Supporting Information

Molecular-Level Understanding of CeO_2 as a Catalyst for Partial Alkyne Hydrogenation

Javier Carrasco,[*,‡] *Gianvito Vilé,*[‖] *Delia Fernández-Torre,*[§,⊥] *Rubén Pérez,*[§,#] *Javier Pérez-Ramírez,*[*,‖] *M. Verónica Ganduglia-Pirovano*[†]

[†] Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, C/Marie Curie 2, 28049 Madrid, Spain
[‡] CIC Energigune, Albert Einstein 48, 01510 Miñano (Álava), Spain
[‖] Institute for Chemical and Bioengineering, Department of Chemistry and Applied Biosciences, ETH Zurich, Vladimir-Prelog-Weg 1, 8093 Zurich, Switzerland
[§] Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain
[⊥] Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Serrano 121, 28006 Madrid, Spain
[#] Condensed Matter Physics Center (IFIMAC), Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

* Corresponding authors: jcarrasco@cicenergigune.com (J.C.); jpr@chem.ethz.ch (J. P.-R.)

Summary

The role of Ce^{3+} localization on the relative stability of the adsorbed species (Figure S1), images of the most relevant DFT minima and transition structures (Figures S2-S5), and details of the oligomerization reaction between C_2H_3* and β-C_2H_2* species (Figure S6) are shown here. In addition, the computed DFT total energies (Table S1) and optimized coordinates (Tables S2-S29) of the most relevant minima and transition structures are also provided.

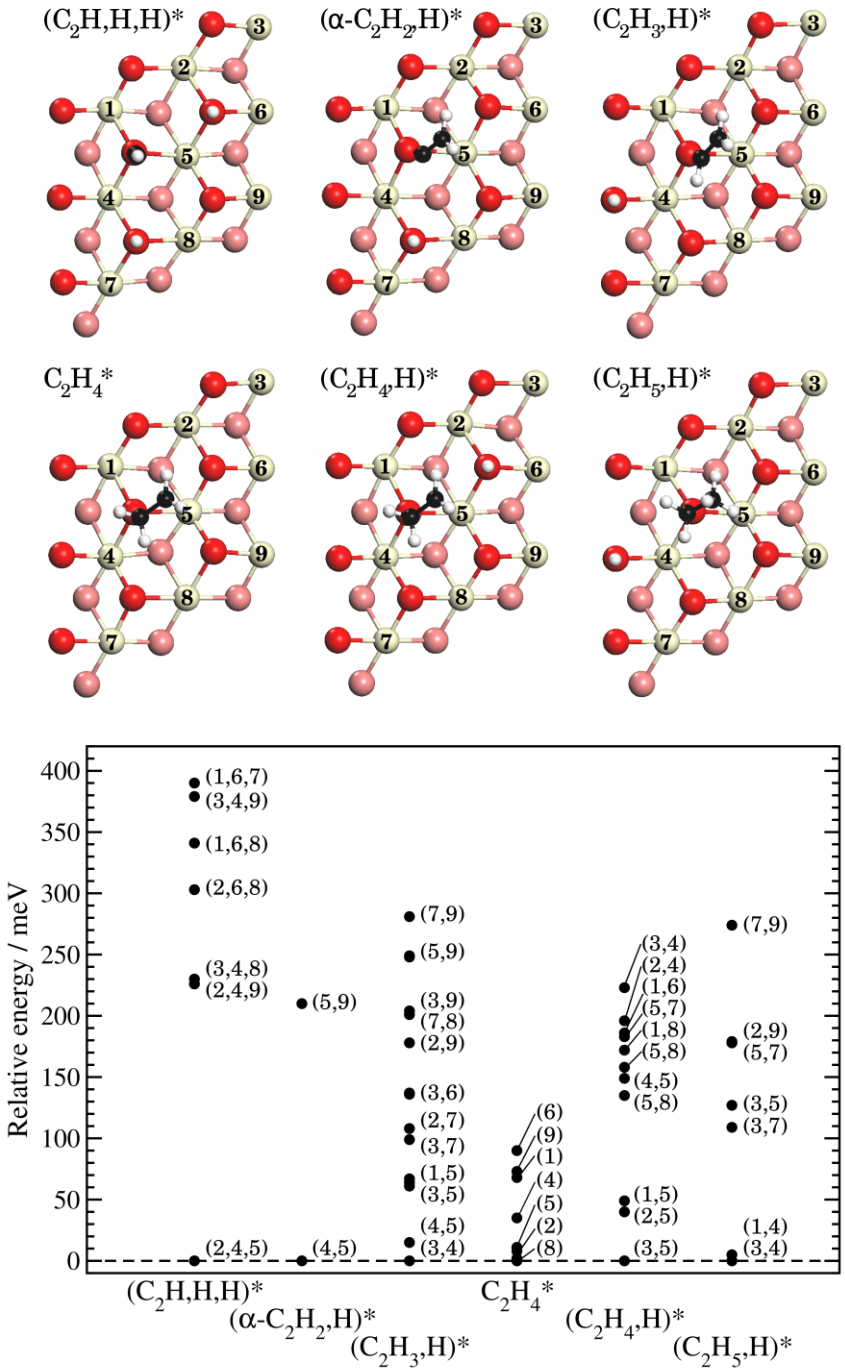

Figure S1. Relative energies for different locations of Ce^{3+} ions on the $CeO_2(111)$ surface upon adsorption of six selected reaction intermediates: (C_2H,H,H)*, $(\alpha\text{-}C_2H_2,H)$*, (C_2H_3,H)*, C_2H_4*, (C_2H_4,H)*, and (C_2H_5,H)*. The zero level (dashed line) corresponds to the most stable Ce^{3+} configuration for each case; therefore, positive energies denote less stable configurations. The labels attached to the points in the graph stand for the position of the Ce^{3+} ions according to the top view structures (only the top three atomic layers are displayed) of each reaction intermediate. Red, light red, cream, black, and white spheres represent surface O, subsurface O, Ce, C, and H atoms, respectively.

