

Supporting Material for Density Functional Investigations on Catalytic Cycle of Hydrogenation of Aldehydes Catalyzed by an Enhanced Ruthenium Complex: An Alcohol-bridge Participated Autocatalysis Process

Xi Lu,^a Qian Liu,^a Xiaoyin Wang,^b Runjiao Cheng,^b Mingtao Zhang^{b,*} and Xiaomin Sun^{c,*}

^aDepartment of Chemical and Materials Engineering, University of Alberta, Edmonton, AB,

T6G 2V4, Canada, ^bComputational Center for Molecular Science, College of Chemistry,

NanKai University, Tianjin 300071, People's Republic of China, ^cEnvironment Research

Institute, Shandong University, Jinan, 250100, People's Republic of China.

E-mail: ^{b,*} zhangmt@nankai.edu.cn; ^{c,*} sxmwch@sdu.edu.cn.

Gaussian 09, Revision B.01,

M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

Figure S1. The geometry of **1** optimized at the theory level of B3LYP/LACVP*

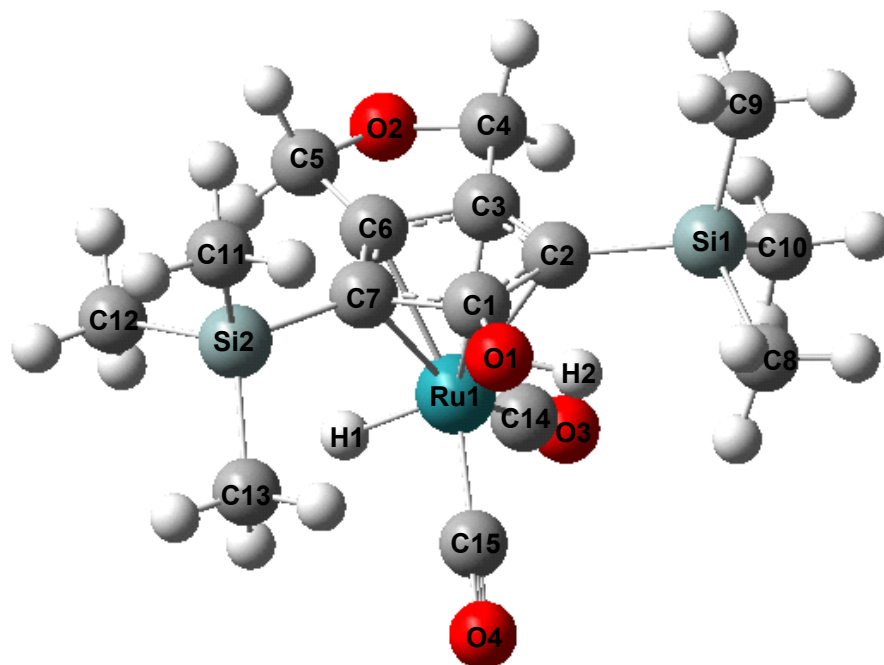


Table S1. Differences of bond lengths between crystal and B3LYP-optimized structure in gas (Å)

Bonds	Bond Lengths (Å)	
	Crystal (Exp.)	B3LYP/LACVP*
Ru(1)-C(15)	1.870	1.890
Ru(1)-C(14)	1.880	1.899
Ru(1)-H(1)	1.550	1.606
Si(1)-C(2)	1.881	1.887
Si(2)-C(7)	1.873	1.889
O(1)-C(1)	1.355	1.358
O(1)-H(2)	0.840	0.971
O(2)-C(5)	1.455	1.434
O(2)-C(4)	1.454	1.435
O(3)-C(14)	1.141	1.157
O(4)-C(15)	1.145	1.156
C(1)-C(7)	1.428	1.437
C(1)-C(2)	1.456	1.452
C(2)-C(3)	1.445	1.445
C(3)-C(6)	1.402	1.413
C(3)-C(4)	1.499	1.505
SRE ^a	0.0014	
RMSE ^b	0.0377	

a. Square Root Error; b. Root Mean Square Error.

Table S1 B3LYP-calculated energies and thermochemistry in gas at 298 K and 1 atm (Hartree)

Complexes	E_{SCF}	$E_{\text{SCF}} + H_{\text{corr}}$	$E_{\text{SCF}} + G_{\text{corr}}$
1	-1559.917980	-1559.529953	-1559.620294
PhCHO	-345.5734553	-345.456003	-345.493752
1/2TS	-1559.910933	-1559.524199	-1559.612225
2	-1559.915827	-1559.527988	-1559.61815
3	-1905.497973	-1904.990068	-1905.101692
3/4TS	-1905.476036	-1904.97437	-1905.08142
4	-1905.493638	-1904.984158	-1905.094223
5	-1558.713232	-1558.345909	-1558.435746
PhCH₂OH	-346.7706079	-346.628934	-346.668323
6	-1905.508242	-1904.996779	-1905.105909
5/7TS	-1559.888937	-1559.507673	-1559.605593
7	-1559.897468	-1559.514326	-1559.605967
7/2TS	-1559.845931	-1559.466251	-1559.556237
6/8TS	-1906.665872	-1906.140327	-1906.258850
8	-1906.675437	-1906.147950	-1906.262310
8/2TS	-1906.665031	-1906.140175	-1906.251078
9	-2253.456607	-2252.784621	-2252.921484
9/2TS	-2253.448685	-2252.779591	-2252.913003
(PhCH₂OH)₂	-693.5498883	-693.26414	-693.328754
H₂	-1.175482	-1.162033	-1.176825

Table S2 Single-point energies^a obtained at the M06/def2-TZVP, 6-31++G level with SMD solvent model in toluene (Hartree)**

Complexes	$E(\text{SCF}, \text{M06}) + \Delta G(\text{sol}, \text{M06})$
1	-1560.391912
PhCHO	-345.358054
1/2TS	-1560.384413

2	-1560.390021
3	-1905.751896
3/4TS	-1905.736505
4	-1905.756529
5	-1559.183886
PhCH₂OH	-346.5593995
6	-1905.767631
5/7TS	-1560.355709
7	-1560.372515
7/2TS	-1560.323131
6/8TS	-1906.917118
8	-1906.935734
8/2TS	-1906.919762
9	-2253.499496
9/2TS	-2253.484773
(PhCH₂OH)₂	-693.1260313
H₂	-1.168928

a. single-point calculations were performed at the B3LYP-optimized structures

Cartesian Coordinates of B3LYP-Optimized Structures in Gas

1

C	0.18338500	1.24395200	-0.09249000
O	0.38574000	2.24261800	-0.98951300
H	-0.45300800	2.46034000	-1.42678800
C	-1.08568500	0.80101900	0.42821400
C	-0.70765000	-0.20592600	1.39569600
C	-1.29536400	-0.99642300	2.53552700
H	-2.13188200	-1.65131000	2.27811500
H	-1.62364100	-0.31632400	3.34175700
C	1.04594700	-1.23169500	2.60743800
H	1.45103400	-0.63148500	3.44104000
H	1.74544500	-2.04106700	2.39115200
C	0.69713900	-0.34524000	1.44217400
C	1.30800700	0.53293200	0.47497400
Si	-2.81042500	1.46915800	0.07313800
C	-3.24299400	2.78815700	1.36276200
H	-3.24590000	2.36937700	2.37633800
H	-4.23749300	3.21318300	1.17791300
H	-2.52012900	3.61266300	1.34970700
C	-4.06950000	0.06277000	0.14752400
H	-4.07348800	-0.42913100	1.12746100
H	-3.86227600	-0.70300100	-0.60805800
H	-5.08258500	0.44530300	-0.02810300
C	-2.85448800	2.26694600	-1.65283100
H	-2.45298400	1.60421900	-2.42934500
H	-2.32972500	3.23143100	-1.70316600
H	-3.89540600	2.48167900	-1.92520400
Si	3.14011900	0.87172400	0.14628400
C	3.56217100	2.56821800	0.87790200
H	4.62033700	2.81347600	0.72320000
H	3.36733300	2.60248200	1.95659900
H	2.96379100	3.35576300	0.40524000
C	4.15208800	-0.47373800	1.01032700
H	5.22145800	-0.32961800	0.81230600
H	3.88073400	-1.47240400	0.64908400
H	4.01827700	-0.45745600	2.09873700
C	3.49350200	0.87116700	-1.70834200
H	4.53809200	1.14089900	-1.90797100
H	2.85285300	1.59151500	-2.22836200
H	3.31067400	-0.11743200	-2.14373200
C	0.30299200	-1.02857100	-2.47939700

