

Supporting Information

Insight into the Mechanism of Methane Synthesis from Syngas

on Ni(111) Surface: A Theoretical Study

Cuimei Zhi^{a,b} Qiang Wang^c Baojun Wang^{a,*} Debao Li^c Riguang Zhang^a

^a Key Laboratory of Coal Science and Technology of Ministry of Education and Shanxi Province, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China[□]

^b College of Chemistry and bioengineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030021, China

^c State Key Laboratory of Coal Conversion, Institute of Coal Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Taiyuan 030001, Shanxi, PR China

S1: Cartesian coordinates and total energies of reactants

S2: Cartesian coordinates, total energies and imaginary frequencies for transition state structures

Table **S1:** Cartesian coordinates and total energies of all the optimized structures involved in methane synthesis from syngas on Ni(111) surface.

Species C

Fcc site

Ni	0.110900000	0.055319998	0.209910005
Ni	0.000170000	0.166250005	0.104939997
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444220006	0.055369999	0.209920004
Ni	0.333570004	0.167280003	0.105240002
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.779940009	0.060090002	0.210099995
Ni	0.665939987	0.166240007	0.104939997
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000

* Corresponding author at: No. 79 Yingze West Street, Taiyuan 030024, China. Tel.: +86-351-6018239; Fax: +86-351-6041237. E-mail addresses: wangbaojun@tyut.edu.cn, quantumtyut@126.com (Baojun Wang)

Ni	0.106279999	0.386420012	0.210089996
Ni	0.000170000	0.500469983	0.104950003
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.440519989	0.381289989	0.216230005
Ni	0.334010005	0.500289977	0.105099998
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779919982	0.386420012	0.210089996
Ni	0.666140020	0.500270009	0.105120003
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.110909998	0.722109973	0.209920004
Ni	0.999059975	0.832809985	0.105250001
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.440539986	0.725820005	0.216179997
Ni	0.333559990	0.832880020	0.105240002
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.785049975	0.725799978	0.216199994
Ni	0.666149974	0.832449973	0.105109997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
C	0.555239975	0.610899985	0.265940011

Total energy (eV): -139.635170

Hcp site

Ni	0.111109845	0.055488575	0.209972784
Ni	0.000187735	0.166453809	0.105002113
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444423705	0.055480730	0.209973812
Ni	0.333685964	0.167343900	0.105231695
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.780159712	0.060278855	0.210169777
Ni	0.666298211	0.166451722	0.105001330
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.106379509	0.386484236	0.210167974
Ni	0.000184595	0.500327885	0.105003864
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.440734118	0.381450444	0.216088787
Ni	0.334114790	0.500349820	0.105167016
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.780142069	0.386488318	0.210167199
Ni	0.666279018	0.500355482	0.105172716
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111129835	0.722195148	0.209972277
Ni	0.999278128	0.832930863	0.105230592
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.440772623	0.725869477	0.216070578

Ni	0.333682239	0.832933247	0.105228290
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.785175741	0.725895941	0.216079950
Ni	0.666281223	0.832525134	0.105171323
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
C	0.555545270	0.611012518	0.265749514
Total energy (eV): -139.635266			

Species H

Fcc site

Ni	0.111100003	0.055470001	0.210519999
Ni	0.000170000	0.166490003	0.105130002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444420010	0.055459999	0.210510001
Ni	0.333429992	0.166840002	0.105630003
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.778649986	0.057250001	0.210339993
Ni	0.666339993	0.166490003	0.105130002
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.109379999	0.387989998	0.210339993
Ni	0.000180000	0.500320017	0.105130002
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.443659991	0.387290001	0.212099999
Ni	0.333389997	0.500010014	0.105300002
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.778659999	0.387980014	0.210329995
Ni	0.666639984	0.500010014	0.105300002
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111139998	0.722220004	0.210519999
Ni	0.999729991	0.833180010	0.105640002
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.443699986	0.722909987	0.212129995
Ni	0.333469987	0.833169997	0.105640002
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.779259980	0.722920001	0.212129995
Ni	0.666649997	0.833270013	0.105300002
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.555499971	0.610920012	0.259440005
Total energy (eV): -135.456546			

Hcp site

Ni	0.110119976	0.053567674	0.210307896
Ni	0.000082085	0.167197362	0.105454102

Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.445096850	0.055846021	0.210341886
Ni	0.333815634	0.167231187	0.105470940
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777393401	0.055809550	0.210316688
Ni	0.666664839	0.166653231	0.104981244
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.110427506	0.388516426	0.212487504
Ni	0.000075953	0.499518394	0.105459273
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.444661677	0.388583273	0.212525785
Ni	0.333313525	0.499980330	0.105167866
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.777402878	0.388195932	0.210328445
Ni	0.666073143	0.499511033	0.105472565
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.110121638	0.723156571	0.210311607
Ni	0.999989867	0.833310783	0.105049998
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.444644094	0.722648263	0.212531820
Ni	0.333812445	0.833220243	0.105477221
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.779700696	0.723150790	0.210326746
Ni	0.666072011	0.833195150	0.105479099
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.332924247	0.499702305	0.260175824

Total energy (eV): -135.446284

Species O

Ni	0.111479998	0.055369999	0.210020006
Ni	0.000450000	0.166219994	0.104690000
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443949997	0.055330001	0.210020006
Ni	0.333929986	0.167830005	0.105949998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.780539989	0.061009999	0.209519997
Ni	0.665790021	0.166209996	0.104690000
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.105719998	0.386180013	0.209509999
Ni	0.000440000	0.500869989	0.104690000
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.441269994	0.382420003	0.215409994
Ni	0.334719986	0.500689983	0.105209999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000

Ni	0.780499995	0.386200011	0.209509999
Ni	0.665979981	0.500689983	0.105200000
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111450002	0.722750008	0.210010007
Ni	0.998950005	0.832809985	0.105939999
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.441269994	0.725570023	0.215379998
Ni	0.333920002	0.832780004	0.105939999
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.784460008	0.725579977	0.215360001
Ni	0.665989995	0.831960022	0.105190001
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
O	0.555800021	0.611320019	0.271620005
Total energy (eV): -138.857673			

Species CO

Fcc site

Ni	0.111144125	0.055496436	0.210193470
Ni	0.000226549	0.166440219	0.105053425
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444334656	0.055702996	0.210197076
Ni	0.333903223	0.167804658	0.105654448
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.779192924	0.058394045	0.210004807
Ni	0.666220009	0.166436076	0.105052605
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.108214937	0.387430549	0.210017622
Ni	0.000231674	0.500448287	0.105060957
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.444785446	0.389856189	0.214808419
Ni	0.333990604	0.500282109	0.105121687
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779102743	0.387524754	0.210029751
Ni	0.666287184	0.500321388	0.105194688
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.110959478	0.722348452	0.210186064
Ni	0.998950958	0.832817972	0.105603196
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.444409639	0.722171605	0.214357555
Ni	0.333796352	0.832890272	0.105555885
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.776770711	0.721819580	0.214655355
Ni	0.666353047	0.832664967	0.105116986

Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
C	0.553834915	0.612231493	0.284118056
O	0.554149568	0.613529742	0.346696109
Total energy (eV): -148.284306			

Hcp site

Ni	0.109590001	0.052450001	0.210030004
Ni	0.000810000	0.168050006	0.105570003
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.445230007	0.055830002	0.210229993
Ni	0.333880007	0.167980000	0.105520003
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777409971	0.055920001	0.210240006
Ni	0.666670024	0.166659996	0.104960002
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.111170001	0.388810009	0.214540005
Ni	0.000800000	0.499379992	0.105559997
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.444620013	0.388689995	0.214379996
Ni	0.333319992	0.500000000	0.104860000
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.777490020	0.388069987	0.210260004
Ni	0.665369987	0.499430001	0.105530001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.109619997	0.723699987	0.210020006
Ni	0.000000000	0.833320022	0.104860000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.444480002	0.722090006	0.214410007
Ni	0.333900005	0.832579970	0.105520003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.780849993	0.723710001	0.210020006
Ni	0.665359974	0.832589984	0.105540000
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
C	0.333750010	0.499489993	0.283670008
O	0.334470004	0.500069976	0.346260011
Total energy (eV): -148.294480			

Species OH

Ni	0.111259997	0.055640001	0.210109994
Ni	0.000620000	0.166329995	0.104510002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444759995	0.055610001	0.210120007
Ni	0.334619999	0.169009998	0.106320001
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000

Ni	0.780430019	0.060460001	0.209140003
Ni	0.665899992	0.166280001	0.104510002
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.106569998	0.386590004	0.209160000
Ni	0.000630000	0.500980020	0.104500003
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.440019995	0.379579991	0.213890001
Ni	0.334919989	0.500779986	0.105410002
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.780439973	0.386599988	0.209089994
Ni	0.666100025	0.500729978	0.105319999
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111340001	0.722220004	0.210120007
Ni	0.997860014	0.832260013	0.106299996
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.440129995	0.726890028	0.213990003
Ni	0.334679991	0.832189977	0.106349997
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.787209988	0.726859987	0.213819996
Ni	0.666140020	0.832059979	0.105370000
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
O	0.556180000	0.610960007	0.281010002
H	0.557609975	0.610989988	0.332010001

Total energy (eV): -142.623358

Species H₂O

Ni	0.107019998	0.052499998	0.210150003
Ni	0.998799980	0.165979996	0.105080001
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443219990	0.052519999	0.209879994
Ni	0.333169997	0.168430001	0.106579997
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.775650024	0.054340001	0.210639998
Ni	0.665300012	0.165959999	0.104910001
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.107050002	0.387580007	0.210130006
Ni	0.998989999	0.499540001	0.104730003
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.442279994	0.387580007	0.217030004
Ni	0.333139986	0.497900009	0.106530003
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.777970016	0.387349993	0.209670007
Ni	0.663110018	0.498100013	0.106210001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000

Ni	0.109389998	0.721140027	0.210270002
Ni	0.998969972	0.832570016	0.104750000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.443170011	0.723710001	0.209830001
Ni	0.331609994	0.832390010	0.104640000
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.777869999	0.723439991	0.209710002
Ni	0.665329993	0.832440019	0.104929999
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
O	0.461080015	0.398160011	0.331030011
H	0.539489985	0.546720028	0.340750009
H	0.556819975	0.347499996	0.340759993
Total energy (eV): -146.150949			

Species CH

Fcc site

Ni	0.111040205	0.055223759	0.210328951
Ni	0.000124340	0.166519359	0.105243690
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443987727	0.055483431	0.210296854
Ni	0.333176076	0.166476890	0.105324395
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.779502451	0.059115887	0.210569590
Ni	0.666360140	0.166510567	0.105250120
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.107424118	0.387056738	0.210567445
Ni	0.000132770	0.500280082	0.105245307
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.443356484	0.387187958	0.215741366
Ni	0.334154397	0.500405908	0.105304442
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779477835	0.387106299	0.210566774
Ni	0.666200399	0.500445664	0.105408207
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.110914916	0.722547770	0.210311323
Ni	0.999961913	0.833337545	0.105368473
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.443128914	0.723284781	0.215484366
Ni	0.333096057	0.833494961	0.105275981
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.778687358	0.722779334	0.215953380
Ni	0.666221678	0.832457423	0.105359934
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000

H	0.552223742	0.611146092	0.333072186
C	0.554027498	0.611088693	0.275247246

Total energy (eV): -144.089805

Hcp site

Ni	0.109250002	0.052700002	0.210329995
Ni	0.000180000	0.167469993	0.105480000
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444750011	0.056490000	0.210690007
Ni	0.333490014	0.167659998	0.105499998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777310014	0.056170002	0.210710004
Ni	0.666559994	0.166800007	0.105200000
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.107019998	0.387519985	0.214340001
Ni	0.000080000	0.499940008	0.105480000
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.445569992	0.387870014	0.214540005
Ni	0.333169997	0.500199974	0.103529997
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.776950002	0.388630003	0.210710004
Ni	0.665719986	0.499879986	0.105509996
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.109159999	0.724229991	0.210350007
Ni	0.999830008	0.833519995	0.105109997
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.445899993	0.726369977	0.214340001
Ni	0.333409995	0.833310008	0.105460003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.780719995	0.724150002	0.210350007
Ni	0.665929973	0.833199978	0.105480000
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.331970006	0.501619995	0.330790013
C	0.332639992	0.501070023	0.272949994

Total energy (eV): -144.066491

Species CH₂

Ni	0.108570002	0.056000002	0.210179999
Ni	0.998629987	0.166280001	0.104759999
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.441219985	0.058529999	0.210260004
Ni	0.331719995	0.166419998	0.105269998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777880013	0.060619999	0.209869996

Ni	0.664399981	0.166270003	0.104920000
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.103979997	0.386700004	0.210020006
Ni	0.998529971	0.500280023	0.104939997
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.440200001	0.389739990	0.214729995
Ni	0.333039999	0.500079989	0.105329998
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.776920021	0.387569994	0.209729999
Ni	0.664569974	0.500460029	0.105219997
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.105999999	0.723070025	0.210219994
Ni	0.998799980	0.833310008	0.105219997
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.438930005	0.725430012	0.214919999
Ni	0.332650006	0.832090020	0.106600001
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.775680006	0.724500000	0.214440003
Ni	0.665000021	0.832019985	0.105209999
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.477789998	0.698170006	0.303680003
H	0.601530015	0.560530007	0.329730004
C	0.557160020	0.609799981	0.281399995