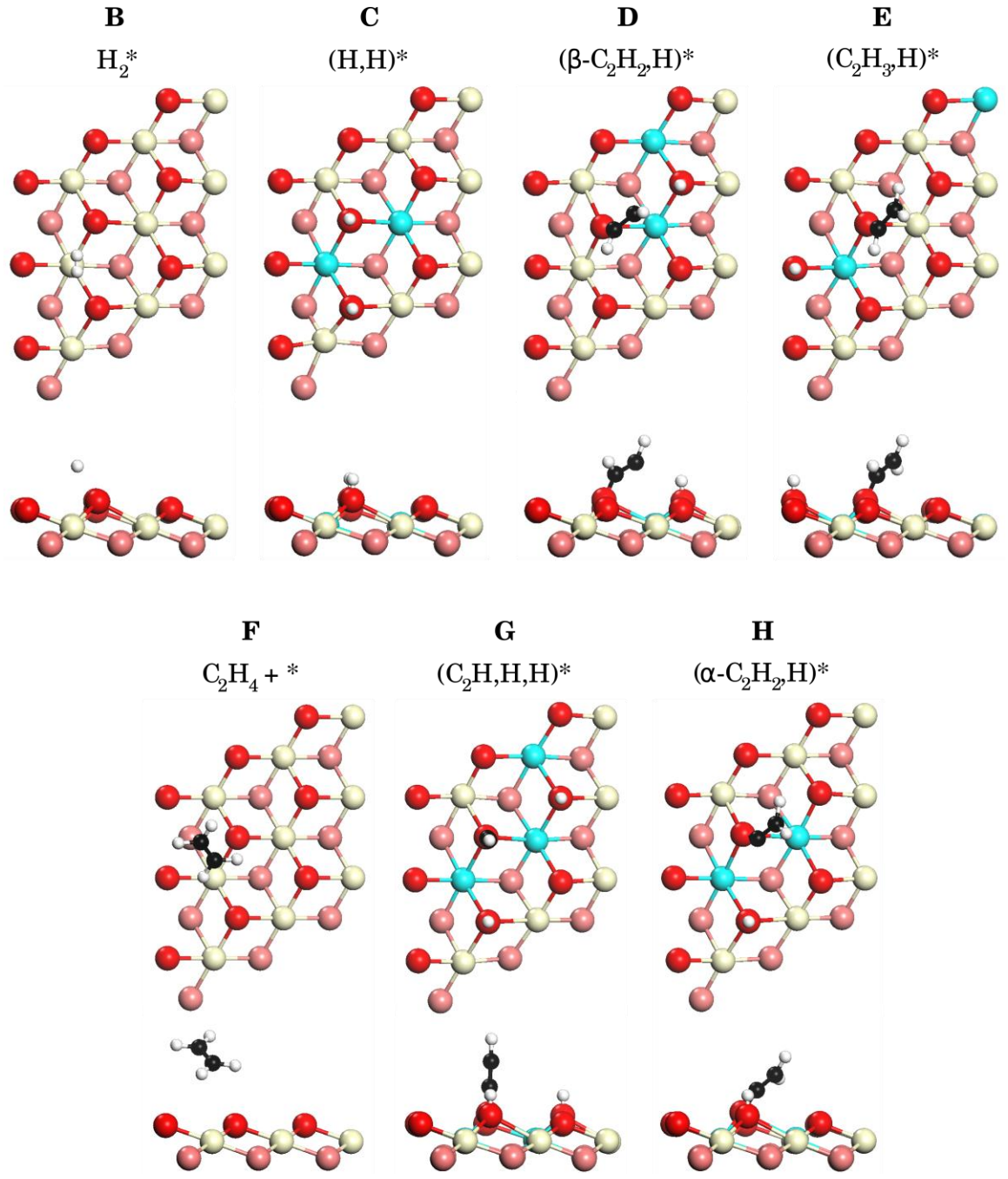

Figure S2. Top and side views of the lowest energy optimized structures of reaction intermediates for the hydrogenation of C_2H_2 to C_2H_4 on a (3×3) CeO_2(111) surface. Labels B, C, D, E, F, G, and H refer to the same labels used in Figure 6. Red, light red, cream, light blue, black, and white spheres represent surface O, subsurface O, Ce^{4+}, Ce^{3+}, C, and H atoms, respectively. For clarity, only the top three atomic layers of the CeO_2(111) surface are included in this and in Figures S3-S6.

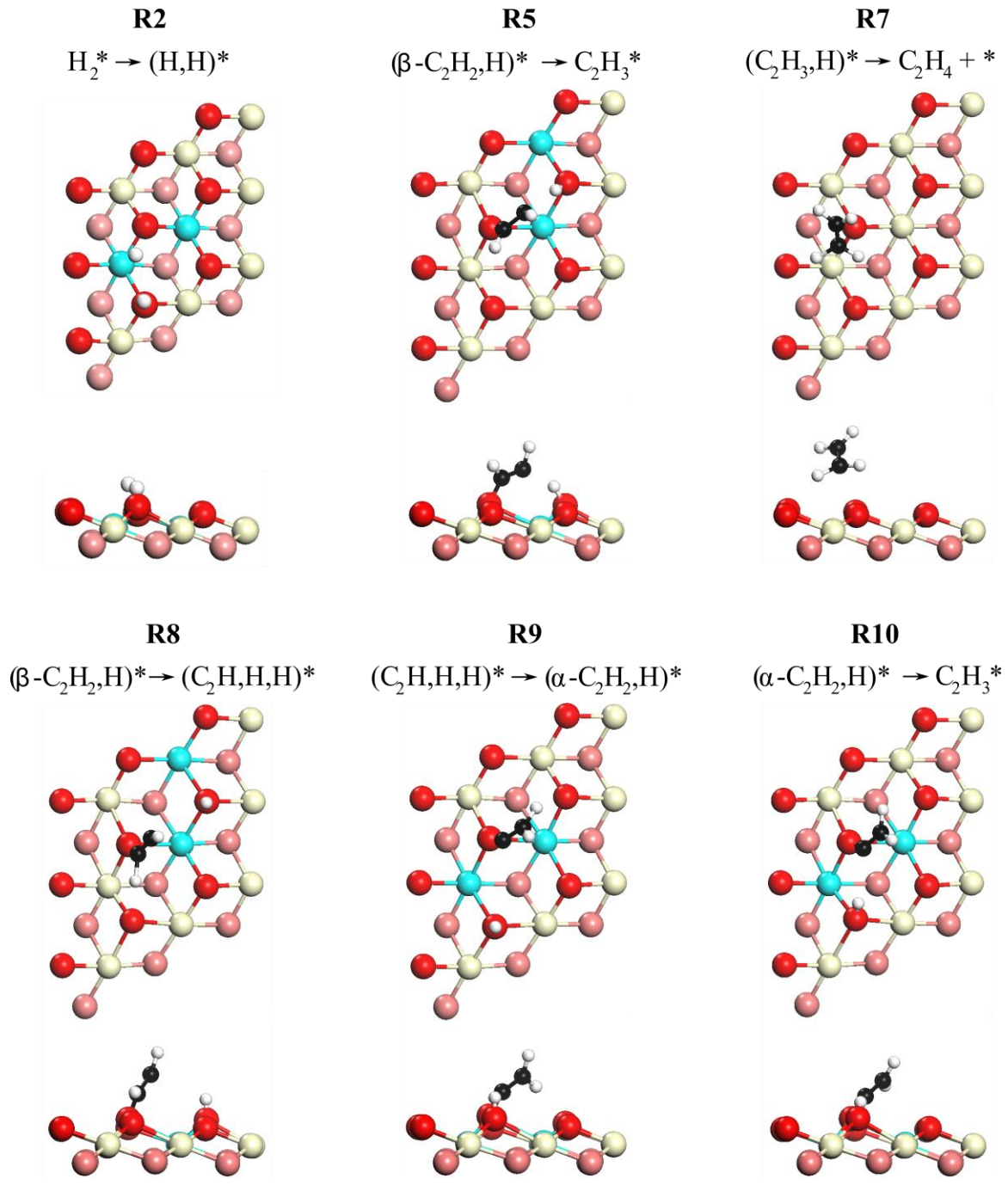

Figure S3. Top and side views of the transition structures of each elementary step for the hydrogenation of C_2H_2 to C_2H_4 on a (3×3) CeO_2(111) surface. Labels R2, R5, R7, R8, R9, and R10 refer to the same labels used in Figure 6. The color codes are indicated in Figure S2.

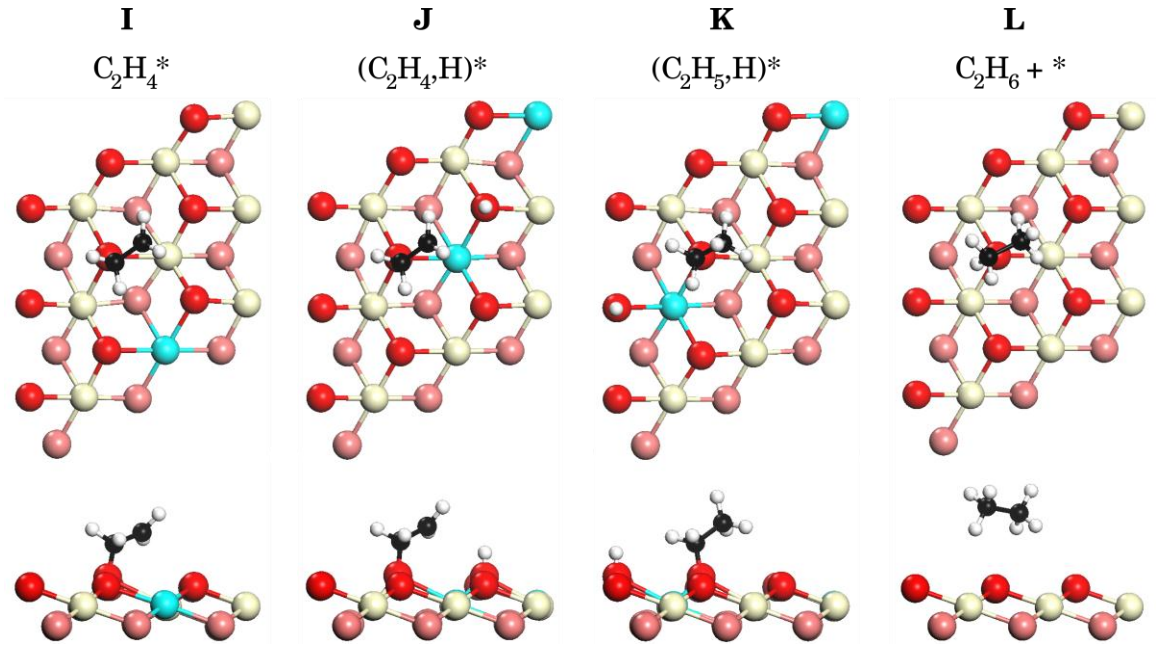

Figure S4. Top and side views of the lowest energy optimized structures of reaction intermediates for the hydrogenation of C_2H_4* to C_2H_6 on a (3×3) CeO_2(111) surface. Labels I, J, K, and L refer to the same labels used in Figure 6. The color codes are indicated in Figure S2.