O	0.49965600	-0.98277600	-3.61767100
C	-1.19298000	-2.52871800	-0.74184100
O	-1.93749800	-3.41231100	-0.79196300
H	1.15541200	-2.20624000	-0.58716100
O	-0.21054100	-1.82073400	2.97963900
Ru	0.01111600	-1.07960700	-0.60232800

PhCHO

C	0.59218900	-2.15091100	0.00000000
C	1.63048500	-1.21642100	0.00000000
C	1.33341900	0.14576600	0.00000000
C	0.00000000	0.57513200	0.00000000
C	-1.03935100	-0.36820200	0.00000000
C	-0.74227800	-1.72682800	0.00000000
H	0.82147000	-3.21326300	0.00000000
H	2.66433800	-1.54997000	0.00000000
H	2.13351300	0.88330000	0.00000000
H	-2.06440700	-0.01012700	0.00000000
H	-1.54419800	-2.45988100	0.00000000
C	-0.30611100	2.02370700	0.00000000
H	0.58997000	2.68483600	0.00000000
O	-1.42635100	2.49645600	0.00000000

1/2TS

C	-0.03957400	-1.27240700	-0.22234800
O	-0.03956100	-2.30158900	-1.12229000
H	0.79908400	-2.30481500	-1.60875100
C	1.11620500	-0.71917100	0.45993300
C	0.55858500	0.18476900	1.41928700
C	0.93322900	1.01801200	2.61584100
H	1.71671400	1.76076100	2.44739000
H	1.23854600	0.37616300	3.46125300
C	-1.41597500	1.00670000	2.43649900
H	-1.83541600	0.35102900	3.21935400
H	-2.17720900	1.73922900	2.15968300
C	-0.86062100	0.17863000	1.30754500
C	-1.27858800	-0.73203400	0.28563300
Si	2.93252200	-1.22259100	0.28020400
C	3.27534800	-2.59580900	1.53733100
H	3.10501400	-2.25093400	2.56418000
H	4.31514900	-2.93946900	1.47164500
H	2.62576100	-3.46267000	1.36801600
C	4.04040900	0.26905900	0.61701600

H	3. 87808300	0. 68060000	1. 61995900
H	3. 86417000	1. 07147400	-0. 10762000
H	5. 09715800	-0. 01758800	0. 54923300
C	3. 27227600	-1. 88221400	-1. 46782000
H	2. 96337000	-1. 17922200	-2. 25064000
H	2. 80377800	-2. 85678300	-1. 65968000
H	4. 35166100	-2. 03750400	-1. 58948000
Si	-3. 02876300	-1. 25646500	-0. 21525100
C	-3. 35589800	-2. 95005600	0. 56984600
H	-4. 36531300	-3. 30721200	0. 33036100
H	-3. 26636800	-2. 91486000	1. 66225000
H	-2. 64174800	-3. 69508900	0. 20011300
C	-4. 24543500	0. 01959700	0. 47443800
H	-5. 27195500	-0. 24545500	0. 19256000
H	-4. 04343200	1. 02125100	0. 07719300
H	-4. 21438900	0. 07529800	1. 56924500
C	-3. 19731900	-1. 37701200	-2. 09038100
H	-4. 19008000	-1. 75315700	-2. 36783100
H	-2. 44597000	-2. 05676100	-2. 50523200
H	-3. 05885300	-0. 39736000	-2. 56042900
C	1. 31298700	1. 47952400	-1. 92157200
O	2. 16221700	1. 72755100	-2. 67091000
C	-0. 59152300	2. 82086500	-0. 51730900
O	-0. 96634000	3. 90754300	-0. 39736200
H	-0. 96619500	0. 96132900	-1. 98847600
Ru	-0. 02541800	1. 02176500	-0. 68538500
O	-0. 27636900	1. 72151600	2. 93676900

2

C	0. 00479500	1. 29409600	-0. 28633900
O	0. 08664500	2. 24013600	-1. 25884700
H	-0. 72248100	2. 22316300	-1. 79450000
C	-1. 20780700	0. 74544800	0. 27847600
C	-0. 72523500	-0. 09369800	1. 36163200
C	-1. 22338100	-0. 83479900	2. 57356200
H	-1. 98088400	-1. 59927000	2. 38192600
H	-1. 62792600	-0. 12850500	3. 32041900
C	1. 13373700	-0. 82129300	2. 62161300
H	1. 50016000	-0. 11361700	3. 38612800
H	1. 90510000	-1. 57816500	2. 45987100
C	0. 67781100	-0. 08392500	1. 39166300
C	1. 19000800	0. 75659700	0. 32456100
Si	-2. 98813700	1. 23702000	-0. 11106600

C	-3.42784500	2.78103300	0.89471600
H	-3.34940100	2.59254400	1.97214300
H	-4.45539400	3.10641300	0.68950600
H	-2.76020100	3.61783800	0.65715600
C	-4.15225300	-0.17839600	0.34871400
H	-4.10120500	-0.41627600	1.41794700
H	-3.92812700	-1.09378800	-0.20943700
H	-5.19013700	0.10094100	0.12868800
C	-3.16030100	1.63455300	-1.96037200
H	-2.72854300	0.84755500	-2.58968800
H	-2.71093800	2.59681700	-2.24292300
H	-4.22322100	1.71369200	-2.22061700
Si	2.97583700	1.25246900	-0.06846500
C	3.24887500	3.01200200	0.57880200
H	4.27477900	3.34910700	0.38463900
H	3.07833900	3.07420200	1.66037100
H	2.56698600	3.71883500	0.09205400
C	4.13147800	0.05374500	0.83334400
H	5.17715700	0.30389000	0.61512700
H	3.97171400	-0.98389900	0.51795500
H	4.00801000	0.10073600	1.92210200
C	3.28217000	1.18855800	-1.92928200
H	4.28824700	1.55198700	-2.17296700
H	2.55533700	1.81045900	-2.46172300
H	3.18983200	0.16580000	-2.31126200
C	-1.29642500	-2.36853200	-0.92091800
O	-2.11991900	-3.16113900	-1.10097300
C	1.41964100	-2.22197400	-1.01181100
O	2.31658400	-2.91412000	-1.24526000
H	-0.05302500	-0.79226800	-2.21946800
O	-0.05188700	-1.48783700	3.08198600
Ru	0.00602300	-1.03676900	-0.61989700

3

C	-0.82213300	0.06976000	-1.21430300
O	0.16331200	-0.26915700	-2.06997300
H	1.00546700	0.22175000	-1.90790400
C	-1.79978300	-0.91183800	-0.80623000
C	-2.77208700	-0.15206500	-0.04793900
C	-4.15544000	-0.26979300	0.53121600
H	-4.29960500	-1.08117500	1.24892400
H	-4.90467300	-0.38308500	-0.27249500
C	-3.46623900	1.97728800	0.69490000