Total energy (eV): -147.685028

Species CH₃

Ni	0.106710002	0.053479999	0.209020004
Ni	0.000020000	0.167559996	0.104500003
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443870008	0.054180000	0.213170007
Ni	0.334080011	0.167180002	0.105310000
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.779609978	0.053360000	0.209059998
Ni	0.665830016	0.167190000	0.105099998
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.111089997	0.388850003	0.210030004
Ni	0.998669982	0.499509990	0.105899997
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.444180012	0.389679998	0.213450000
Ni	0.333909988	0.499100000	0.106090002
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.778959990	0.389140010	0.212970003
Ni	0.665960014	0.498890013	0.105209999

Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.110969998	0.722239971	0.209999993
Ni	0.000090000	0.832819998	0.104510002
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.444299996	0.722060025	0.210079998
Ni	0.333719999	0.834720016	0.105999999
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.779649973	0.726320028	0.209040001
Ni	0.665359974	0.832859993	0.104489997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.473610014	0.117399998	0.316320002
H	0.715879977	0.353859991	0.316630006
H	0.479299992	0.359530002	0.316469997
C	0.556559980	0.277190000	0.293599993
Total energy (eV): -151.678907			

Species CH₄

Ni	0.110760003	0.055220000	0.210339993
Ni	0.000050000	0.166679993	0.105180003
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444519997	0.055280000	0.210339993
Ni	0.333389997	0.166759998	0.105219997
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777769983	0.055550002	0.210480005
Ni	0.666649997	0.166690007	0.105190001
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.110760003	0.388830006	0.210339993
Ni	0.000040000	0.500050008	0.105159998
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.444420010	0.388889998	0.210630000
Ni	0.333380014	0.499969989	0.105209999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.778060019	0.388839990	0.210360005
Ni	0.666580021	0.499949992	0.105219997
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111110002	0.722209990	0.210470006
Ni	0.000030000	0.833310008	0.105149999
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.444530010	0.722609997	0.210339993
Ni	0.333279997	0.833289981	0.105159998
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.778079987	0.722530007	0.210350007
Ni	0.666649997	0.833280027	0.105190001
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000

H	0.384270012	0.222550005	0.406529993
H	0.384130001	0.392670006	0.340259999
H	0.384140015	0.455089986	0.430949986
H	0.610989988	0.470079988	0.392500013
C	0.441379994	0.385010004	0.392969996
Total energy (eV): -155.637775			

Species HCO

Fcc site

Ni	0.117185779	0.060642853	0.209794328
Ni	0.000417294	0.165802076	0.104567982
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.446146846	0.056858417	0.209923044
Ni	0.335131228	0.168329507	0.105117172
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.779079974	0.059170000	0.209110007
Ni	0.666639984	0.166800007	0.104699999
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.106749997	0.386940002	0.208989993
Ni	0.000420000	0.501450002	0.104570001
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.442710012	0.393339992	0.215090007
Ni	0.335240006	0.501039982	0.104649998
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779070020	0.387160003	0.209189996
Ni	0.666679978	0.501900017	0.105530001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.116930000	0.723710001	0.209769994
Ni	0.998650014	0.832809985	0.106440000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.442409992	0.717190027	0.214729995
Ni	0.334980011	0.833850026	0.105070002
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.790579975	0.729070008	0.215220004
Ni	0.666630030	0.831749976	0.105350003
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.384600013	0.528199971	0.336820006
C	0.497799993	0.584349990	0.292970002
O	0.690190017	0.680249989	0.311239988
Total energy (eV): -150.996109			

Hcp site

Ni	0.106008925	0.048429117	0.209843621
Ni	0.999178231	0.163597405	0.104718842
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443246484	0.048611894	0.209417760
Ni	0.333886713	0.166398838	0.106179528
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777145207	0.051340632	0.210404485
Ni	0.667042196	0.165068254	0.105667062
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.105770759	0.383361310	0.209735826
Ni	0.997961521	0.496211827	0.104677841
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.433829159	0.380289495	0.215853944
Ni	0.333576143	0.495433778	0.106063463
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779047847	0.389391512	0.215008900
Ni	0.665540159	0.496947110	0.105094045
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.114415251	0.720129371	0.208784863
Ni	0.998077869	0.829718649	0.104706004
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.443206459	0.720777988	0.209358439
Ni	0.333252728	0.830683589	0.104256675
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.779445946	0.715492129	0.215206191
Ni	0.667258620	0.829580367	0.105673663
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.843197763	0.581996024	0.336602658
C	0.729132771	0.526933849	0.293051481
O	0.536915600	0.432647556	0.311605871

Total energy (eV): -151.003333

Species COH

Fcc site

Ni	0.111409999	0.054450002	0.210470006
Ni	0.000440000	0.165910006	0.105109997
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444440007	0.054219998	0.210419998
Ni	0.333350003	0.165830001	0.105350003
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.780059993	0.058630001	0.210339993

Ni	0.666320026	0.165979996	0.105149999
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.108050004	0.386480004	0.210179999
Ni	0.000320000	0.499940008	0.105149999
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.443659991	0.386009991	0.214560002
Ni	0.334069997	0.499909997	0.104889996
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779839993	0.386519998	0.210219994
Ni	0.666729987	0.500029981	0.104879998
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111649998	0.721469998	0.210380003
Ni	0.999620020	0.832440019	0.105669998
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.445930004	0.722019970	0.215650007
Ni	0.333739996	0.832239985	0.105599999
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.778219998	0.722490013	0.215739995
Ni	0.666580021	0.832300007	0.105070002
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.472530007	0.469639987	0.366380006
C	0.553460002	0.603910029	0.276939988
O	0.555339992	0.609350026	0.347079992

Total energy (eV): -151.250318

Hcp site

Ni	0.110799998	0.054520000	0.210720003
Ni	0.999870002	0.165720001	0.105240002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.442429990	0.050239999	0.210060000
Ni	0.333519995	0.166219994	0.105319999
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.778339982	0.054420002	0.210679993
Ni	0.666819990	0.166329995	0.105339997
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.110789999	0.386779994	0.210590005
Ni	0.998929977	0.498659998	0.105520003
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.442750007	0.385589987	0.214289993
Ni	0.334060013	0.498439997	0.105599999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.777989984	0.385699987	0.214359999
Ni	0.666779995	0.499150008	0.103639998
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000

Ni	0.114560001	0.722509980	0.210290000
Ni	0.998690009	0.831690013	0.105710000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.442909986	0.722360015	0.210319996
Ni	0.333209991	0.831910014	0.104939997
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.779030025	0.722490013	0.215289995
Ni	0.667280018	0.831520021	0.105760001
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.582769990	0.356680006	0.363279998
C	0.666649997	0.499779999	0.275629997
O	0.666069984	0.498580009	0.345759988