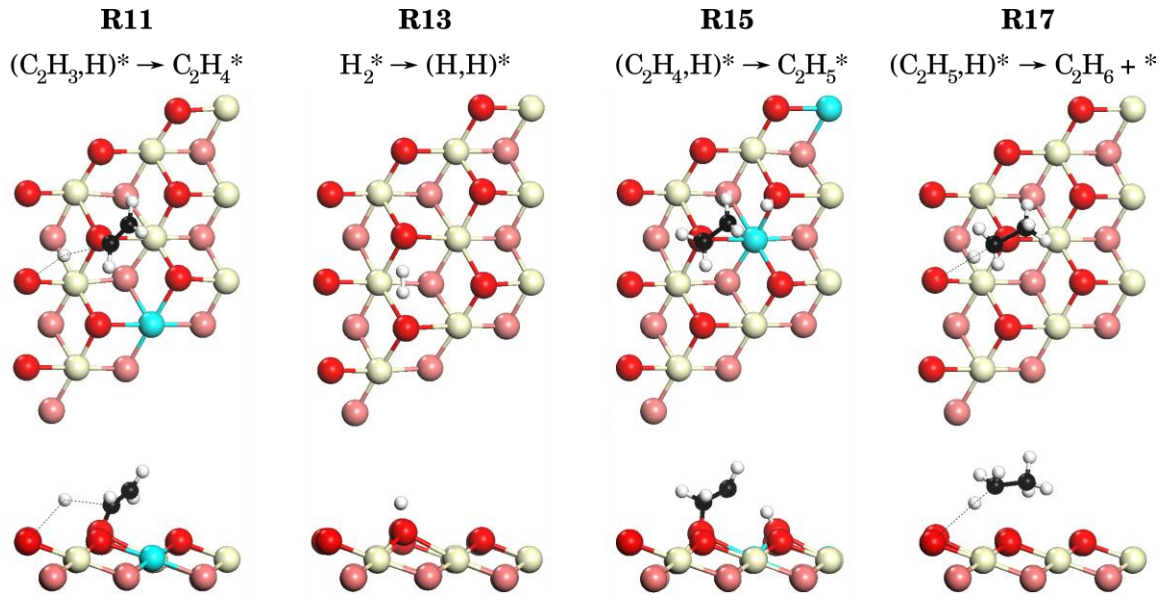

Figure S5. Top and side views of the transition structures of each considered reaction step for the hydrogenation of C_2H_2 to C_2H_4 on a (3×3) CeO_2(111) surface. Labels R11, R13, R15, and R17 refer to the same labels used in Figure 4. The color codes are indicated in Figure S2.

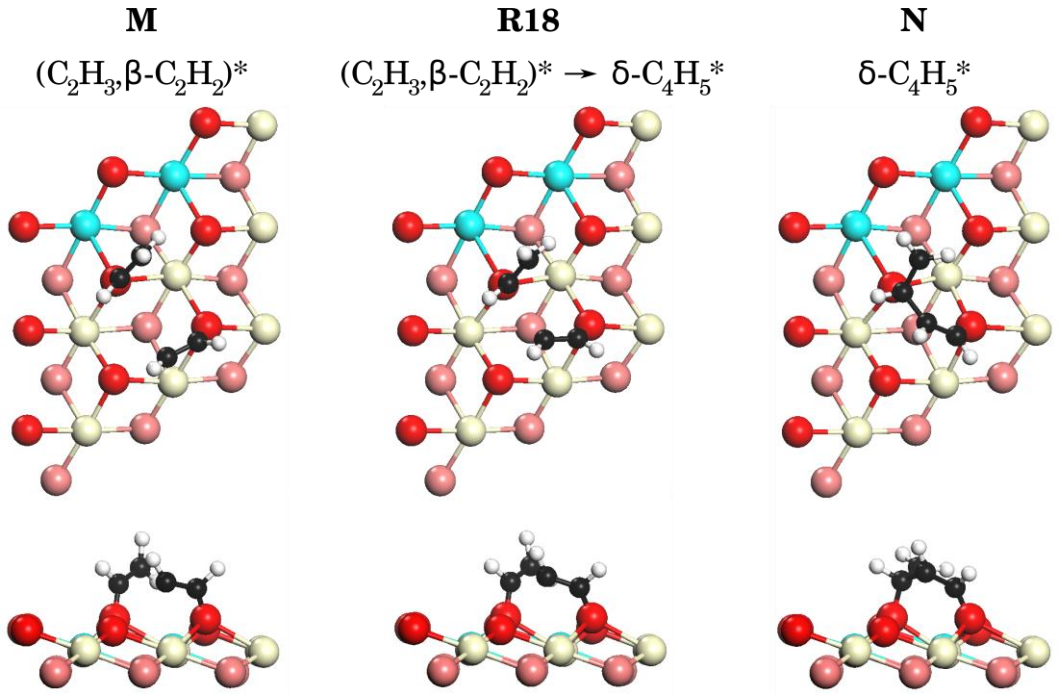

Figure S6. Top and side views of the lowest energy optimized structures corresponding to eq R18. Labels M, R18, and N refer to the same labels used in Figure S8. The color codes are indicated in Figure S2.

Table S1. Total energy values (in eV) and total magnetic moments (in μ_B) for all the reactants, intermediates, products, and transition states involved in the hydrogenation of acetylene on $CeO_2(111)$ shown in Table 1. An asterisk (*) denotes the clean $CeO_2(111)$ surface or an adsorbed species. Co-adsorbed species are denoted in parenthesis and separated by a comma.

Species	Energy	Magnetization	Species	Energy	Magnetization
H_2	-6.760	0.0	C_2H_5*	-470.638	1.0
C_2H_2	-22.946	0.0	(C_2H_5,H)*	-475.201	2.0
C_2H_4	-31.966	0.0	C_2H_6*	-474.005	0.0
C_2H_6	-40.484	0.0	(C_2H_3,β-C_2H_2)*	-485.403	3.0
*	-433.520	0.0	δ-C_4H_5*	-486.133	3.0
H_2*	-440.283	0.0	R2, R13	-439.277	2.0
H*	-438.040	1.0	R5	-461.047	3.0
(H,H)*	-442.631	2.0	R7	-464.282	0.0
(β-C_2H_2,H)*	-461.140	3.0	R8	-460.401	3.0
(α-C_2H_2,H)*	-461.650	3.0	R9	-461.403	3.0
(C_2H,H)*	-458.232	2.0	R10	-461.110	3.0
(C_2H,H,H)*	-462.869	3.0	R11	-463.486	2.0
C_2H_3*	-462.623	1.0	R15	-469.198	1.0
(C_2H_3,H)*	-467.137	2.0	R17	-471.758	0.0
C_2H_4*	-465.004	2.0	R18	-484.983	3.0
(C_2H_4,H)*	-469.606	2.0			

Table S2. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of gas-phase H_2, C_2H_2, C_2H_4, and C_2H_6.

a = 12.0000 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 0.0000 b_x + 12.000 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 14.000 c_z

H_2

Atom	x	y	z
H	0.50000	0.50000	0.50819
H	0.50000	0.50000	0.56181

a = 12.0000 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 0.0000 b_x + 12.000 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 20.000 c_z