H	-3.99137200	2.59411200	-0.05460000
H	-3.16592600	2.62777300	1.52042800
C	-2.35813100	1.18661600	0.04907900
C	-1.09825200	1.37697300	-0.65163100
Si	-1.87666900	-2.70638600	-1.39549400
C	-2.40413300	-2.70842600	-3.21518900
H	-3.38791700	-2.24297000	-3.35025200
H	-2.46232700	-3.73053600	-3.60980600
H	-1.68473200	-2.15192300	-3.82681300
C	-3.16694500	-3.62317000	-0.35427400
H	-4.16747600	-3.18574100	-0.45664900
H	-2.90593800	-3.62496300	0.71047800
H	-3.23688200	-4.66965200	-0.67641700
C	-0.19404200	-3.54904900	-1.22142000
H	0.12408100	-3.58582800	-0.17338600
H	0.56606700	-3.00401800	-1.79060800
H	-0.23141500	-4.57822300	-1.60011600
Si	-0.25261800	3.03303300	-1.03447700
C	0.12193600	3.09698900	-2.89027100
H	0.57873100	4.05914900	-3.15360400
H	-0.79279800	2.98759500	-3.48490800
H	0.81379100	2.30675300	-3.20018400
C	-1.47112700	4.41894900	-0.60266600
H	-1.03092900	5.38979100	-0.86248700
H	-1.70432700	4.44735500	0.46825800
H	-2.41509800	4.32988200	-1.15286900
C	1.33735300	3.30075000	-0.04913900
H	1.76166800	4.28587800	-0.28334300
H	2.09184500	2.54546500	-0.28976200
H	1.15216800	3.26424300	1.03019800
C	-1.01909600	-1.57490200	2.30624400
O	-1.16967000	-2.50239500	2.98307800
C	-0.29527100	1.04705800	2.55505400
O	0.01085500	1.78689100	3.39078600
H	0.76775300	-0.53845200	1.10125900
O	-4.34527200	0.97337100	1.22255900
Ru	-0.79602200	-0.10708500	1.14871100
C	7.02104200	-0.80229800	0.77623000
C	6.07372500	-1.80111800	1.01583800
C	4.79391900	-1.68127400	0.47781100
C	4.46027300	-0.56053500	-0.29821900
C	5.41714800	0.44151700	-0.53516300
C	6.69347800	0.31787500	0.00123600

H	8. 01960700	-0. 89463900	1. 19482700
H	6. 33292700	-2. 66615500	1. 61904500
H	4. 04650400	-2. 45029600	0. 65873600
H	5. 13764900	1. 29964400	-1. 13826300
H	7. 43697000	1. 08894200	-0. 17906900
C	3. 10642100	-0. 45252300	-0. 85329300
H	2. 42618000	-1. 29513300	-0. 63554800
O	2. 70818800	0. 49784300	-1. 52444800

3/4TS

C	-1. 15409700	0. 38015700	1. 19333100
O	-0. 60614000	0. 19465000	2. 36890500
H	0. 44519500	-0. 23222500	2. 35671300
C	-1. 00368600	1. 58866100	0. 38358100
C	-1. 81877700	1. 34897900	-0. 77772700
C	-2. 43051200	2. 06784000	-1. 94981200
H	-1. 72731100	2. 58120300	-2. 60930500
H	-3. 17465700	2. 80373900	-1. 59779600
C	-3. 36887400	-0. 08594400	-1. 84728200
H	-4. 40216800	-0. 01385100	-1. 46461900
H	-3. 28537800	-1. 00103000	-2. 43777000
C	-2. 38760600	0. 04904100	-0. 71430500
C	-1. 96166900	-0. 61775100	0. 48610200
Si	-0. 15218500	3. 18283200	0. 95727000
C	-1. 09524500	3. 80809900	2. 47376200
H	-2. 14369400	4. 02733500	2. 23838500
H	-0. 64263800	4. 72615700	2. 86846100
H	-1. 08014500	3. 05390700	3. 26844900
C	-0. 26514100	4. 44605800	-0. 45085700
H	-1. 30282300	4. 67509900	-0. 72224200
H	0. 25351900	4. 09964500	-1. 35302100
H	0. 20605900	5. 38940500	-0. 14799800
C	1. 65483800	2. 86823200	1. 39740600
H	2. 25652200	2. 67064000	0. 50253800
H	1. 74819800	2. 00140300	2. 05920400
H	2. 08563900	3. 73976100	1. 90614500
Si	-2. 53753800	-2. 26508700	1. 22264100
C	-3. 66972100	-1. 86943200	2. 68547700
H	-4. 02704700	-2. 78765700	3. 16790300
H	-4. 54840000	-1. 29228600	2. 37346100
H	-3. 13097800	-1. 28050100	3. 43629400
C	-3. 49338000	-3. 20938500	-0. 11325200
H	-3. 84152100	-4. 17160500	0. 28238800

H	-2. 86848100	-3. 42453200	-0. 98850800
H	-4. 37950100	-2. 66171800	-0. 45644000
C	-1. 07675800	-3. 31154500	1. 80744900
H	-1. 43492500	-4. 20168000	2. 33978400
H	-0. 43097800	-2. 75072700	2. 49151800
H	-0. 46866100	-3. 65617200	0. 96242700
C	1. 09313900	0. 77439900	-1. 97391700
O	1. 80234800	1. 39902500	-2. 63716300
C	-0. 04439300	-1. 73524900	-1. 92930600
O	-0. 05189900	-2. 70009600	-2. 56615700
H	1. 20815300	-0. 72140900	0. 07073200
C	1. 96969300	-1. 24723600	1. 17678000
H	1. 54785300	-2. 25696300	1. 05283700
O	1. 66055300	-0. 59623800	2. 24737900
C	3. 34718000	-1. 10352700	0. 61047300
C	3. 79417000	-2. 00666900	-0. 36406100
C	4. 20837700	-0. 09887700	1. 06909800
C	5. 08389000	-1. 90300800	-0. 88123200
H	3. 12709100	-2. 79080200	-0. 71729200
C	5. 49876000	0. 00344500	0. 55103000
H	3. 85697600	0. 58312700	1. 83550900
C	5. 93843800	-0. 89463500	-0. 42549200
H	5. 42401700	-2. 60747300	-1. 63531000
H	6. 16516200	0. 78221000	0. 91215800
H	6. 94476900	-0. 81256900	-0. 82729500
Ru	-0. 12566300	-0. 16847400	-0. 85945100
O	-3. 06814700	1. 02567000	-2. 70217900

4

C	-1. 23386200	0. 33095900	1. 30303000
O	-0. 70574700	0. 19646000	2. 42536700
H	1. 01183900	-0. 18941500	2. 45934300
C	-1. 13589200	1. 54091700	0. 42160200
C	-1. 93282800	1. 23729600	-0. 71589600
C	-2. 61217700	1. 89507900	-1. 88671200
H	-1. 96160600	2. 47328300	-2. 54584400
H	-3. 41712900	2. 55753300	-1. 52388700
C	-3. 37171400	-0. 32380000	-1. 78316900
H	-4. 40347800	-0. 32387500	-1. 38999000
H	-3. 22677800	-1. 23206700	-2. 37132800
C	-2. 39943100	-0. 12284400	-0. 65267900
C	-1. 92285100	-0. 75363400	0. 52861800
Si	-0. 37683500	3. 19186900	0. 96542900

