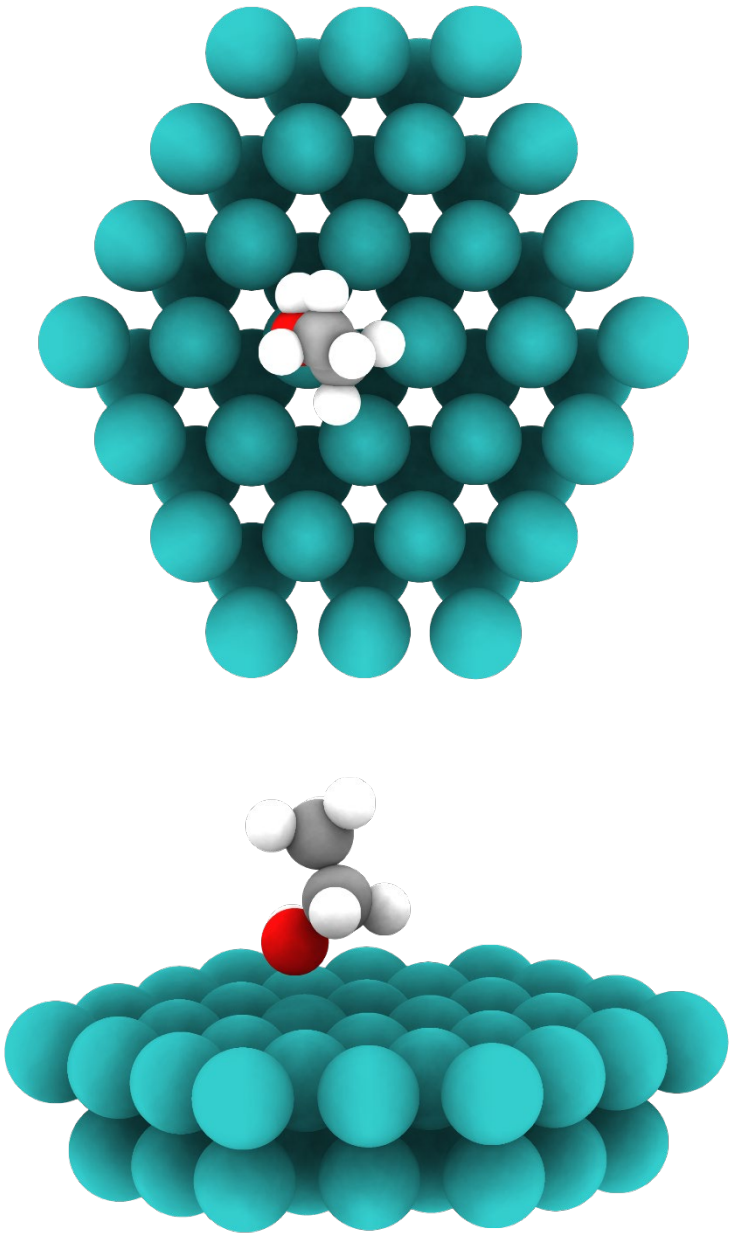
Figure S1. Top and side views of the hexagonal metal cluster (with adsorbed ethanol) employed in this study. The metal cluster consists of two layers of Ru atoms with 21 atoms in the bottom layer and 30 atoms in the top layer.