C_2H_2				C_2H_4				C_2H_6			
Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
C	0.50390	0.52716	0.48941	C	0.50501	0.52723	0.48338	C	0.49993	0.52201	0.48542
C	0.50241	0.52697	0.54976	C	0.50053	0.52710	0.54997	C	0.50196	0.53668	0.56129
H	0.50510	0.52764	0.43589	H	0.42967	0.52745	0.45274	H	0.50817	0.60240	0.45943
H	0.50097	0.52708	0.60329	H	0.57606	0.52688	0.58046	H	0.49551	0.45612	0.58728
				H	0.58433	0.52716	0.45659	H	0.42152	0.48364	0.46858
				H	0.42123	0.52721	0.57680	H	0.57965	0.57657	0.57804
								H	0.56853	0.46835	0.46821
								H	0.43238	0.58896	0.57861

Table S3. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the clean $CeO_2(111)$ surface.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
Ce	0.11111	0.11111	0.23864	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.66667	0.33333	0.18956
Ce	0.77778	0.77778	0.23864	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.88889	0.55556	0.28612
Ce	0.44444	0.77778	0.23864	O	0.00000	0.00000	0.18956	O	0.55556	0.55556	0.00000
Ce	0.11111	0.77778	0.23864	O	0.22222	0.22222	0.28612	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.77778	0.44444	0.23864	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.33333	0.33333	0.18956
Ce	0.44444	0.44444	0.23864	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.55556	0.55556	0.28612
Ce	0.11111	0.44444	0.23864	O	0.66667	0.66667	0.18956	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77778	0.11111	0.23864	O	0.88889	0.88889	0.28612	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44444	0.11111	0.23864	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.00000	0.33333	0.18956
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.22222	0.55556	0.28612
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.33333	0.66667	0.18956	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.55556	0.88889	0.28612	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.66667	0.00000	0.18956
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.88889	0.22222	0.28612
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.00000	0.66667	0.18956	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.28612	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000	O	0.33333	0.00000	0.18956
Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694	O	0.55556	0.22222	0.28612

Table S4. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of H_2* (B in Figure S2).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 12.2504 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
Ce	0.00000	0.33333	0.19796	O	0.22222	0.55556	0.13333	O	0.00011	0.99989	0.38583
Ce	0.00000	0.66667	0.19796	O	0.22222	0.88889	0.13333	O	0.33329	0.33306	0.38572
Ce	0.00000	0.00000	0.19796	O	0.55556	0.22222	0.13333	O	0.33343	0.66658	0.38588
Ce	0.33333	0.33333	0.19796	O	0.55556	0.55556	0.13333	O	0.33348	0.99972	0.38591
Ce	0.33333	0.66667	0.19796	O	0.55556	0.88889	0.13333	O	0.66679	0.33310	0.38594
Ce	0.33333	0.00000	0.19796	O	0.88889	0.22222	0.13333	O	0.66666	0.66658	0.38588
Ce	0.66667	0.33333	0.19796	O	0.88889	0.55556	0.13333	O	0.66667	0.99989	0.38583
Ce	0.66667	0.66667	0.19796	O	0.88889	0.88889	0.13333	O	0.22217	0.22212	0.51472
Ce	0.66667	0.00000	0.19796	O	0.11111	0.11111	0.26259	O	0.22219	0.55524	0.51432
Ce	0.11111	0.11112	0.45148	O	0.11111	0.44444	0.26259	O	0.22170	0.88877	0.51471
Ce	0.11110	0.44432	0.45148	O	0.11111	0.77778	0.26259	O	0.55541	0.22199	0.51459
Ce	0.11107	0.77768	0.45138	O	0.44444	0.11111	0.26259	O	0.55599	0.55468	0.51432
Ce	0.44431	0.11104	0.45152	O	0.44444	0.44444	0.26259	O	0.55621	0.88877	0.51471
Ce	0.44462	0.44412	0.45144	O	0.44444	0.77778	0.26259	O	0.88927	0.22199	0.51459
Ce	0.44461	0.77745	0.45214	O	0.77778	0.11111	0.26259	O	0.88924	0.55524	0.51432
Ce	0.77793	0.11081	0.45152	O	0.77778	0.44444	0.26259	O	0.88904	0.88878	0.51462
Ce	0.77792	0.44412	0.45144	O	0.77778	0.77778	0.26259	H	0.47264	0.78631	0.68804
Ce	0.77792	0.77768	0.45138	O	0.99999	0.33335	0.38573	H	0.40772	0.78631	0.68804
O	0.22222	0.22222	0.13333	O	0.99986	0.66662	0.38573				

Table S5. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of H*.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 12.2504 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
Ce	0.00000	0.33333	0.19796	O	0.22222	0.55556	0.13333	O	0.99702	0.00184	0.38355
Ce	0.00000	0.66667	0.19796	O	0.22222	0.88889	0.13333	O	0.32953	0.34048	0.38895
Ce	0.00000	1.00000	0.19796	O	0.55556	0.22222	0.13333	O	0.32624	0.65950	0.39126
Ce	0.33333	0.33333	0.19796	O	0.55556	0.55556	0.13333	O	0.33040	0.00568	0.38761
Ce	0.33333	0.66667	0.19796	O	0.55556	0.88889	0.13333	O	0.66824	0.33062	0.38351
Ce	0.33333	1.00000	0.19796	O	0.88889	0.22222	0.13333	O	0.67189	0.66410	0.38744
Ce	0.66667	0.33333	0.19796	O	0.88889	0.55556	0.13333	O	0.66758	0.00109	0.38384
Ce	0.66667	0.66667	0.19796	O	0.88889	0.88889	0.13333	O	0.21809	0.22628	0.51682
Ce	0.66667	1.00000	0.19796	O	0.11111	0.11111	0.26259	O	0.22046	0.55388	0.54779
Ce	0.10995	0.11114	0.45238	O	0.11111	0.44444	0.26259	O	0.20399	0.89778	0.51916
Ce	0.10591	0.43946	0.45095	O	0.11111	0.77778	0.26259	O	0.55714	0.22201	0.51496
Ce	0.10541	0.78798	0.45081	O	0.44444	0.11111	0.26259	O	0.56415	0.53802	0.51954
Ce	0.44534	0.10999	0.45171	O	0.44444	0.44444	0.26259	O	0.56337	0.89697	0.51838
Ce	0.45439	0.43923	0.45085	O	0.44444	0.77778	0.26259	O	0.88811	0.22181	0.51502
Ce	0.44389	0.77772	0.45859	O	0.77778	0.11111	0.26259	O	0.89184	0.55206	0.51627
Ce	0.77749	0.11104	0.45120	O	0.77778	0.44444	0.26259	O	0.88851	0.89063	0.51490
Ce	0.77722	0.44394	0.45235	O	0.77778	0.77778	0.26259	H	0.22025	0.55362	0.62733
Ce	0.77628	0.77887	0.45160	O	0.99927	0.33276	0.38529				
O	0.22222	0.22222	0.13333	O	0.00705	0.66287	0.38889				