C	1. 48953500	3. 03629700	1. 19166000
H	1. 74800700	2. 16547100	1. 80285400
H	1. 89334200	3. 93169100	1. 68094400
H	1. 99854400	2. 92786500	0. 22641500
C	-1. 20763400	3. 69053400	2. 58971700
H	-1. 06311900	2. 91275100	3. 34715000
H	-2. 28671900	3. 83978100	2. 46224100
H	-0. 78483900	4. 62657200	2. 97501300
C	-0. 75026100	4. 47886400	-0. 37639600
H	-1. 82716900	4. 61313700	-0. 53571400
H	-0. 29353400	4. 21583300	-1. 33828200
H	-0. 34282500	5. 45429300	-0. 08271400
Si	-2. 35346800	-2. 44613500	1. 25871300
C	-3. 52667000	-2. 14941500	2. 71315600
H	-3. 79790700	-3. 09359600	3. 20153000
H	-4. 45501700	-1. 66120800	2. 39298800
H	-3. 04941700	-1. 50641900	3. 46111200
C	-3. 21223400	-3. 47833700	-0. 07813600
H	-3. 48668800	-4. 46180600	0. 32317500
H	-2. 56384300	-3. 65059800	-0. 94559000
H	-4. 13612200	-3. 00628500	-0. 43403600
C	-0. 80218500	-3. 33922600	1. 86214000
H	-1. 07218300	-4. 26559000	2. 38424600
H	-0. 23929500	-2. 71221100	2. 56172800
H	-0. 13987000	-3. 60907900	1. 03095900
C	0. 86251400	0. 93078000	-2. 06583900
O	1. 41130600	1. 63536800	-2. 79635900
C	-0. 03838200	-1. 68991100	-1. 96161200
O	-0. 05358700	-2. 63240100	-2. 62934000
H	1. 45253600	-0. 54609400	0. 24443100
C	2. 12708000	-0. 99285300	1. 06948800
O	1. 97284700	-0. 29289300	2. 25680400
C	3. 54165600	-0. 92410100	0. 54782500
C	3. 95171400	-1. 81688300	-0. 45147100
C	4. 44892500	0. 02426800	1. 03126600
C	5. 24568800	-1. 75835600	-0. 96706700
H	3. 25504000	-2. 56561300	-0. 82493600
C	5. 74670500	0. 07876500	0. 51822700
H	4. 13380100	0. 70447100	1. 81451200
C	6. 14822600	-0. 80753800	-0. 48258800
H	5. 55139900	-2. 45778700	-1. 74064100
H	6. 44615700	0. 81582000	0. 90420300
H	7. 15855900	-0. 76239100	-0. 88028800

H	1. 79736600	-2. 03871800	1. 14960700
Ru	-0. 18009400	-0. 13178600	-0. 86369000
O	-3. 15559300	0. 80364000	-2. 64094900

5

C	-0. 00004800	1. 46408400	-0. 12814200
O	-0. 00010200	2. 41246900	-0. 91397500
C	-1. 21848800	0. 71652200	0. 36525600
C	-0. 72454700	-0. 22409700	1. 29486800
C	-1. 17435500	-1. 12728900	2. 40941300
H	-1. 95783600	-1. 84065000	2. 14534800
H	-1. 52923200	-0. 51767400	3. 25870700
C	1. 17425400	-1. 12733600	2. 40933400
H	1. 52917700	-0. 51763300	3. 25855200
H	1. 95773100	-1. 84072700	2. 14532300
C	0. 72443500	-0. 22423900	1. 29472700
C	1. 21838800	0. 71637800	0. 36505800
Si	-2. 98313600	1. 26084800	-0. 04816300
C	-3. 24176300	2. 97728500	0. 70336700
H	-3. 13866300	2. 96185600	1. 79508900
H	-4. 23970000	3. 36781800	0. 46861000
H	-2. 50060600	3. 67854800	0. 30437300
C	-4. 19805800	0. 02056000	0. 71127400
H	-4. 10971300	-0. 02670900	1. 80369700
H	-4. 05505900	-0. 99173000	0. 31500100
H	-5. 22991800	0. 31591300	0. 48384200
C	-3. 18808900	1. 32943400	-1. 92389100
H	-3. 09620700	0. 33485000	-2. 37637300
H	-2. 41947100	1. 97451000	-2. 36279000
H	-4. 17108800	1. 73135200	-2. 19884400
Si	2. 98306900	1. 26089600	-0. 04801000
C	3. 24160300	2. 97707200	0. 70415500
H	4. 23940800	3. 36784600	0. 46923000
H	3. 13885500	2. 96120400	1. 79590200
H	2. 50023000	3. 67838400	0. 30565200
C	4. 19789500	0. 02030700	0. 71108900
H	5. 22983600	0. 31576100	0. 48417400
H	4. 05499600	-0. 99176400	0. 31421300
H	4. 10919400	-0. 02758200	1. 80345600
C	3. 18811300	1. 33010600	-1. 92370300
H	4. 17116600	1. 73197100	-2. 19853800
H	2. 41955100	1. 97534400	-2. 36245500
H	3. 09613100	0. 33564400	-2. 37644500

C	-1.38749700	-2.19411500	-1.08332600
O	-2.25953800	-2.93991800	-1.21933600
C	1.38790300	-2.19344600	-1.08356900
O	2.26033800	-2.93875700	-1.21977700
O	-0.00005600	-1.86534700	2.77009700
Ru	-0.00003300	-0.94081500	-0.68683700

PhCH₂OH

C	-2.30106700	-0.28957700	-0.08630400
C	-1.38690100	-1.33614400	0.05512700
C	-0.02283200	-1.06624700	0.16683500
C	0.44628100	0.25330900	0.13460200
C	-0.47585200	1.29533500	-0.01614800
C	-1.84197500	1.02823400	-0.12063600
H	-3.36373200	-0.50000300	-0.17343300
H	-1.73746100	-2.36485200	0.08019500
H	0.69307000	-1.87625500	0.27347800
H	-0.12178200	2.32380000	-0.05452000
H	-2.54579100	1.84818100	-0.23837000
C	1.92782800	0.54382900	0.28369500
H	2.15114000	1.54523200	-0.11854800
H	2.20784200	0.55867400	1.34398600
O	2.76634900	-0.44774500	-0.29800900
H	2.51302800	-0.52525000	-1.23174800

6

Si	-2.12563000	-2.74681400	-0.93118400
Si	-1.23196800	3.14615200	-0.91925300
O	-1.28524100	0.13802400	-2.36310100
O	1.23773600	-0.01820700	-1.39341200
H	0.48412400	-0.02160500	-2.04290500
O	1.75217600	1.93867500	2.21946100
O	1.13683700	-2.52562600	2.05444200
C	-1.59125600	0.18110200	-1.14553200
C	-1.84013600	-1.00146500	-0.27013900
C	-2.06548400	-0.47001400	1.03855300
C	-2.64207900	-0.84814800	2.37719900
H	-2.18008700	-1.70896900	2.86469700
H	-3.72408400	-1.04458900	2.27606400
C	-2.31489400	1.47483800	2.37402900
H	-3.29987800	1.96390300	2.27326400
H	-1.63040400	2.17553800	2.85645000
C	-1.87230400	0.94875600	1.03470900

C	-1.49495600	1.39184600	-0.26771000
C	-0.61175100	-3.38606400	-1.86785100
H	0.24705700	-3.52285400	-1.19996700
H	-0.32783400	-2.68541300	-2.66036800
H	-0.82688000	-4.35455600	-2.33630100
C	-3.60744400	-2.67945600	-2.10613700
H	-3.41285300	-1.96615400	-2.91486300
H	-4.51979800	-2.35931900	-1.58855600
H	-3.80570100	-3.65991800	-2.55674600
C	-2.49559700	-3.89800800	0.52842700
H	-2.67842500	-4.91829000	0.16889800
H	-3.38906200	-3.58523200	1.08236900
H	-1.65858000	-3.94679400	1.23543100
C	-2.75700800	3.62000600	-1.93678600
H	-2.65497600	4.62836900	-2.35712700
H	-3.67005300	3.60347900	-1.32939600
H	-2.89532200	2.92045200	-2.76899900
C	0.31154700	3.24737800	-2.00311700
H	0.22917200	2.55893900	-2.85020200
H	1.21563200	2.98475800	-1.44277000
H	0.43701100	4.26336400	-2.39797900
C	-1.05933800	4.31861700	0.56143100
H	-0.90521400	5.34752600	0.21287600
H	-0.20379800	4.05764100	1.19581000
H	-1.95789400	4.32275400	1.19068600
C	2.31043200	-0.87148500	-1.84114300
H	2.49001300	-0.63980700	-2.89956000
H	2.01460800	-1.92431300	-1.76718300
C	3.54952100	-0.60872200	-1.02565300
C	4.11533100	0.67429700	-0.99380100
H	3.64788200	1.47796500	-1.55696700
C	5.26240800	0.92226700	-0.24214700
H	5.69066400	1.92080900	-0.22243100
C	5.86384500	-0.11204300	0.48210100
H	6.75934900	0.08164200	1.06633800
C	5.31044500	-1.39227000	0.45236700
H	5.77093600	-2.20007100	1.01454700
C	4.15583700	-1.63658000	-0.29576100
H	3.72297500	-2.63420600	-0.31170800
C	1.17534900	1.16136900	1.58857300
C	0.80150500	-1.57154100	1.49298400
O	-2.41202900	0.30524900	3.19725000
Ru	0.08132100	-0.05042700	0.59881900