Total energy (eV): -151.252017

Species CH₂O

Fcc site

Ni	0.112010002	0.055240002	0.210339993
Ni	0.000840000	0.166400000	0.104620002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.445349991	0.054000001	0.209629998
Ni	0.334910005	0.170149997	0.106830001
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.780900002	0.056669999	0.209020004
Ni	0.666050017	0.165309995	0.104249999
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.110760003	0.386720002	0.209059998
Ni	0.001620000	0.500959992	0.104259998
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.447629988	0.385850012	0.215509996
Ni	0.336039990	0.501359999	0.105549999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.783550024	0.383569986	0.208330005
Ni	0.666530013	0.500240028	0.105460003
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.113569997	0.721859992	0.209619999
Ni	0.996969998	0.832120001	0.106799997
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.441619992	0.726849973	0.214450002
Ni	0.333739996	0.833400011	0.104429998
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.781729996	0.719259977	0.215240002
Ni	0.665939987	0.831080019	0.105449997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000

H	0.343730003	0.584410012	0.337689996
H	0.593200028	0.830179989	0.337080002
C	0.493580014	0.680220008	0.311379999
O	0.595520020	0.573530018	0.295349985
Total energy (eV): -154.595915			

Hcp site

Ni	0.109789997	0.054380000	0.209330007
Ni	0.001360000	0.169180006	0.105060004
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444959998	0.057440002	0.210280001
Ni	0.336100012	0.171279997	0.106640004
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777310014	0.057270002	0.209710002
Ni	0.667259991	0.167840004	0.104659997
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.100749999	0.385989994	0.214990005
Ni	0.000970000	0.500400007	0.104999997
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.444189996	0.391030014	0.215780005
Ni	0.332470000	0.500370026	0.105499998
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.776340008	0.389010012	0.209849998
Ni	0.664550006	0.499890000	0.105729997
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.109630004	0.724609971	0.209199995
Ni	0.001710000	0.834990025	0.103890002
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.446520001	0.724740028	0.214709997
Ni	0.336189985	0.833419979	0.106440000
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.786029994	0.727739990	0.208370000
Ni	0.665239990	0.833490014	0.105370000
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.148809999	0.298810005	0.338559985
H	0.158960000	0.551199973	0.335990012
C	0.206619993	0.447959989	0.311379999
O	0.415320009	0.545469999	0.295859993
Total energy (eV): -154.585065			

Species CH₃O

Ni	0.111139998	0.055130001	0.210109994
Ni	0.000380000	0.165950000	0.104520001

Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444709986	0.054760002	0.210069999
Ni	0.334340006	0.168410003	0.106219999
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.780319989	0.059880000	0.209140003
Ni	0.665740013	0.165920004	0.104460001
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.106380001	0.385960013	0.209030002
Ni	0.000520000	0.500769973	0.104450002
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.440800011	0.380140007	0.212909997
Ni	0.334470004	0.500419974	0.105180003
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.780610025	0.385679990	0.208820000
Ni	0.666109979	0.500490010	0.105070002
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111479998	0.721610010	0.210089996
Ni	0.997870028	0.832029998	0.106279999
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.440730006	0.725210011	0.213960007
Ni	0.334679991	0.831849992	0.106399998
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.786159992	0.725489974	0.213259995
Ni	0.666029990	0.831870019	0.105279997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.644339979	0.519029975	0.372280002
H	0.640709996	0.757669985	0.377609998
H	0.401300013	0.514190018	0.376349986
C	0.560959995	0.599319994	0.356480002
O	0.557030022	0.607890010	0.281140000

Total energy (eV): -158.789371

Species HCOH

Ni	0.119252205	0.062663749	0.216864094
Ni	0.001556178	0.167489767	0.105201475
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.447041124	0.056169827	0.209408417
Ni	0.330831230	0.165479645	0.104351990
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.774918795	0.054636102	0.208427742
Ni	0.667434931	0.168125048	0.104235843
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.120999567	0.392439425	0.216121241
Ni	0.000466820	0.499767721	0.105767637

Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.448190153	0.393168271	0.207694396
Ni	0.330546290	0.499574542	0.104167171
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779638469	0.390564740	0.209926367
Ni	0.667493880	0.500855923	0.104328744
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.112709872	0.724009633	0.210704818
Ni	0.001195536	0.835528195	0.106080607
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.446884871	0.726523101	0.209412649
Ni	0.331548959	0.833160996	0.104562320
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.780967116	0.724797726	0.209964812
Ni	0.667510152	0.833102822	0.104235299
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.471883953	0.364249349	0.322961211
H	0.040561069	0.211588174	0.320795983
C	0.186441571	0.257743865	0.292122215
O	0.333842725	0.321821213	0.343330026

Total energy (eV): -154.425573

Species CH₂OH

Ni	0.109389998	0.054380000	0.210189998
Ni	0.000480000	0.166669995	0.104680002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444620013	0.053860001	0.209810004
Ni	0.334840000	0.170080006	0.106720001
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.778659999	0.056000002	0.209790006
Ni	0.666719973	0.166669995	0.104709998
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.110710002	0.388709992	0.209470004
Ni	0.001110000	0.501129985	0.104249999
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.446029991	0.388209999	0.215859994
Ni	0.335460007	0.499229997	0.105489999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.782019973	0.386929989	0.208660007
Ni	0.666960001	0.501860023	0.106190003
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111340001	0.722429991	0.209629998
Ni	0.997500002	0.832700014	0.106009997
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000

Ni	0.442369998	0.725989997	0.207949996
Ni	0.332780004	0.834299982	0.104079999
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.774649978	0.720730007	0.218590006
Ni	0.668730021	0.832189977	0.105329998
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.819620013	0.627460003	0.340510011
H	0.695089996	0.782720029	0.342709988
H	0.396070004	0.498730004	0.332219988
C	0.701770008	0.654990017	0.316560000
O	0.504599988	0.463620007	0.324039996
Total energy (eV): -158.115681			

Species CH₃OH

Ni	0.113190003	0.049729999	0.210350007
Ni	0.003100000	0.163589999	0.105300002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.448509991	0.048439998	0.209649995
Ni	0.337489992	0.165999994	0.106459998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.781359971	0.050799999	0.210679993
Ni	0.669610023	0.163399994	0.104860000
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.114079997	0.384620011	0.210079998
Ni	0.003510000	0.497350007	0.104780003
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.450080007	0.383650005	0.217209995
Ni	0.337559998	0.495829999	0.106270000
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.784290016	0.384149998	0.209120005
Ni	0.667379975	0.495689988	0.105939999
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.115189999	0.717840016	0.210419998
Ni	0.003370000	0.830510020	0.105049998
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.448410004	0.719389975	0.210060000
Ni	0.335970014	0.830079973	0.104730003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.783320010	0.720369995	0.209619999
Ni	0.669539988	0.830160022	0.105030000
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.777090013	0.526899993	0.352970004
H	0.627229989	0.250569999	0.357369989
H	0.605620027	0.403409988	0.426640004

H	0.449169993	0.511110008	0.341639996
C	0.628139973	0.394600004	0.369919986
O	0.456519991	0.386830002	0.331440002
Total energy (eV): -162.202297			

Table S2: Cartesian coordinates, total energies and imaginary frequencies for transition state structures involved in methane synthesis from syngas on Ni(111) surface.