Table S6. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (H,H)* (C in Figure S2).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 12.2504 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
Ce	0.00000	0.33333	0.19796	O	0.22222	0.55556	0.13333	O	0.99779	0.00289	0.38240
Ce	0.00000	0.66667	0.19796	O	0.22222	0.88889	0.13333	O	0.33252	0.33312	0.38458
Ce	0.00000	1.00000	0.19796	O	0.55556	0.22222	0.13333	O	0.33568	0.65947	0.38967
Ce	0.33333	0.33333	0.19796	O	0.55556	0.55556	0.13333	O	0.33629	0.00308	0.38861
Ce	0.33333	0.66667	0.19796	O	0.55556	0.88889	0.13333	O	0.66287	0.33964	0.38855
Ce	0.33333	1.00000	0.19796	O	0.88889	0.22222	0.13333	O	0.66680	0.65835	0.39310
Ce	0.66667	0.33333	0.19796	O	0.88889	0.55556	0.13333	O	0.65999	0.00416	0.38900
Ce	0.66667	0.66667	0.19796	O	0.88889	0.88889	0.13333	O	0.22298	0.22358	0.51685
Ce	0.66667	1.00000	0.19796	O	0.11111	0.11111	0.26259	O	0.22489	0.54879	0.51894
Ce	0.11095	0.10973	0.45163	O	0.11111	0.44444	0.26259	O	0.20648	0.89710	0.51800
Ce	0.11060	0.44418	0.45391	O	0.11111	0.77778	0.26259	O	0.54973	0.22634	0.51700
Ce	0.10851	0.78078	0.45231	O	0.44444	0.11111	0.26259	O	0.55748	0.54449	0.55147
Ce	0.43921	0.12012	0.45022	O	0.44444	0.44444	0.26259	O	0.54876	0.90098	0.55383
Ce	0.43786	0.44107	0.45119	O	0.44444	0.77778	0.26259	O	0.89017	0.22192	0.51484
Ce	0.43724	0.78025	0.45648	O	0.77778	0.11111	0.26259	O	0.90082	0.53743	0.52184
Ce	0.77833	0.11071	0.45125	O	0.77778	0.44444	0.26259	O	0.89519	0.89811	0.51829
Ce	0.78848	0.43963	0.45047	O	0.77778	0.77778	0.26259	H	0.55989	0.53733	0.63072
Ce	0.78489	0.77339	0.45742	O	0.00184	0.33072	0.38403	H	0.54666	0.90745	0.63315
O	0.22222	0.22222	0.13333	O	0.00551	0.66410	0.38740				

Table S7. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (β-C_2H_2,H)* (D in Figure S2).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.22382	0.45763	0.42716	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.56634	0.54319	0.37177	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.66967	0.33551	0.19176
H	0.39269	0.52052	0.48740	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.89418	0.54806	0.28778
C	0.25648	0.51823	0.39222	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.35120	0.53530	0.42616	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.11103	0.11112	0.24077	O	0.99726	0.00225	0.18806	O	0.32747	0.33514	0.19318
Ce	0.77791	0.77806	0.23833	O	0.21450	0.22657	0.29071	O	0.57356	0.54970	0.31280
Ce	0.44044	0.78510	0.24272	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10567	0.79046	0.23786	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.78745	0.43937	0.23800	O	0.67212	0.66012	0.19141	O	0.00087	0.33157	0.18792
Ce	0.45024	0.43596	0.24318	O	0.88839	0.89083	0.28602	O	0.20280	0.55750	0.31734
Ce	0.10728	0.43638	0.23790	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77672	0.11054	0.23871	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44814	0.10867	0.23931	O	0.32435	0.66676	0.19640	O	0.66982	0.99764	0.18668
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.56568	0.89475	0.28822	O	0.89149	0.22359	0.28778
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00724	0.66285	0.19212	O	0.33030	0.00689	0.19106
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.20354	0.90205	0.29120	O	0.56547	0.20478	0.28865
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S8. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (α-C_2H_2,H)* (H in Figure S2).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.22690	0.20666	0.37189	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.37425	0.62536	0.42127	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67272	0.33055	0.19137
H	0.40525	0.47886	0.48499	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.87260	0.56391	0.28856
C	0.26921	0.52674	0.38772	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.35592	0.54281	0.43282	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.10461	0.10866	0.23897	O	0.99874	0.00102	0.18805	O	0.33398	0.32651	0.19630
Ce	0.77743	0.77712	0.23876	O	0.22428	0.21041	0.31230	O	0.56328	0.56605	0.28760
Ce	0.44502	0.77843	0.23816	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10386	0.79136	0.23754	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77590	0.44838	0.23942	O	0.66494	0.67060	0.18652	O	0.00158	0.32766	0.19195
Ce	0.45666	0.43801	0.24400	O	0.88867	0.89304	0.28765	O	0.19966	0.57918	0.32246
Ce	0.10237	0.44660	0.24117	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77778	0.11060	0.24057	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.45534	0.10668	0.23791	O	0.32556	0.67100	0.19406	O	0.66899	0.99663	0.18779
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.55678	0.88888	0.28633	O	0.89377	0.21531	0.28986
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00319	0.66987	0.19253	O	0.33024	0.00575	0.19114
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21472	0.89604	0.28836	O	0.56920	0.20233	0.29077
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S9. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (C_2H,H)* (Figure 4c).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.55923	0.55944	0.37341	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67004	0.33595	0.19201
H	0.22937	0.55034	0.53430	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.89765	0.53618	0.28876
C	0.21965	0.55674	0.39458	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.22774	0.55288	0.46896	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.11105	0.11150	0.23988	O	0.00063	0.00234	0.18777	O	0.32674	0.33679	0.19316
Ce	0.77896	0.77570	0.24308	O	0.21780	0.22154	0.28747	O	0.56072	0.55787	0.31373
Ce	0.43893	0.78842	0.23808	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10464	0.79177	0.23750	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.78684	0.43802	0.23857	O	0.65954	0.65951	0.19280	O	0.00146	0.32993	0.18706
Ce	0.45100	0.43547	0.24237	O	0.89669	0.89734	0.28817	O	0.21308	0.55997	0.31494
Ce	0.10680	0.43601	0.23768	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77642	0.11031	0.23947	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44660	0.10996	0.23940	O	0.33109	0.66976	0.19495	O	0.66510	0.00267	0.18886
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.53993	0.89614	0.28864	O	0.89276	0.22226	0.28782
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.01508	0.65884	0.19391	O	0.33105	0.00170	0.18796
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21858	0.89603	0.28804	O	0.56298	0.20861	0.29009
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				
Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694				

Table S10. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (C_2H,H,H)* (G in Figure S2).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.22415	0.21334	0.37356	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.56980	0.54790	0.37257	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67091	0.33609	0.19149
H	0.22933	0.54520	0.53760	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.87708	0.55947	0.28961
C	0.22012	0.55910	0.39800	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.22725	0.54926	0.47231	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.10510	0.10811	0.23924	O	0.99672	0.00246	0.18740	O	0.33313	0.32693	0.19543
Ce	0.77752	0.77686	0.23885	O	0.22316	0.21390	0.31393	O	0.56770	0.54975	0.31300
Ce	0.43837	0.78700	0.24213	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10358	0.79105	0.23744	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.78626	0.44219	0.23765	O	0.66818	0.66149	0.18992	O	0.00317	0.32750	0.19139
Ce	0.45090	0.43508	0.24144	O	0.88775	0.89385	0.28701	O	0.21433	0.56719	0.31905
Ce	0.10393	0.44604	0.24206	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77723	0.11125	0.23990	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.45675	0.10547	0.23820	O	0.32411	0.66662	0.19554	O	0.66995	0.99834	0.18678
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.56483	0.89507	0.28830	O	0.89180	0.21963	0.28924
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00312	0.67021	0.19264	O	0.32665	0.01297	0.19253
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.20199	0.90282	0.29073	O	0.56850	0.20513	0.29033
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S11. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of C_2H_3*.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.25197	0.43189	0.41423	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.35750	0.62925	0.40073	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67199	0.33020	0.19091
H	0.39548	0.50019	0.48056	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.88981	0.55333	0.28542
C	0.26444	0.51169	0.38699	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.34491	0.54827	0.42393	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.11044	0.11113	0.24045	O	0.99988	0.00050	0.18885	O	0.32691	0.33507	0.19321
Ce	0.77893	0.77713	0.23781	O	0.21669	0.22243	0.28868	O	0.56465	0.56431	0.28746
Ce	0.44666	0.77785	0.23856	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10688	0.78904	0.23754	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77721	0.44517	0.23909	O	0.66856	0.66872	0.18769	O	0.99937	0.33222	0.18859
Ce	0.45429	0.43973	0.24420	O	0.89021	0.88935	0.28564	O	0.20104	0.56038	0.31511
Ce	0.10646	0.43694	0.23700	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77714	0.11058	0.23933	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44656	0.10965	0.23892	O	0.32552	0.67121	0.19351	O	0.66858	0.99623	0.18786
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.55764	0.88768	0.28620	O	0.89191	0.22033	0.28778
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00741	0.66300	0.19133	O	0.33392	0.99970	0.19006
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21749	0.89341	0.28859	O	0.56451	0.20425	0.28855
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S12. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (C_2H_3,H)* (E in Figure S2).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.88344	0.54374	0.37390	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.25450	0.43612	0.41659	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.36812	0.62675	0.40777	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.66581	0.33262	0.18889
H	0.39310	0.50391	0.48976	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.88362	0.54610	0.31433
C	0.27307	0.51270	0.39022	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.34975	0.54961	0.43119	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.11208	0.11090	0.23888	O	0.00039	0.00216	0.18826	O	0.33772	0.33560	0.19296
Ce	0.77422	0.78549	0.24233	O	0.22800	0.20708	0.28898	O	0.55812	0.55091	0.28728
Ce	0.44425	0.77839	0.23831	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10395	0.78967	0.23797	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77323	0.43940	0.23778	O	0.66912	0.66020	0.19159	O	0.99330	0.33488	0.19082
Ce	0.45449	0.43734	0.24000	O	0.89411	0.90109	0.29092	O	0.21964	0.55789	0.31527
Ce	0.11373	0.43638	0.24089	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77750	0.11107	0.24066	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44336	0.10897	0.23940	O	0.32974	0.66192	0.19309	O	0.66287	0.00635	0.19072
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.53965	0.89509	0.28864	O	0.88515	0.22328	0.28795
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00803	0.66692	0.19472	O	0.33208	0.99822	0.18697
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.22104	0.89009	0.28646	O	0.55843	0.22447	0.28986