5/7TS

C	-0.00297100	1.46688200	-0.10844300
O	-0.00012000	2.41005400	-0.90042200
H	0.12295000	-0.54890600	-4.38319800
C	-1.22244700	0.72194500	0.38586700
C	-0.73148200	-0.21012100	1.32647400
C	-1.18511500	-1.10170500	2.44894800
H	-1.96823600	-1.81733800	2.19029000
H	-1.54164500	-0.48318500	3.29111300
C	1.16310800	-1.10065500	2.45778800
H	1.51301900	-0.48211200	3.30270100
H	1.94867200	-1.81558400	2.20457100
C	0.71697600	-0.20918900	1.33221400
C	1.21385900	0.72305700	0.39511400
Si	-2.98690500	1.26466500	-0.02981100
C	-3.24468800	2.98421800	0.71521600
H	-3.14151800	2.97290900	1.80698600
H	-4.24240900	3.37446600	0.47905200
H	-2.50315000	3.68357500	0.31355700
C	-4.20180200	0.02807900	0.73597000
H	-4.11338200	-0.01377500	1.82860700
H	-4.05881300	-0.98619600	0.34476400
H	-5.23371100	0.32224700	0.50722500
C	-3.19645800	1.32662200	-1.90508000
H	-3.10286200	0.33092000	-2.35454600
H	-2.43106100	1.97250800	-2.34825400
H	-4.18145600	1.72485100	-2.17830000
Si	2.97978100	1.26749700	-0.01110700
C	3.23452100	2.98526600	0.73897300
H	4.23315400	3.37606400	0.50763900
H	3.12715100	2.97118800	1.83030200
H	2.49455500	3.68566300	0.33624300
C	4.19301300	0.02970000	0.75507100
H	5.22550700	0.32578400	0.53150100
H	4.05271900	-0.98353100	0.36027500
H	4.10015600	-0.01560900	1.84721000
C	3.19322500	1.33533600	-1.88603700
H	4.17782300	1.73586000	-2.15722300
H	2.42727000	1.98230500	-2.32695200
H	3.10163500	0.34083900	-2.33863900
C	-1.38520500	-2.20755900	-1.02543600
O	-2.25639300	-2.95570400	-1.15368200

C	1. 38937000	-2. 20991600	-1. 00891300
O	2. 26032400	-2. 96022400	-1. 12567800
H	0. 51026500	-0. 02394700	-4. 02658100
Ru	0. 00103400	-0. 94797800	-0. 64240000
O	-0. 01203800	-1. 83662600	2. 82024900

7

C	0. 00011000	1. 52925400	-0. 06709600
O	0. 00001800	2. 59600000	-0. 67270200
H	-0. 39631600	-0. 29255400	-2. 51842700
C	-1. 21016600	0. 70412200	0. 32116600
C	-0. 71820500	-0. 26294200	1. 24473400
C	-1. 17250300	-1. 15985900	2. 36571400
H	-1. 96174500	-1. 87082200	2. 11308900
H	-1. 51667600	-0. 54304200	3. 21418700
C	1. 17344400	-1. 15980300	2. 36531300
H	1. 51787800	-0. 54297000	3. 21366100
H	1. 96263600	-1. 87072300	2. 11242300
C	0. 71876900	-0. 26284400	1. 24451600
C	1. 21044400	0. 70418400	0. 32078000
Si	-2. 97341700	1. 29065200	-0. 03111400
C	-3. 24592700	2. 89894100	0. 92895300
H	-3. 17166300	2. 74402800	2. 01218300
H	-4. 23652700	3. 32177800	0. 72043000
H	-2. 49222700	3. 64017000	0. 64135100
C	-4. 20225100	-0. 02870700	0. 55433600
H	-4. 13281200	-0. 20138600	1. 63550600
H	-4. 05404800	-0. 99035300	0. 04931500
H	-5. 22978500	0. 29440900	0. 34544200
C	-3. 16518200	1. 60875600	-1. 88285100
H	-3. 10495800	0. 68060800	-2. 46370800
H	-2. 37192900	2. 28114100	-2. 22742600
H	-4. 13105200	2. 07913400	-2. 10438400
Si	2. 97365100	1. 29057300	-0. 03186800
C	3. 24649000	2. 89890900	0. 92802700
H	4. 23698000	3. 32177400	0. 71903700
H	3. 17272500	2. 74403100	2. 01129600
H	2. 49264100	3. 64010900	0. 64074100
C	4. 20237300	-0. 02892400	0. 55354500
H	5. 22998500	0. 29415200	0. 34498700
H	4. 05420600	-0. 99042700	0. 04823500
H	4. 13267300	-0. 20190000	1. 63465100
C	3. 16525500	1. 60841200	-1. 88365800

H	4. 13138400	2. 07812200	-2. 10545800
H	2. 37233900	2. 28120200	-2. 22820800
H	3. 10427700	0. 68020600	-2. 46433900
C	-1. 38269500	-2. 27395700	-0. 97511200
O	-2. 23622800	-3. 04752400	-1. 03561200
C	1. 38167000	-2. 27507000	-0. 97363900
O	2. 23473200	-3. 04921100	-1. 03315200
H	0. 39594800	-0. 29991300	-2. 52138700
O	0. 00054800	-1. 90306600	2. 72160700
Ru	-0. 00021600	-0. 95878100	-0. 72843000

7/2TS

Si	-2. 97691900	1. 26880200	0. 01570900
Si	2. 97688100	1. 26854300	0. 01645800
O	0. 00020600	2. 08602600	-1. 23219700
O	2. 28352300	-2. 87454800	-1. 28408900
O	-2. 28151800	-2. 87808100	-1. 28123100
C	0. 00006100	1. 32271100	-0. 17227300
C	-1. 21021000	0. 69298000	0. 39038100
C	-0. 71413700	-0. 27403800	1. 33626300
C	-1. 17386000	-1. 16019700	2. 46170300
H	-1. 96048100	-1. 87479000	2. 21101900
H	-1. 52520200	-0. 53832000	3. 30395400
C	1. 17304400	-1. 16025400	2. 46197200
H	1. 52404900	-0. 53827900	3. 30428600
H	1. 95975000	-1. 87484300	2. 21157000
C	0. 71355100	-0. 27420900	1. 33636800
C	1. 20998500	0. 69307300	0. 39079000
C	-3. 31635900	1. 26575900	-1. 83958700
H	-3. 26109900	0. 25397700	-2. 25667200
H	-2. 58163100	1. 88660800	-2. 36167600
H	-4. 31677700	1. 66400000	-2. 05049900
C	-3. 14838200	3. 02121700	0. 70818300
H	-2. 41726100	3. 68986800	0. 23962700
H	-2. 98323900	3. 04784800	1. 79200600
H	-4. 14841400	3. 42808100	0. 51364100
C	-4. 17244400	0. 09465400	0. 90158700
H	-5. 20867300	0. 40809200	0. 72393200
H	-4. 01898700	0. 08780700	1. 98771500
H	-4. 07954400	-0. 93622500	0. 53881600
C	3. 14864400	3. 02085100	0. 70912800
H	4. 14887200	3. 42741400	0. 51496400
H	2. 98314300	3. 04743100	1. 79289700