TS1

Ni	0.114349999	0.057590000	0.211700007
Ni	0.001250000	0.166250005	0.105350003
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.445309997	0.057480000	0.210969999
Ni	0.334740013	0.168380007	0.105970003
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.781799972	0.061260000	0.210569993
Ni	0.666670024	0.166189998	0.105319999
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.109260000	0.388579994	0.210449994
Ni	0.000790000	0.500339985	0.105219997
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.441170007	0.386759996	0.218189999
Ni	0.335420012	0.500750005	0.105570003
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.780080020	0.388399988	0.210089996
Ni	0.666429996	0.500599980	0.105700001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.113289997	0.722530007	0.210370004
Ni	0.000160000	0.833180010	0.106059998
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.449389994	0.728489995	0.213870004
Ni	0.333990008	0.833369970	0.105389997
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.783550024	0.727379978	0.215340003
Ni	0.667750001	0.833159983	0.104419999
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.391009986	0.374790013	0.305889994
C	0.570010006	0.633170009	0.278169990
O	0.511560023	0.553680003	0.338730007

Total energy (eV): -150.234740

Imaginary frequency (cm⁻¹): 1559*i*

TS2

Ni	0.111080900	0.055105463	0.209738225
Ni	0.998248458	0.164221331	0.104680553
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.442344248	0.052159511	0.210080191
Ni	0.332338691	0.166661486	0.105338871

Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.775905550	0.057106696	0.209312081
Ni	0.664071858	0.164694518	0.104586206
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.101872474	0.384124875	0.208909079
Ni	0.998266101	0.499597967	0.104482695
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.439226747	0.384261191	0.214851201
Ni	0.331933051	0.499085605	0.104829416
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.775775015	0.384176284	0.209151149
Ni	0.663542151	0.499864012	0.106010333
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.112431481	0.720421672	0.210043088
Ni	0.994873703	0.829856873	0.106506959
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.439764291	0.716055155	0.214591950
Ni	0.331535310	0.831839144	0.105167896
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.784667850	0.725287378	0.216089159
Ni	0.663098633	0.829708695	0.105596542
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.409670889	0.447414786	0.309636861
C	0.535172403	0.603746295	0.285800338
O	0.698590636	0.712441087	0.320806086

Total energy (eV): -150.794015

Imaginary frequency (cm⁻¹): 303i

TS3

Ni	0.103519998	0.050620001	0.210109994
Ni	0.999459982	0.170839995	0.107029997
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.439500004	0.056740001	0.217999995
Ni	0.327850014	0.160260007	0.101480000
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.775439978	0.058169998	0.211830005
Ni	0.663689971	0.169560000	0.108220004
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.112410001	0.388399988	0.220719993
Ni	0.998199999	0.497869998	0.109660000
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.448350012	0.382669985	0.197909996
Ni	0.330080003	0.502900004	0.102689996
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.775250018	0.393519998	0.218740001

Ni	0.672599971	0.505029976	0.101620004
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.108159997	0.724740028	0.212050006
Ni	0.999689996	0.833220005	0.105310000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.445149988	0.721459985	0.220369995
Ni	0.334879994	0.834559977	0.109449998
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.781949997	0.729309976	0.210229993
Ni	0.662419975	0.833790004	0.107009999
Ni	0.888679981	0.944660008	0.001129985
C	0.356339991	0.479609996	0.268440008
O	0.501179993	0.340649992	0.287999988

Total energy (eV): -144.550423

Imaginary frequency (cm⁻¹): 537i

TS4

Ni	0.105099998	0.048650000	0.209419996
Ni	0.000930000	0.167469993	0.105430000
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443250000	0.049210001	0.209639996
Ni	0.333370000	0.164739996	0.105269998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.779959977	0.062849998	0.210309997
Ni	0.667209983	0.168300003	0.105439998
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.106430002	0.388090014	0.212610006
Ni	0.997680008	0.497770011	0.106409997
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.428970009	0.368019998	0.214220002
Ni	0.333790004	0.500230014	0.105319999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.773150027	0.392520010	0.216509998
Ni	0.664879978	0.499139994	0.104269996
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111860000	0.724420011	0.209670007
Ni	0.999849975	0.832140028	0.103739999
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.448069990	0.726249993	0.216729999
Ni	0.334729999	0.830780029	0.106160000
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.783510029	0.728850007	0.212170005
Ni	0.666180015	0.833970010	0.105559997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.675620019	0.513509989	0.333330005

C	0.657350004	0.520099998	0.276380002
O	0.422529995	0.539870024	0.284640014

Total energy (eV): -149.834977
Imaginary frequency (cm⁻¹): 515*i*

TS5

Ni	0.108029999	0.059599999	0.215299994
Ni	0.003080000	0.171049997	0.105449997
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.450780004	0.063040003	0.211400002
Ni	0.333400011	0.168850005	0.105190001
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.776009977	0.057969999	0.209889993
Ni	0.668940008	0.170839995	0.105099998
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.120999999	0.389889985	0.217529997
Ni	0.003300000	0.502340019	0.106579997
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.457399994	0.402069986	0.210449994
Ni	0.333700001	0.502659976	0.105449997
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.784020007	0.393779993	0.211390004
Ni	0.669330001	0.503390014	0.105159998
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.116039999	0.726670027	0.210789993
Ni	0.003870000	0.837320030	0.105700001
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.448350012	0.731100023	0.210250005
Ni	0.335189998	0.837010026	0.105120003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.784749985	0.729470015	0.210419998
Ni	0.669290006	0.836120009	0.105020002
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.059230000	0.230800003	0.332269996
H	0.471590012	0.252570003	0.276410013
C	0.177560002	0.241870001	0.294200003
O	0.350719988	0.285010010	0.325760007

Total energy (eV): -153.850959
Imaginary frequency (cm⁻¹): 1296*i*

TS6

Ni	0.110780001	0.051430002	0.210079998
Ni	0.999310017	0.163479999	0.104809999
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.442539990	0.049770001	0.210060000

Ni	0.331970006	0.162949994	0.104599997
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.778020024	0.055950001	0.209270000
Ni	0.665319979	0.163839996	0.104780003
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.108400002	0.383810014	0.209969997
Ni	0.999140024	0.497649997	0.104790002
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.438089997	0.377299994	0.208969995
Ni	0.333829999	0.499779999	0.105339997
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.776669979	0.383210003	0.209840000
Ni	0.667020023	0.500689983	0.106040001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111500002	0.716759980	0.210189998
Ni	0.995289981	0.828360021	0.106859997
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.442050010	0.714060009	0.216820002
Ni	0.333339989	0.829240024	0.105700001
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.774020016	0.716400027	0.218439996
Ni	0.665229976	0.829370022	0.105850004
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.503139973	0.814379990	0.339179993
H	0.399749994	0.530560017	0.333570004
C	0.519219995	0.686990023	0.315959990
O	0.712899983	0.719820023	0.312669992