Table S13. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of C_2H_4* (I in Figure S4).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.14734	0.59077	0.43322	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.25772	0.42312	0.40714	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.35547	0.62784	0.40963	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.66814	0.33427	0.18796
H	0.41987	0.47251	0.47173	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.88853	0.55406	0.28647
C	0.23762	0.52588	0.39631	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.35119	0.53883	0.42546	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.11061	0.11145	0.23953	O	0.99976	0.00046	0.18915	O	0.32700	0.34650	0.19363
Ce	0.77693	0.77768	0.23878	O	0.20463	0.23052	0.28951	O	0.55885	0.55467	0.28580
Ce	0.44559	0.77778	0.23863	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10546	0.78769	0.23878	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77787	0.44475	0.23840	O	0.66795	0.66492	0.18788	O	0.99731	0.33400	0.18778
Ce	0.45517	0.43937	0.23857	O	0.89292	0.88885	0.28864	O	0.21063	0.55940	0.31106
Ce	0.10522	0.43988	0.23777	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77794	0.11154	0.23942	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44420	0.11146	0.24329	O	0.32955	0.66268	0.19258	O	0.67334	0.99670	0.19078
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.56334	0.87309	0.28834	O	0.88858	0.22274	0.28628
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00581	0.66410	0.19126	O	0.32990	0.99662	0.19079
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21850	0.88798	0.28880	O	0.56475	0.23040	0.28947

Table S14. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (C_2H_4,H)* (J in Figure S4).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.56515	0.55985	0.37214	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.12493	0.60684	0.43159	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.67022	0.33568	0.19221
H	0.23691	0.43547	0.41612	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.89830	0.53664	0.28922
H	0.33333	0.64108	0.42603	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
H	0.39256	0.48495	0.48710	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.22101	0.53565	0.40193	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.32759	0.33562	0.19223
C	0.32946	0.55083	0.43864	O	0.00085	0.00159	0.18819	O	0.56347	0.55919	0.31255
Ce	0.11100	0.11166	0.23961	O	0.21859	0.22215	0.28848	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77873	0.77585	0.24260	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.43907	0.78873	0.23772	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.00184	0.33014	0.18730
Ce	0.10576	0.78873	0.23796	O	0.66038	0.66014	0.19223	O	0.20990	0.55794	0.31499
Ce	0.78753	0.43798	0.23805	O	0.89750	0.89621	0.28889	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.44841	0.43712	0.24344	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.10813	0.43804	0.23795	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66526	0.00301	0.18908
Ce	0.77664	0.11035	0.23934	O	0.33160	0.66962	0.19470	O	0.89306	0.22213	0.28804
Ce	0.44648	0.11039	0.23928	O	0.53974	0.89618	0.28872	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33082	0.00196	0.18808
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.01357	0.65992	0.19260	O	0.56215	0.20889	0.29087
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.21957	0.89468	0.28894				
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S15. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of C_2H_5*.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.10257	0.65237	0.41784	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.29685	0.56749	0.51043	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.67244	0.33047	0.19079
H	0.18922	0.47647	0.41889	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.89053	0.55433	0.28617
H	0.32278	0.64816	0.42574	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
H	0.40703	0.47092	0.43151	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.19674	0.56367	0.39910	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.32651	0.33539	0.19224
C	0.31226	0.56261	0.44373	O	0.99936	0.00100	0.18896	O	0.56367	0.56443	0.28847
Ce	0.11039	0.11155	0.24031	O	0.21758	0.22279	0.28862	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77852	0.77751	0.23789	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44630	0.77750	0.23885	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.99964	0.33304	0.18898
Ce	0.10742	0.78781	0.23748	O	0.66868	0.66823	0.18798	O	0.21069	0.56195	0.31158
Ce	0.77716	0.44550	0.23924	O	0.89039	0.88887	0.28637	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.45192	0.44102	0.24251	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.10758	0.43840	0.23747	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66856	0.99682	0.18811
Ce	0.77695	0.11103	0.23928	O	0.32658	0.67169	0.19215	O	0.89171	0.22097	0.28804
Ce	0.44609	0.10992	0.23903	O	0.55754	0.88796	0.28625	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33351	0.99991	0.19017
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.00654	0.66351	0.19070	O	0.56313	0.20606	0.28881
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.21721	0.89321	0.28871				
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S16. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (C_2H_5,H)* (K in Figure S4).

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.87925	0.54620	0.37421	Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.11013	0.65468	0.41479	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.29336	0.56687	0.51574	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.66687	0.33232	0.18827
H	0.19233	0.47879	0.41748	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.88354	0.54812	0.31478
H	0.33079	0.64429	0.43385	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
H	0.41087	0.46758	0.43985	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.20510	0.56395	0.39930	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.33791	0.33499	0.19240
C	0.31655	0.56045	0.45002	O	0.00039	0.00227	0.18821	O	0.55748	0.54871	0.28820
Ce	0.11205	0.11091	0.23858	O	0.22864	0.20692	0.28870	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77396	0.78551	0.24236	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44355	0.77833	0.23836	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.99351	0.33558	0.19130
Ce	0.10513	0.78801	0.23763	O	0.66856	0.65989	0.19199	O	0.22873	0.56021	0.31309
Ce	0.77322	0.43913	0.23764	O	0.89454	0.90060	0.29100	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.45382	0.43798	0.23897	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.11524	0.43765	0.24165	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66207	0.00721	0.19115
Ce	0.77767	0.11138	0.24059	O	0.33071	0.66296	0.19150	O	0.88480	0.22363	0.28807
Ce	0.44283	0.10897	0.23927	O	0.53900	0.89520	0.28859	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33195	0.99831	0.18690
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.00730	0.66674	0.19448	O	0.55826	0.22728	0.29094
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.22114	0.89001	0.28627				

Table S17. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of C_2H_6*.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.13859	0.56739	0.43731	Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.11854	0.66011	0.52771	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.36972	0.56005	0.53580	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.66665	0.33318	0.18928
H	0.19811	0.48447	0.53240	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.88880	0.55537	0.28593
H	0.30891	0.64212	0.44073	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
H	0.38818	0.46631	0.44627	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.18674	0.56820	0.49505	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.33367	0.33268	0.18926
C	0.32019	0.55892	0.47868	O	0.00000	0.00004	0.18931	O	0.55583	0.55542	0.28583
Ce	0.11107	0.11098	0.23871	O	0.22200	0.22224	0.28593	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77764	0.77776	0.23860	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44438	0.77767	0.23862	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.00000	0.33322	0.18927
Ce	0.11067	0.77804	0.23836	O	0.66654	0.66679	0.18932	O	0.22134	0.55541	0.28400
Ce	0.77769	0.44440	0.23867	O	0.88890	0.88926	0.28611	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.44449	0.44431	0.23857	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.11084	0.44420	0.23833	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66664	0.00011	0.18939
Ce	0.77770	0.11111	0.23872	O	0.33344	0.66690	0.18945	O	0.88892	0.22220	0.28601
Ce	0.44434	0.11104	0.23862	O	0.55549	0.88898	0.28593	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33327	0.99987	0.18942
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.99905	0.66724	0.18922	O	0.55563	0.22247	0.28620
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.22199	0.88891	0.28613				