H	2. 41789400	3. 68978300	0. 24039400
C	3. 31654900	1. 26555200	-1. 83879500
H	2. 58151500	1. 88598100	-2. 36095400
H	3. 26188200	0. 25371600	-2. 25582500
H	4. 31677800	1. 66429500	-2. 04964900
C	4. 17193100	0. 09403700	0. 90250000
H	5. 20825700	0. 40768800	0. 72579100
H	4. 07940000	-0. 93663400	0. 53904500
H	4. 01767800	0. 08652900	1. 98851200
C	1. 39814500	-2. 16026500	-1. 09545700
C	-1. 39703500	-2. 16240600	-1. 09372900
H	-0. 00218800	0. 03077900	-2. 34849900
H	-0. 00141800	0. 95900000	-2. 01765900
O	-0. 00046700	-1. 89705600	2. 82926800
Ru	-0. 00010500	-0. 90704900	-0. 70421100

6/8TS

C	0. 77048100	-0. 08719700	1. 33530300
O	-0. 33388300	-0. 19283200	1. 89343200
H	-2. 30270200	-0. 72007500	-2. 19170600
C	1. 58907800	-1. 22371100	0. 78836200
C	2. 78506400	-0. 62410200	0. 32562200
C	4. 19390500	-0. 95972500	-0. 07902800
H	4. 29041100	-1. 70004600	-0. 87566300
H	4. 75371100	-1. 32005000	0. 80162000
C	4. 04082100	1. 37807900	0. 05722100
H	4. 55566500	1. 70324800	0. 97800700
H	4. 03459700	2. 21150200	-0. 64787400
C	2. 69035400	0. 81806800	0. 40883200
C	1. 43085400	1. 20013700	0. 93141600
Si	1. 08696000	-3. 04023100	0. 99337300
C	0. 89793000	-3. 37673900	2. 84441700
H	1. 84209200	-3. 22915300	3. 38246700
H	0. 56821900	-4. 40724300	3. 02555500
H	0. 15413800	-2. 69933200	3. 27751500
C	2. 45763500	-4. 12572400	0. 26296800
H	3. 41754900	-3. 97806800	0. 77292500
H	2. 60706800	-3. 93508900	-0. 80667600
H	2. 19497300	-5. 18569900	0. 36841100
C	-0. 54290000	-3. 35083800	0. 08943200
H	-0. 39418300	-3. 40166400	-0. 99573400
H	-1. 27087700	-2. 55594100	0. 28503300
H	-0. 98586900	-4. 30346400	0. 40615200

Si	0. 71000000	2. 90333000	1. 34670000
C	0. 49870800	2. 99813100	3. 22320900
H	0. 05239800	3. 95495900	3. 52101400
H	1. 45917300	2. 90192200	3. 74380100
H	-0. 15610100	2. 19300500	3. 57330000
C	1. 93215600	4. 22582200	0. 75597400
H	1. 54428900	5. 22609100	0. 98547800
H	2. 09133400	4. 18196200	-0. 32819500
H	2. 90871000	4. 13695500	1. 24762700
C	-0. 95013700	3. 12176800	0. 47257600
H	-1. 47181200	4. 01023900	0. 85008100
H	-1. 60450100	2. 25580400	0. 62082600
H	-0. 81377100	3. 25349900	-0. 60765900
C	1. 49090500	-1. 21573100	-2. 46146400
O	1. 75225600	-2. 02917800	-3. 23739600
C	1. 28744700	1. 55678500	-2. 29918400
O	1. 41680500	2. 48371300	-2. 97469800
H	-2. 09565600	-0. 82643200	-2. 89925700
C	-3. 81405800	-0. 57745600	1. 07922500
H	-3. 84866800	-0. 02374300	2. 03251800
H	-3. 79542700	-1. 64855700	1. 33679300
O	-2. 65550700	-0. 20889800	0. 34411300
H	-1. 89296600	-0. 21391000	0. 95629000
O	4. 73385700	0. 28104300	-0. 55166500
Ru	1. 21764800	0. 08151200	-1. 07924400
C	-5. 06659300	-0. 27822200	0. 28429000
C	-6. 23470800	-1. 01549300	0. 51435300
C	-5. 09575000	0. 75749100	-0. 65653200
C	-7. 41266000	-0. 71975400	-0. 17282500
H	-6. 22099600	-1. 83133900	1. 23474600
C	-6. 27100500	1. 04936600	-1. 35138800
H	-4. 18888300	1. 32215000	-0. 84532800
C	-7. 43392400	0. 31494600	-1. 11057500
H	-8. 31002700	-1. 30339800	0. 01665400
H	-6. 27765500	1. 85283500	-2. 08385900
H	-8. 34803000	0. 54293000	-1. 65266500

8

C	0. 67649000	0. 05096600	-1. 35432700
O	-0. 38427800	0. 03971900	-1. 99533300
H	-0. 70213600	0. 20346700	1. 31335300
C	1. 35989000	1. 25776100	-0. 77333400
C	2. 64376200	0. 78969300	-0. 35204500

C	4. 03422900	1. 27766000	-0. 04094800
H	4. 10816100	2. 03672700	0. 74002500
H	4. 49934600	1. 67602800	-0. 95941700
C	4. 11471000	-1. 06281800	-0. 15615300
H	4. 60369200	-1. 33772300	-1. 10702500
H	4. 24054100	-1. 88845000	0. 54695300
C	2. 69438500	-0. 64226800	-0. 42777000
C	1. 44719000	-1. 15570300	-0. 89191200
Si	0. 71339000	3. 02218900	-1. 01937800
C	0. 49139000	3. 30143000	-2. 87678400
H	1. 44476800	3. 22865700	-3. 41416900
H	0. 06950900	4. 29357700	-3. 07956900
H	-0. 18615900	2. 54826600	-3. 29255600
C	1. 99682600	4. 23399000	-0. 32664400
H	2. 95953700	4. 15833500	-0. 84699600
H	2. 17587200	4. 07824800	0. 74409000
H	1. 64419400	5. 26574700	-0. 44859700
C	-0. 92968300	3. 23695800	-0. 11149000
H	-0. 77300300	3. 31440200	0. 97140800
H	-1. 60202400	2. 38998700	-0. 28833000
H	-1. 43865700	4. 15259800	-0. 43760100
Si	0. 90514500	-2. 92477800	-1. 29791000
C	0. 83172100	-3. 09065800	-3. 18101200
H	0. 48376300	-4. 08815700	-3. 47658200
H	1. 81574700	-2. 93253300	-3. 63887300
H	0. 14240000	-2. 35013900	-3. 60060000
C	2. 18827200	-4. 12924900	-0. 59258800
H	1. 88839700	-5. 16366600	-0. 80178600
H	2. 29223500	-4. 03601300	0. 49502900
H	3. 17856800	-3. 98356400	-1. 04155700
C	-0. 79079500	-3. 25631400	-0. 53442000
H	-1. 22611600	-4. 18081700	-0. 93373000
H	-1. 48723800	-2. 43612200	-0. 74020100
H	-0. 71904100	-3. 36804900	0. 55438600
C	1. 50243200	1. 32160400	2. 44644100
O	1. 73385600	2. 18083200	3. 17931600
C	1. 70437800	-1. 45064200	2. 34631200
O	2. 06339600	-2. 31518100	3. 01895000
H	-0. 60715600	-0. 56943900	1. 45802700
C	-3. 90590800	0. 30984500	-1. 15934700
H	-3. 98470300	-0. 33932500	-2. 04792200
H	-3. 93260800	1. 34917100	-1. 52421600
O	-2. 69809600	0. 04200300	-0. 46297600