Total energy (eV): -154.302022

Imaginary frequency (cm⁻¹): 111i

TS7

Ni	0.114349999	0.054620001	0.210449994
Ni	0.001150000	0.164790004	0.105379999
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.449829996	0.060120001	0.209920004
Ni	0.334039986	0.164560005	0.104440004
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.782540023	0.055810001	0.210229993
Ni	0.669030011	0.165560007	0.105020002
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.113920003	0.384660006	0.214430004
Ni	0.002950000	0.499639988	0.104750000
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.449589998	0.383819997	0.208930001
Ni	0.334879994	0.500349998	0.105860002

Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.778880000	0.387100011	0.210240006
Ni	0.669110000	0.499630004	0.104769997
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.115920000	0.725520015	0.214129999
Ni	0.001010000	0.832369983	0.105169997
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.450619996	0.721710026	0.220269993
Ni	0.335750014	0.830399990	0.106389999
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.782989979	0.721400023	0.209950000
Ni	0.664860010	0.830540001	0.106550001
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.463479996	0.592180014	0.334320009
H	0.122239999	0.569040000	0.332879990
C	0.185990006	0.589969993	0.279680014
O	0.455779999	0.715030015	0.321190000

Total energy (eV): -153.634830

Imaginary frequency (cm⁻¹): 302i

TS8

Ni	0.996280015	0.993950009	0.210749999
Ni	0.219420001	0.104999997	0.103710003
Ni	0.111110002	0.222220004	0.000000000
Ni	0.329270005	0.997049987	0.209610000
Ni	0.553919971	0.107869998	0.105060004
Ni	0.444440007	0.222220004	0.000000000
Ni	0.668060005	0.002720000	0.209380001
Ni	0.888650000	0.107660003	0.104680002
Ni	0.777779996	0.222220004	0.000000000
Ni	0.993870020	0.325729996	0.210219994
Ni	0.221110001	0.441980004	0.104180001
Ni	0.111110002	0.555559993	0.000000000
Ni	0.326150000	0.319409996	0.206829995
Ni	0.556800008	0.444950014	0.105980001
Ni	0.444440007	0.555559993	0.000000000
Ni	0.663020015	0.330659986	0.210690007
Ni	0.887750030	0.441130012	0.105319999
Ni	0.777779996	0.555559993	0.000000000
Ni	0.992039979	0.660820007	0.211590007
Ni	0.220019996	0.772310019	0.105750002
Ni	0.111110002	0.888890028	0.000000000
Ni	0.325269997	0.657220006	0.214049995
Ni	0.553049982	0.772650003	0.106059998
Ni	0.444440007	0.888890028	0.000000000

Ni	0.654269993	0.667190015	0.221200004
Ni	0.884440005	0.771539986	0.107129999
Ni	0.777779996	0.888890028	0.000000000
H	0.411680013	0.405510008	0.327190012
H	0.524240017	0.827300012	0.328330010
H	0.248280004	0.634450018	0.288500011
C	0.469969988	0.680019975	0.300150007
O	0.447600007	0.537289977	0.350259990

Total energy (eV): -157.494167

Imaginary frequency (cm⁻¹): 841*i*

TS9

Ni	0.128470004	0.070880003	0.221230000
Ni	0.009590030	0.172419995	0.105800003
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.460740000	0.063220002	0.210219994
Ni	0.340820014	0.172240004	0.106909998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.788089991	0.064989999	0.211860001
Ni	0.675750017	0.172610000	0.105269998
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.114210002	0.401410013	0.213369995
Ni	0.009960055	0.507420003	0.105439998
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.467489988	0.403409988	0.211239994
Ni	0.340660006	0.505890012	0.105180003
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.791109979	0.400290012	0.208939999
Ni	0.675960004	0.506690025	0.103890002
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.125159994	0.738189995	0.209710002
Ni	0.010259986	0.843249977	0.106619999
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.461620003	0.730679989	0.217759997
Ni	0.343270004	0.838169992	0.106080003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.796400011	0.733910024	0.211160004
Ni	0.673629999	0.839250028	0.106710002
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.386599988	0.638000011	0.316190004
H	0.483830005	0.466600001	0.333759993
C	0.432579994	0.530910015	0.291280001
O	0.145600006	0.261040002	0.286859989

Total energy (eV): -153.186681

Imaginary frequency (cm⁻¹): 374*i*

TS10

Ni	0.109600000	0.051520001	0.210390002
Ni	0.002279997	0.167170003	0.105319999
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.446680009	0.052730002	0.210199997
Ni	0.336459994	0.169389993	0.106859997
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.780759990	0.055810001	0.210189998
Ni	0.667779982	0.165340006	0.104829997
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.116109997	0.391140014	0.211750001
Ni	0.002359986	0.499859989	0.104680002
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.448599994	0.386330009	0.215859994
Ni	0.336879998	0.499049991	0.105230004
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.784049988	0.385259986	0.209030002
Ni	0.668519974	0.500079989	0.105700001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111500002	0.722570002	0.210010007
Ni	0.999029994	0.832140028	0.105870001
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.441509992	0.724200010	0.209779993
Ni	0.333959997	0.833570004	0.104039997
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.776300013	0.717610002	0.217850000
Ni	0.669170022	0.831099987	0.105980001
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.350989997	0.520919979	0.273620009
H	0.691470027	0.778590024	0.337940007
H	0.784889996	0.591319978	0.338580012
C	0.677060008	0.635710001	0.315600008
O	0.476630002	0.470640004	0.315100014

Total energy (eV): -157.362722

Imaginary frequency (cm⁻¹): 1195*i*

TS11

Ni	0.115440004	0.056159999	0.208910003
Ni	0.003219962	0.167050004	0.104429998
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.448729992	0.054570001	0.210140005
Ni	0.337579995	0.168950006	0.105710000
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.784979999	0.060529999	0.210160002
Ni	0.668240011	0.165859997	0.104539998

Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.111319996	0.387360007	0.208869994
Ni	0.003839970	0.500999987	0.103780001
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.448159993	0.386689991	0.219640002
Ni	0.338519990	0.499009997	0.106370002
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.788540006	0.388159990	0.208159998
Ni	0.667379975	0.499520004	0.106210001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.116889998	0.722360015	0.209490001
Ni	0.001230001	0.832369983	0.105729997
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.451240003	0.725600004	0.212770000
Ni	0.336569995	0.833029985	0.105329998
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.788190007	0.728150010	0.213510007
Ni	0.669040024	0.832260013	0.105230004
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.723599970	0.678160012	0.310229987
H	0.482470006	0.664520025	0.326240003
H	0.324000001	0.302199990	0.337060004
C	0.567839980	0.630270004	0.286379993
O	0.463349998	0.346679986	0.319370002

Total energy (eV): -157.262695

Imaginary frequency (cm⁻¹): 398i

TS12

Ni	0.109030001	0.048260000	0.208460003
Ni	0.002570000	0.165110007	0.104160003
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.445560008	0.047669999	0.214900002
Ni	0.337819993	0.166690007	0.106059998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.783800006	0.048500001	0.208360001
Ni	0.667649984	0.164210007	0.105740003
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.111639999	0.384920001	0.209059998
Ni	0.998260021	0.496190012	0.106459998
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.440869987	0.390040010	0.214739993
Ni	0.335310012	0.497579992	0.104249999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.784009993	0.384950012	0.214660004
Ni	0.666729987	0.495020002	0.105460003

Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.112620004	0.718930006	0.210089996
Ni	0.002160000	0.830449998	0.104050003
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.446379989	0.717580020	0.210979998
Ni	0.336950004	0.834280014	0.106969997
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.784569979	0.723010004	0.208509997
Ni	0.666589975	0.829209983	0.104440004
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.340009987	0.246500000	0.345169991
H	0.595239997	0.478909999	0.354149997
H	0.439559996	0.500630021	0.281809986
C	0.489980012	0.349620014	0.320169985
O	0.585060000	0.246050000	0.293260008

Total energy (eV): -157.762563

Imaginary frequency (cm⁻¹): 938*i*

TS13

Ni	0.116810001	0.061170001	0.210010007
Ni	0.001330000	0.166879997	0.104400001
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444599986	0.061310001	0.210050002
Ni	0.336829990	0.173529997	0.106830001
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.781589985	0.062969998	0.208440006
Ni	0.665719986	0.166850001	0.104400001
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.106619999	0.386790007	0.209299996
Ni	0.000880000	0.501590014	0.104589999
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.445179999	0.391130000	0.233830005
Ni	0.336369991	0.500790000	0.106380001
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.780229986	0.386770010	0.209289998
Ni	0.664460003	0.500699997	0.106360003
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.112300001	0.724129975	0.209580004
Ni	0.001870000	0.835120022	0.105030000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.438919991	0.731320024	0.210930005
Ni	0.333559990	0.835080028	0.105070002
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.792850018	0.731109977	0.210850000
Ni	0.666790009	0.833289981	0.103830002

Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.566489995	0.373629987	0.357050002
H	0.536029994	0.594089985	0.379319996
H	0.305339992	0.351350009	0.355830014
C	0.473859996	0.447409987	0.351280004
O	0.578859985	0.656599998	0.272109985

Total energy (eV): -157.263054

Imaginary frequency (cm⁻¹): 377i

TS14

Ni	0.107299998	0.048680000	0.210120007
Ni	0.000060000	0.164220005	0.104900002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443509996	0.048549999	0.209690005
Ni	0.334120005	0.166759998	0.106660001
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777549982	0.052960001	0.210219994
Ni	0.665889978	0.164100006	0.104800001
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.107060000	0.384710014	0.209639996
Ni	0.999700010	0.497669995	0.104690000
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.442360014	0.379949987	0.217490003
Ni	0.334089994	0.496430010	0.105999999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.779529989	0.384510010	0.209399998
Ni	0.663640022	0.496140003	0.105959997
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.109729998	0.718249977	0.209830001
Ni	0.999509990	0.830649972	0.104750000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.446610004	0.721949995	0.211019993
Ni	0.332280010	0.830420017	0.104640000
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.776109993	0.721140027	0.211030006
Ni	0.665889978	0.830330014	0.104769997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.575380027	0.254000008	0.353839993
H	0.741729975	0.528550029	0.358310014
H	0.527499974	0.402249992	0.417789996
H	0.559580028	0.616739988	0.269419998
C	0.579540014	0.401939988	0.363579988
O	0.445199996	0.429369986	0.317149997

Total energy (eV): -161.351526

Imaginary frequency (cm⁻¹): 934i

TS15

Ni	0.106579997	0.052040000	0.210649997
Ni	0.999199986	0.166740000	0.105240002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.441009998	0.051800001	0.210940003
Ni	0.332540005	0.167760000	0.105850004
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.776859999	0.058260001	0.210370004
Ni	0.664820015	0.166879997	0.105290003
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.103869997	0.386449993	0.210460007
Ni	0.999010026	0.500649989	0.105130002
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.438780010	0.381150007	0.215379998
Ni	0.333220005	0.500670016	0.105149999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.778580010	0.386909992	0.210460007
Ni	0.665459991	0.501240015	0.104910001
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.108450003	0.721669972	0.210529998
Ni	0.999350011	0.834230006	0.105430000
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.440420002	0.720679998	0.214699998
Ni	0.332239985	0.834619999	0.105509996
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.775820017	0.722809970	0.214890003
Ni	0.664839983	0.832690001	0.105169997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.561670005	0.634559989	0.332679987
H	0.451629996	0.352890015	0.291770011
C	0.550419986	0.605270028	0.275849998

Total energy (eV): -147.282327

Imaginary frequency (cm⁻¹): 754i

TS16

Ni	0.105590001	0.053330000	0.208719999
Ni	0.998459995	0.167989999	0.104170002
Ni	0.219960004	0.278250009	0.000000000
Ni	0.445969999	0.052779999	0.211649999
Ni	0.332850009	0.168520004	0.104889996
Ni	0.553189993	0.278279990	0.000000000
Ni	0.778819978	0.053560000	0.209270000
Ni	0.663800001	0.167679995	0.104369998
Ni	0.886759996	0.278310001	0.000000000
Ni	0.112439997	0.389710009	0.210280001

Ni	0.997569978	0.499929994	0.105389997
Ni	0.219359994	0.611060023	0.000000000
Ni	0.444869995	0.389560014	0.217920005
Ni	0.332580000	0.499370009	0.105710000
Ni	0.553110003	0.611479998	0.000000000
Ni	0.783100009	0.388429999	0.212549999
Ni	0.663209975	0.498959988	0.104840003
Ni	0.886730015	0.611500025	0.000000000
Ni	0.111380003	0.723730028	0.209289998
Ni	0.998279989	0.833540022	0.103979997
Ni	0.219929993	0.944639981	0.000000000
Ni	0.443040013	0.721729994	0.210240006
Ni	0.331090003	0.832650006	0.104659997
Ni	0.553059995	0.944530010	0.000000000
Ni	0.779999971	0.728070021	0.208560005
Ni	0.663640022	0.833260000	0.104070000
Ni	0.886690021	0.944850028	0.000000000
H	0.461279988	0.155849993	0.323599994
H	0.709890008	0.370090008	0.308880001
H	0.424309999	0.417409986	0.293969989
C	0.554080009	0.270379990	0.282609999

Total energy (eV): -150.832000

Imaginary frequency (cm⁻¹): 747i

TS17

Ni	0.109990001	0.050379999	0.210309997
Ni	0.001389980	0.166710004	0.105370000
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.446550012	0.047660001	0.209900007
Ni	0.335889995	0.169029996	0.106930003
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.779829979	0.053479999	0.210510001
Ni	0.666960001	0.166270003	0.104879998
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.116520002	0.386680007	0.212290004
Ni	0.001760006	0.498719990	0.105430000
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.452499986	0.380930007	0.223289996
Ni	0.335949987	0.497139990	0.106859997
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.785709977	0.386640012	0.209950000
Ni	0.664049983	0.497189999	0.107079998
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.113210000	0.719900012	0.210669994
Ni	0.000920000	0.832289994	0.105120003

Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.446779996	0.717750013	0.211769998
Ni	0.334329993	0.831510007	0.105319999
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.782570004	0.723140001	0.210280001
Ni	0.666660011	0.831889987	0.105310000
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.367359996	0.439069986	0.284779996
H	0.414810002	0.176149994	0.335180014
H	0.656610012	0.418170005	0.333099991
H	0.433059990	0.404709995	0.371140003
C	0.487179995	0.344839990	0.328390002

Total energy (eV): -154.513101

Imaginary frequency (cm⁻¹): 1033i

TS18

Ni	0.108690001	0.053070001	0.209879994
Ni	0.998520017	0.164820001	0.104850002
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.440899998	0.049670000	0.210439995
Ni	0.332020015	0.165199995	0.105789997
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777100027	0.060460001	0.209800005
Ni	0.664319992	0.166140005	0.105109997
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.101190001	0.384700000	0.209759995
Ni	0.997160017	0.499020010	0.105099998
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.432440013	0.376020014	0.212960005
Ni	0.331779987	0.498970002	0.105250001
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.774030030	0.387109995	0.212200001
Ni	0.664189994	0.499410003	0.104730003
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.111620001	0.720839977	0.210350007
Ni	0.997889996	0.831250012	0.105810001
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.441179991	0.719399989	0.216340005
Ni	0.333169997	0.830089986	0.106590003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.785730004	0.729399979	0.213339999
Ni	0.664349973	0.831420004	0.105410002
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.654039979	0.493570000	0.268979996
O	0.558860004	0.603789985	0.278589994

Total energy (eV): -141.478954

Imaginary frequency (cm⁻¹): 1204*i*

TS19

Ni	0.107270002	0.056529999	0.209999993
Ni	0.000540018	0.169970006	0.105090000
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.447479993	0.060369998	0.211590007
Ni	0.334529996	0.171880007	0.106289998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777809978	0.059050001	0.210710004
Ni	0.666700006	0.170149997	0.105190001
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.107400000	0.393070012	0.210480005
Ni	0.000309944	0.503329992	0.104960002
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.441740006	0.396580011	0.217549995
Ni	0.334289998	0.501730025	0.106679998
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.776449978	0.390269995	0.211710006
Ni	0.664370000	0.501770020	0.105990000
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.110469997	0.726620018	0.210309997
Ni	0.000320000	0.836170018	0.104759999
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.444090009	0.729569972	0.210290000
Ni	0.333090007	0.836470008	0.105120003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.780189991	0.729870021	0.209549993
Ni	0.666159987	0.835850000	0.104929999
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.562229991	0.499350011	0.336409986
H	0.568509996	0.290250003	0.270249993
O	0.453860015	0.367480010	0.317360014

Total energy (eV): -145.127683

Imaginary frequency (cm⁻¹): 932*i*

TS20

Ni	0.109010004	0.055380002	0.210290000
Ni	0.996029973	0.166299999	0.106239997
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.436260015	0.049020000	0.210400000
Ni	0.330440015	0.167280003	0.105540000
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.770690024	0.051089998	0.210730001

Ni	0.661430001	0.163800001	0.104379997
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.110600002	0.386770010	0.213110000
Ni	0.998239994	0.498470008	0.105140001
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.438230008	0.384609997	0.213349998
Ni	0.330489993	0.497860014	0.105839998
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.783280015	0.374289989	0.210319996
Ni	0.663550019	0.498430014	0.103510000
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.108489998	0.722590029	0.210329995
Ni	0.996760011	0.832379997	0.104400001
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.438290000	0.725269973	0.209189996
Ni	0.328559995	0.831889987	0.104840003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.782369971	0.739049971	0.211040005
Ni	0.662379980	0.830999970	0.104379997
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
C	0.382869989	0.432390004	0.347999990
C	0.684099972	0.505940020	0.254940003
O	0.201949999	0.410979986	0.335260004
O	0.529640019	0.457390010	0.372269988

Total energy (eV): -161.422696

Imaginary frequency (cm⁻¹): 388i

TS21

Ni	0.110579997	0.052310001	0.209950000
Ni	0.000420000	0.166380003	0.105360001
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.443500012	0.048710000	0.209590003
Ni	0.335060000	0.168239996	0.106059998
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.778569996	0.054219998	0.210669994
Ni	0.667469978	0.167329997	0.105209999
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.112230003	0.386449993	0.211799994
Ni	0.000320000	0.498290002	0.105910003
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.436120003	0.381359994	0.219689995
Ni	0.334829986	0.498050004	0.106109999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.784309983	0.381619990	0.214520007
Ni	0.664799988	0.497759998	0.105350003

Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.115709998	0.722920001	0.210339993
Ni	0.999890029	0.832050025	0.104910001
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.444389999	0.725520015	0.209710002
Ni	0.333160013	0.831960022	0.104670003
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.784380019	0.732179999	0.213569999
Ni	0.667429984	0.831600010	0.105149999
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
O	0.395590007	0.408690006	0.318989992
C	0.684390008	0.508260012	0.264910012
H	0.377249986	0.284839988	0.343010008

Total energy (eV): -149.246546

Imaginary frequency (cm⁻¹): 232i

TS22

Ni	0.107770003	0.050900001	0.210250005
Ni	0.001080000	0.168850005	0.105769999
Ni	0.222220004	0.277779996	0.000000000
Ni	0.444610000	0.055550002	0.211190000
Ni	0.333590001	0.168050006	0.105470002
Ni	0.555559993	0.277779996	0.000000000
Ni	0.777279973	0.056070000	0.210840002
Ni	0.666520000	0.166820005	0.105439998
Ni	0.888890028	0.277779996	0.000000000
Ni	0.101960003	0.385780007	0.214959994
Ni	0.999870002	0.499920011	0.105669998
Ni	0.222220004	0.611109972	0.000000000
Ni	0.449719995	0.383619994	0.215450004
Ni	0.333440006	0.499969989	0.104249999
Ni	0.555559993	0.611109972	0.000000000
Ni	0.777800024	0.388740003	0.211190000
Ni	0.665340006	0.499790013	0.105470002
Ni	0.888890028	0.611109972	0.000000000
Ni	0.108410001	0.724940002	0.210290000
Ni	0.999580026	0.833779991	0.104780003
Ni	0.222220004	0.944440007	0.000000000
Ni	0.447569996	0.731400013	0.214959994
Ni	0.333440006	0.833500028	0.105679996
Ni	0.555559993	0.944440007	0.000000000
Ni	0.782459974	0.725579977	0.210250005
Ni	0.664529979	0.832289994	0.105779998
Ni	0.888890028	0.944440007	0.000000000
H	0.460790008	0.372630000	0.293550014

C	0.332740009	0.500609994	0.264950007
Total energy (eV): -142.685192			
Imaginary frequency (cm ⁻¹): 822 <i>i</i>			