Table S18. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of (C_2H_3,β-C_2H_2)*.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.61333	0.14592	0.43240	Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.21183	0.90977	0.29232
H	0.36779	0.18514	0.45311	Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.38370	0.60843	0.40200	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.17686	0.51821	0.43329	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.66293	0.32777	0.19022
H	0.32656	0.57612	0.50167	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.89240	0.54794	0.29096
C	0.23766	0.54749	0.39690	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.31979	0.58016	0.43509	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.53358	0.19082	0.38587	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.33869	0.33615	0.19499
C	0.41730	0.19857	0.40095	O	0.99625	0.00471	0.18854	O	0.56488	0.54024	0.28965
Ce	0.11085	0.10983	0.24053	O	0.21507	0.22693	0.28681	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77625	0.77992	0.23900	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44434	0.77988	0.24416	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.99759	0.33460	0.18853
Ce	0.10659	0.78641	0.24483	O	0.67454	0.66289	0.19067	O	0.22236	0.54645	0.31444
Ce	0.77865	0.44398	0.23996	O	0.87419	0.89811	0.28926	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.45103	0.45013	0.23650	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.10241	0.44097	0.23823	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66094	0.01130	0.18956
Ce	0.78817	0.10533	0.23723	O	0.33359	0.65684	0.19403	O	0.88656	0.22337	0.28721
Ce	0.43958	0.10608	0.23861	O	0.56293	0.89566	0.28769	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33258	0.00644	0.18933
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.00155	0.65966	0.19281	O	0.56745	0.22340	0.31416

Table S19. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of δ-C_4H_5*

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.53826	0.14166	0.42081	Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.21159	0.90952	0.29285
H	0.34861	0.30531	0.48177	Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.45398	0.51654	0.43002	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.19044	0.51380	0.43813	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.66422	0.32575	0.19052
H	0.28864	0.65288	0.46605	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.89209	0.54860	0.29078
C	0.28406	0.48123	0.40427	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.34718	0.55680	0.43614	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.48615	0.23751	0.38850	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.33731	0.33340	0.19078
C	0.37406	0.33518	0.42420	O	0.99523	0.00418	0.18927	O	0.56710	0.54022	0.28895
Ce	0.11078	0.10991	0.24064	O	0.21685	0.22497	0.28615	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77659	0.77946	0.23968	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44458	0.77995	0.24475	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.99790	0.33424	0.18883
Ce	0.10682	0.78649	0.24464	O	0.67416	0.66470	0.19095	O	0.24793	0.51524	0.31812
Ce	0.77919	0.44438	0.24020	O	0.87386	0.89793	0.28961	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.45035	0.45111	0.23566	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.10574	0.43885	0.23862	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.65988	0.01379	0.19031
Ce	0.78713	0.10617	0.23784	O	0.33215	0.65864	0.19397	O	0.88666	0.22257	0.28762
Ce	0.43771	0.10808	0.23671	O	0.56159	0.89901	0.28906	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33257	0.00573	0.18897
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.00464	0.65860	0.19459	O	0.54204	0.24004	0.31598

Table S20. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R2 and R13.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
Ce	0.11039	0.11146	0.24008	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.55556	0.55556	0.00000
Ce	0.77873	0.77747	0.23786	O	0.99983	0.00091	0.18879	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.44621	0.77690	0.23879	O	0.21780	0.22234	0.28787	O	0.32708	0.33521	0.19208
Ce	0.10807	0.78729	0.23775	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.56296	0.56302	0.28718
Ce	0.77701	0.44534	0.23908	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.45216	0.43985	0.24297	O	0.66857	0.66829	0.18812	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.10749	0.43831	0.23758	O	0.89075	0.88914	0.28558	O	0.99956	0.33295	0.18890
Ce	0.77871	0.11056	0.23890	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.21178	0.56203	0.30868
Ce	0.44522	0.10909	0.23868	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.32722	0.67074	0.19196	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.55692	0.88820	0.28600	O	0.66824	0.99692	0.18828
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.89215	0.22031	0.28761
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.00692	0.66310	0.19091	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.21767	0.89267	0.28806	O	0.33361	0.99969	0.18999
Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000	O	0.56371	0.20672	0.28740
Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694	H	0.46010	0.36241	0.37809
Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.67260	0.33039	0.19042	H	0.23002	0.54906	0.36729
O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.89041	0.55397	0.28576				

Table S21. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R5.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.22600	0.46546	0.42741	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.51169	0.55579	0.36695	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67026	0.33488	0.19221
H	0.39588	0.51132	0.48138	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.89161	0.55065	0.28657
C	0.26550	0.51909	0.39183	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.36521	0.53749	0.41699	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.10995	0.11207	0.24064	O	0.99844	0.00116	0.18870	O	0.32762	0.33438	0.19302
Ce	0.77928	0.77735	0.23837	O	0.21565	0.22417	0.28944	O	0.56488	0.55856	0.31185
Ce	0.44162	0.78334	0.24041	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10685	0.78798	0.23901	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.78353	0.44064	0.23974	O	0.66656	0.66387	0.19131	O	0.99965	0.33223	0.18852
Ce	0.44902	0.43785	0.24665	O	0.88900	0.88999	0.28584	O	0.20672	0.55564	0.31434
Ce	0.10809	0.43718	0.23858	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77682	0.11075	0.23885	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44735	0.11004	0.23920	O	0.32786	0.67011	0.19551	O	0.66950	0.99659	0.18724
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.56093	0.89057	0.28679	O	0.89160	0.22265	0.28781
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00706	0.66325	0.19197	O	0.33337	0.00092	0.19123
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21164	0.89815	0.28919	O	0.56528	0.20404	0.28798
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S22. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R7.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.03862	0.51658	0.40294	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.23827	0.42243	0.43288	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.05017	0.70629	0.48471	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.66678	0.33331	0.18941
H	0.20516	0.59466	0.53143	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.89688	0.55335	0.30018
C	0.14321	0.51457	0.43171	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.13390	0.60787	0.48406	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.11179	0.11063	0.23871	O	0.00036	0.00033	0.18929	O	0.33483	0.33370	0.19060
Ce	0.77900	0.77765	0.24096	O	0.22519	0.21587	0.28648	O	0.55636	0.55357	0.28649
Ce	0.44426	0.77733	0.23904	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10985	0.77930	0.23965	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77767	0.44221	0.23985	O	0.67092	0.66339	0.19173	O	0.99731	0.33495	0.19071
Ce	0.44600	0.44236	0.23967	O	0.89008	0.89226	0.28780	O	0.21964	0.55291	0.29601
Ce	0.11197	0.44404	0.24186	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77763	0.11140	0.23931	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44412	0.11011	0.23887	O	0.33150	0.66455	0.19115	O	0.66645	0.00014	0.19050
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.55139	0.88967	0.28664	O	0.88724	0.22260	0.28681
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00092	0.66725	0.19113	O	0.33332	0.99869	0.18843
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.22237	0.88911	0.28598	O	0.55678	0.22285	0.28752