H	-1. 96304100	0. 04383500	-1. 11073300
Ru	1. 22423600	-0. 04387100	1. 12176300
O	4. 72413900	0. 10448100	0. 40995100
C	-5. 09767400	0. 06757500	-0. 25846300
C	-6. 29088000	0. 76988200	-0. 46671400
C	-5. 04508100	-0. 88523800	0. 76558500
C	-7. 41387300	0. 52019100	0. 32351500
H	-6. 34044700	1. 52198600	-1. 25193000
C	-6. 16469300	-1. 13121100	1. 56224100
H	-4. 11820000	-1. 42294400	0. 93582200
C	-7. 35370700	-0. 43232500	1. 34285600
H	-8. 33173300	1. 07602100	0. 14919900
H	-6. 10812800	-1. 87091800	2. 35714200
H	-8. 22464100	-0. 62424700	1. 96418400

8/2TS

C	0. 88501700	0. 03899400	1. 34928300
O	-0. 04646900	-0. 08108300	2. 20357700
H	-1. 54768300	0. 02416500	-0. 16427100
C	1. 62094400	-1. 08845700	0. 72716000
C	2. 61769800	-0. 47843200	-0. 11100000
C	3. 91259200	-0. 79276700	-0. 81199200
H	3. 86991100	-1. 59747700	-1. 54913500
H	4. 69061000	-1. 04351800	-0. 06917700
C	3. 62511300	1. 53631000	-0. 83826500
H	4. 31638800	1. 98423300	-0. 10325500
H	3. 39252600	2. 29038000	-1. 59318400
C	2. 44281600	0. 93312800	-0. 12559900
C	1. 31841700	1. 30268000	0. 69100200
Si	1. 49684600	-2. 88299700	1. 29750700
C	2. 16721900	-2. 97991800	3. 06607600
H	3. 22248600	-2. 68567300	3. 11629300
H	2. 08569900	-3. 99808900	3. 46661800
H	1. 60137600	-2. 31072800	3. 72412700
C	2. 54934000	-3. 96061500	0. 14638500
H	3. 60827800	-3. 67579800	0. 16816500
H	2. 20661600	-3. 90644300	-0. 89377000
H	2. 49157500	-5. 01178000	0. 45537700
C	-0. 29052700	-3. 49897700	1. 27884900
H	-0. 71823600	-3. 47019600	0. 26987400
H	-0. 90864800	-2. 87831800	1. 93552100
H	-0. 34724600	-4. 53376000	1. 63908700
Si	0. 76717600	3. 04228100	1. 19961400

C	0. 88037100	3. 15289600	3. 08493800
H	0. 49746200	4. 11341200	3. 45122100
H	1. 91596300	3. 05197100	3. 43189800
H	0. 29643400	2. 34896300	3. 54533500
C	1. 94752000	4. 29465600	0. 40156900
H	1. 67223200	5. 31235700	0. 70551400
H	1. 90090400	4. 26183300	-0. 69380200
H	2. 99031800	4. 13736600	0. 70198100
C	-0. 98999800	3. 44551400	0. 62874300
H	-1. 28535900	4. 43571400	0. 99911000
H	-1. 72333400	2. 71662000	0. 98688600
H	-1. 05366000	3. 46733300	-0. 46570500
C	0. 70655600	-1. 44052100	-2. 36685000
O	0. 78305900	-2. 33337100	-3. 09580800
C	0. 40555600	1. 31976400	-2. 43359100
O	0. 29561300	2. 17199000	-3. 20477200
H	-1. 07667100	-0. 22830200	-0. 97062900
C	-3. 17689100	-0. 79948400	1. 19526300
H	-3. 34461900	-0. 80211000	2. 27859500
H	-2. 75332100	-1. 76961600	0. 91383800
O	-2. 21191300	0. 25048300	0. 93244600
H	-1. 41043900	0. 16694800	1. 58250500
O	4. 24184600	0. 42256100	-1. 49789600
Ru	0. 66573600	-0. 01822200	-1. 09721800
C	-4. 45211500	-0. 52940800	0. 43992800
C	-4. 96393400	-1. 47816700	-0. 45138100
C	-5. 14963600	0. 67159800	0. 63235500
C	-6. 15823900	-1. 23882900	-1. 13555300
H	-4. 42611000	-2. 40996100	-0. 61122600
C	-6. 33708400	0. 91544700	-0. 05492000
H	-4. 75265800	1. 41727800	1. 31606600
C	-6. 84574000	-0. 04122900	-0. 93884800
H	-6. 54508300	-1. 98465000	-1. 82452700
H	-6. 86854400	1. 85062400	0. 09944500
H	-7. 77292600	0. 14925600	-1. 47256100

9

C	-1. 56850000	-1. 44707900	0. 67693300
O	-0. 63932900	-2. 23751900	0. 92026400
H	0. 00632400	0. 50055300	-1. 20331900
C	-2. 00595800	-0. 29419100	1. 52623000
C	-3. 24185600	0. 14653200	0. 94883400
C	-4. 49293400	0. 91256700	1. 28968700

H	-4.34202400	1.94156700	1.62115100
H	-5.05962800	0.37344200	2.06881700
C	-4.86071300	-0.17535300	-0.75591000
H	-5.53356400	-1.03121500	-0.57208700
H	-4.95607900	0.11895300	-1.80287600
C	-3.46959700	-0.52386700	-0.29604800
C	-2.38306000	-1.40240200	-0.58680300
Si	-1.29463300	0.06546800	3.24459700
C	-1.81963900	-1.36072400	4.37698000
H	-2.91056700	-1.42916200	4.46797100
H	-1.40981200	-1.23385000	5.38685200
H	-1.45541900	-2.31625100	3.98286100
C	-2.03313900	1.68766500	3.88952200
H	-3.12533400	1.63801900	3.97949100
H	-1.78492900	2.54203000	3.24965500
H	-1.63814800	1.90492500	4.88988400
C	0.58621400	0.17193400	3.18286900
H	0.93834900	0.97230200	2.52386600
H	1.00653300	-0.76583500	2.80514400
H	0.99439900	0.34793400	4.18608900
Si	-2.14312100	-2.63489200	-2.00252700
C	-2.45700300	-4.37107200	-1.31803900
H	-2.28412500	-5.13696700	-2.08418200
H	-3.48804700	-4.48397000	-0.96150000
H	-1.78643100	-4.57333000	-0.47584200
C	-3.39535300	-2.24221200	-3.37039800
H	-3.27309100	-2.94213700	-4.20640600
H	-3.26584400	-1.23029400	-3.77238600
H	-4.43038300	-2.33694200	-3.01950100
C	-0.38405800	-2.50502000	-2.68125200
H	-0.18147600	-3.31744300	-3.39044100
H	0.36031500	-2.56275500	-1.87952500
H	-0.23390200	-1.55693600	-3.21164100
C	-1.54346000	2.60071200	0.17301300
O	-1.51109500	3.66025600	0.62374100
C	-2.17367500	1.40713300	-2.24936700
O	-2.54058000	1.72394200	-3.29575800
H	0.31173000	0.76175000	-0.50892700
C	2.81125200	-2.80189100	1.04460500
H	2.43415600	-3.82683300	0.90604500
H	2.75758100	-2.58001600	2.12054600
O	1.99643300	-1.89947800	0.29648800
H	1.05135500	-2.06579600	0.52594500

C	3. 07498600	1. 21280800	-0. 81800700
H	2. 63928500	0. 89581100	-1. 78095700
H	4. 04269000	0. 69371400	-0. 72757800
O	2. 23327800	0. 85498300	0. 26897900
H	2. 25556400	-0. 12732100	0. 35977100
C	4. 24540600	-2. 71288900	0. 57607700
C	5. 29800600	-2. 77799200	1. 49571300
C	4. 54458900	-2. 59867900	-0. 78842800
C	6. 62559300	-2. 74116100	1. 06429700
H	5. 07774500	-2. 85364400	2. 55844100
C	5. 87036100	-2. 55246300	-1. 22084000
H	3. 73115900	-2. 53958100	-1. 50518200
C	6. 91534300	-2. 62689200	-0. 29613500
H	7. 43149500	-2. 79105100	1. 79183500
H	6. 08872100	-2. 46068400	-2. 28178200
H	7. 94766100	-2. 59149900	-0. 63398000
C	3. 29672900	2. 70917300	-0. 83992000
C	3. 33378300	3. 44619200	0. 35033900
C	3. 50715000	3. 37524700	-2. 05339600
C	3. 57814100	4. 82017000	0. 32500800
H	3. 16070700	2. 93351300	1. 29095600
C	3. 75963800	4. 74801300	-2. 08032100
H	3. 47140000	2. 81537700	-2. 98615300
C	3. 79476100	5. 47568400	-0. 88925200
H	3. 59953900	5. 38056100	1. 25641700
H	3. 91919900	5. 24948800	-3. 03152900
H	3. 98428800	6. 54576200	-0. 90760500
O	-5. 22833900	0. 94499000	0. 05876400
Ru	-1. 70190500	0. 80119800	-0. 48757000

9/2TS

C	1. 49931100	-1. 43036900	0. 56550900
O	0. 50888800	-2. 10713000	0. 94088400
H	0. 02618200	1. 15049100	-0. 18133200
C	2. 08400000	-1. 36741400	-0. 80258700
C	3. 31680100	-0. 63727600	-0. 64902000
C	4. 64606700	-0. 42536600	-1. 32535200
H	4. 60617700	-0. 01590400	-2. 33685100
H	5. 20689200	-1. 37634400	-1. 35851800
C	4. 79649900	0. 45463600	0. 84603000
H	5. 40279200	-0. 23047100	1. 46496000
H	4. 85099900	1. 45296100	1. 28578000
C	3. 41179200	-0. 10903700	0. 66979600

C	2. 24328000	-0. 46199300	1. 42296700
Si	1. 56001200	-2. 44381500	-2. 26358600
C	1. 66897200	-4. 25571300	-1. 72008000
H	2. 70007600	-4. 53959900	-1. 47663100
H	1. 31390700	-4. 93209800	-2. 50749500
H	1. 05900200	-4. 42243600	-0. 82533300
C	2. 75904800	-2. 13039800	-3. 70012200
H	3. 79429100	-2. 38374400	-3. 44208300
H	2. 73818700	-1. 08434100	-4. 02904000
H	2. 47975500	-2. 74799100	-4. 56297300
C	-0. 19325800	-2. 06333400	-2. 86082600
H	-0. 28338000	-1. 02471400	-3. 19981700
H	-0. 94447300	-2. 23182700	-2. 08255600
H	-0. 44295500	-2. 71200100	-3. 71074500
Si	1. 82119800	-0. 16777400	3. 23449800
C	2. 07999500	-1. 78502400	4. 18558400
H	1. 78937300	-1. 68377300	5. 23875700
H	3. 12868200	-2. 10505700	4. 15851200
H	1. 47542400	-2. 58218400	3. 73899300
C	2. 95630400	1. 18094800	3. 93230600
H	2. 70988900	1. 38035100	4. 98278800
H	2. 85429800	2. 12624600	3. 38638900
H	4. 01204600	0. 88483900	3. 89875400
C	0. 01200600	0. 36963000	3. 38992500
H	-0. 30629200	0. 41024500	4. 43891900
H	-0. 62813100	-0. 34641800	2. 86264300
H	-0. 14334500	1. 36012100	2. 94650500
C	1. 72235200	1. 54098400	-2. 17814300
O	1. 76375700	1. 87164300	-3. 28501200
C	2. 02679000	2. 62256700	0. 35238800
O	2. 25375800	3. 64388300	0. 84470600
H	-0. 85225800	0. 83843200	-0. 39622300
C	-2. 79588800	-2. 60136400	1. 14971600
H	-2. 57962600	-2. 16285500	2. 13398400
H	-2. 55968800	-3. 67341300	1. 21329700
O	-1. 96758000	-2. 01645500	0. 14061300
H	-1. 00175300	-2. 14518600	0. 38865900
C	-2. 90913400	1. 25517200	0. 37831600
H	-2. 40126500	1. 36059200	1. 34433400
H	-3. 81813200	0. 66245000	0. 52794500
O	-2. 07041300	0. 48563100	-0. 52687100
H	-2. 09352400	-0. 50271600	-0. 25678200
C	-4. 25318700	-2. 40561900	0. 80076100

C	-5.18451800	-2.07567300	1.79276400
C	-4.69863200	-2.57666600	-0.51777600
C	-6.53820800	-1.93012400	1.47958800
H	-4.84909000	-1.93343600	2.81797900
C	-6.04869400	-2.42329300	-0.83310500
H	-3.97963000	-2.82240100	-1.29349900
C	-6.97309100	-2.10255700	0.16481800
H	-7.24886100	-1.67476400	2.26110400
H	-6.38076200	-2.55617600	-1.85944700
H	-8.02467600	-1.98478400	-0.08242800
C	-3.21747500	2.60319600	-0.21834600
C	-2.95132400	3.77421100	0.49884100
C	-3.79596700	2.69860600	-1.49188800
C	-3.26532000	5.02394100	-0.04078600
H	-2.49552400	3.70952900	1.48429200
C	-4.10170700	3.94504100	-2.03498700
H	-3.99506800	1.79251000	-2.05755600
C	-3.83997700	5.11096600	-1.30892600
H	-3.05299700	5.92589100	0.52659600
H	-4.54613700	4.00858700	-3.02456800
H	-4.08028400	6.08208400	-1.73310300
Ru	1.72801600	0.89252500	-0.38578600
O	5.31774200	0.52598000	-0.48764700

(PhCH₂OH)₂

H	1.87201200	3.27665600	0.55016800
C	-1.27254200	0.67951100	0.91770300
H	-1.43571700	1.26273800	1.84111900
H	-0.65135600	-0.18635100	1.20350600
O	-0.62673900	1.46556800	-0.06633200
C	2.85843100	1.87131300	-0.41216700
H	3.82036300	2.39373600	-0.32703400
H	2.42094600	2.11980500	-1.38951100
O	1.97356300	2.31473500	0.64133900
H	0.24835800	1.72924200	0.28661900
C	3.06644800	0.38343700	-0.29355500
C	2.03059100	-0.50310300	-0.62235500
C	4.28980800	-0.13247000	0.14647400
C	2.22075600	-1.87982300	-0.50956800
H	1.07143300	-0.10778800	-0.94777200
C	4.48352900	-1.51100700	0.25311500
H	5.09711500	0.54884000	0.40597500
C	3.44829500	-2.38684300	-0.07492500

H	1. 41145500	-2. 55813300	-0. 76636400
H	5. 44031400	-1. 89853200	0. 59288900
H	3. 59640800	-3. 46046000	0. 00663200
C	-2. 60951200	0. 18341100	0. 40752600
C	-3. 37787200	-0. 67847200	1. 20146300
C	-3. 10331300	0. 57223300	-0. 84054400
C	-4. 61580200	-1. 14154700	0. 75888100
H	-3. 00287400	-0. 98997500	2. 17521200
C	-4. 34355500	0. 10756000	-1. 28610700
H	-2. 50700900	1. 23747500	-1. 45485500
C	-5. 10410300	-0. 74885700	-0. 49027200
H	-5. 19901900	-1. 81006800	1. 38733200
H	-4. 71521800	0. 41764900	-2. 25982900
H	-6. 06875500	-1. 10932100	-0. 83816400
H₂			
H	0. 00000000	0. 00000000	0. 37139400
H	0. 00000000	0. 00000000	-0. 37139400