Table S23. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R8.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.23498	0.39291	0.39289	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.56778	0.54505	0.37255	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67014	0.33605	0.19181
H	0.34088	0.52006	0.50801	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.88777	0.55229	0.28778
C	0.24669	0.49807	0.38924	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.30875	0.53044	0.44484	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.10836	0.11075	0.24152	O	0.99756	0.00283	0.18807	O	0.32983	0.33274	0.19240
Ce	0.77688	0.77831	0.23846	O	0.21943	0.23928	0.30421	O	0.57042	0.55028	0.31312
Ce	0.43927	0.78685	0.24284	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10464	0.79037	0.23800	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.78643	0.44093	0.23799	O	0.67000	0.66068	0.19078	O	0.00293	0.32926	0.18991
Ce	0.44978	0.43637	0.24246	O	0.88846	0.89221	0.28642	O	0.20329	0.55770	0.31517
Ce	0.10738	0.43798	0.23964	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77685	0.11077	0.23910	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44917	0.11049	0.24058	O	0.32385	0.66735	0.19649	O	0.66958	0.99850	0.18695
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.56536	0.89467	0.28808	O	0.89177	0.22206	0.28850
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00512	0.66564	0.19208	O	0.32655	0.01243	0.19382
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.20225	0.90312	0.29136	O	0.56659	0.20578	0.28950
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S24. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R9.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.22619	0.20745	0.37329	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.41670	0.59163	0.40483	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67161	0.33343	0.19196
H	0.38176	0.49434	0.49400	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.87353	0.56236	0.28894
C	0.26114	0.53910	0.38986	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.35441	0.54463	0.43406	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.10465	0.10857	0.23904	O	0.99783	0.00180	0.18788	O	0.33311	0.32633	0.19622
Ce	0.77734	0.77711	0.23885	O	0.22367	0.21150	0.31310	O	0.55372	0.56767	0.29910
Ce	0.44345	0.77808	0.24026	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10323	0.79144	0.23734	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77682	0.44712	0.24024	O	0.66425	0.66688	0.18852	O	0.00095	0.32796	0.19195
Ce	0.45485	0.43760	0.24389	O	0.88748	0.89364	0.28754	O	0.20033	0.57674	0.32063
Ce	0.10217	0.44599	0.24129	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77741	0.11074	0.24059	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.45548	0.10624	0.23795	O	0.32524	0.67021	0.19421	O	0.66918	0.99696	0.18747
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.55892	0.89007	0.28660	O	0.89258	0.21714	0.28975
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00234	0.67002	0.19228	O	0.32931	0.00734	0.19184
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21163	0.89809	0.28890	O	0.56906	0.20279	0.29050
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S25. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R10.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.24318	0.29410	0.36639	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.35855	0.61808	0.41495	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.67304	0.33041	0.19129
H	0.40175	0.47322	0.48272	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.87597	0.56187	0.28705
C	0.26696	0.50731	0.38381	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.34915	0.53063	0.42925	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.10498	0.10950	0.24008	O	0.00004	0.00153	0.18867	O	0.33412	0.32860	0.19334
Ce	0.77782	0.77687	0.23832	O	0.23051	0.23730	0.31919	O	0.56343	0.56592	0.28783
Ce	0.44608	0.77830	0.23874	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10435	0.79052	0.23713	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77640	0.44801	0.23938	O	0.66556	0.67006	0.18676	O	0.00238	0.32649	0.19152
Ce	0.45584	0.43857	0.24392	O	0.88989	0.89228	0.28688	O	0.19978	0.56675	0.31860
Ce	0.10316	0.44505	0.23944	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77749	0.11061	0.24005	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.45258	0.10973	0.23880	O	0.32518	0.67136	0.19433	O	0.66866	0.99703	0.18810
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.55682	0.88816	0.28588	O	0.89420	0.21643	0.28937
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00350	0.67024	0.19161	O	0.32845	0.00827	0.19307
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21495	0.89597	0.28853	O	0.56804	0.20358	0.29021
Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S26. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R11.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.05502	0.57170	0.40313	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.25578	0.42667	0.40934	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.35866	0.62660	0.40821	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.66792	0.33449	0.18821
H	0.40110	0.48774	0.48102	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.89085	0.55351	0.29183
C	0.26243	0.51300	0.38806	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.34433	0.54502	0.42814	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.44444	0.44444	0.09694
Ce	0.11108	0.11142	0.23940	O	0.00001	0.00088	0.18885	O	0.32688	0.34672	0.19411
Ce	0.77692	0.77834	0.23959	O	0.20694	0.22793	0.28906	O	0.55901	0.55408	0.28591
Ce	0.44566	0.77799	0.23861	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.10518	0.78932	0.23855	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.77770	0.44428	0.23931	O	0.67021	0.66390	0.18903	O	0.99650	0.33529	0.18852
Ce	0.45575	0.43872	0.23931	O	0.89309	0.89091	0.28863	O	0.21196	0.55976	0.31218
Ce	0.10484	0.43931	0.23866	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.77755	0.11186	0.23959	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.44406	0.11123	0.24313	O	0.32936	0.66288	0.19289	O	0.67330	0.99618	0.19090
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.56101	0.87493	0.28812	O	0.88810	0.22298	0.28646
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.00568	0.66427	0.19239	O	0.33007	0.99652	0.18997
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.21873	0.88882	0.28812	O	0.56460	0.22920	0.28897

Table S27. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R15.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.50412	0.54134	0.37152	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.12626	0.61907	0.42833	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.67057	0.33488	0.19207
H	0.23182	0.44639	0.41659	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.89571	0.54074	0.28820
H	0.32250	0.65627	0.42835	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
H	0.37246	0.50859	0.49345	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.22131	0.54342	0.39925	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.32688	0.33503	0.19211
C	0.33034	0.55910	0.43572	O	0.00043	0.00162	0.18846	O	0.54790	0.55686	0.31808
Ce	0.11095	0.11146	0.23986	O	0.21762	0.22220	0.28850	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77855	0.77612	0.24188	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.43989	0.78558	0.23907	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.00000	0.33113	0.18804
Ce	0.10542	0.78850	0.23756	O	0.66060	0.65971	0.19302	O	0.21004	0.56012	0.31227
Ce	0.78491	0.43895	0.23960	O	0.89574	0.89432	0.28814	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.44830	0.43721	0.24184	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.10704	0.43824	0.23758	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66596	0.00170	0.18848
Ce	0.77662	0.10974	0.23939	O	0.33004	0.67050	0.19337	O	0.89222	0.22221	0.28825
Ce	0.44671	0.10922	0.23915	O	0.54408	0.89352	0.28768	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33148	0.00055	0.18898
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.01180	0.66054	0.19172	O	0.56230	0.20779	0.28993
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.21907	0.89368	0.28917				
Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000				

Table S28. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R17.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.07460	0.56182	0.39655	Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.09792	0.65862	0.47321	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.31886	0.56342	0.52153	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.66717	0.33347	0.18925
H	0.18037	0.48076	0.48039	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.90214	0.55849	0.30180
H	0.31313	0.64215	0.42933	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
H	0.39359	0.46523	0.43572	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.16524	0.56471	0.44349	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.33490	0.33374	0.19085
C	0.30497	0.55860	0.45432	O	0.00033	0.00092	0.18921	O	0.55723	0.55296	0.28670
Ce	0.11193	0.11087	0.23878	O	0.22520	0.21580	0.28653	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.78025	0.77751	0.24133	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44444	0.77778	0.23893	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.99653	0.33636	0.19128
Ce	0.11059	0.77917	0.23913	O	0.67188	0.66258	0.19220	O	0.22090	0.55722	0.29269
Ce	0.77694	0.44160	0.23943	O	0.89034	0.89253	0.28792	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.44542	0.44337	0.23979	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.11194	0.44541	0.24180	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66632	0.00058	0.19065
Ce	0.77754	0.11136	0.23941	O	0.33264	0.66541	0.19057	O	0.88686	0.22323	0.28695
Ce	0.44411	0.11029	0.23899	O	0.55079	0.89009	0.28668	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33321	0.99877	0.18833
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.00095	0.66783	0.19035	O	0.55701	0.22341	0.28777
Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.22263	0.88934	0.28631				

Table S29. Supercell lattice vectors (in Å) and optimized atomic fractional coordinates of the transition structure on R18.

a = 11.6361 a_x + 0.0000 a_y + 0.0000 a_z
b = 5.8180 b_x + 10.0771 b_y + 0.0000 b_z
c = 0.0000 c_x + 0.0000 c_y + 16.33384 c_z

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	0.58991	0.13572	0.42628	Ce	0.00000	0.66667	0.04847	O	0.21201	0.90969	0.29241
H	0.35300	0.24572	0.46444	Ce	0.66667	0.33333	0.04847	O	0.88889	0.55556	0.00000
H	0.40636	0.57812	0.40485	Ce	0.33333	0.33333	0.04847	O	0.77778	0.44444	0.09694
H	0.18283	0.50899	0.43439	Ce	0.00000	0.33333	0.04847	O	0.66403	0.32728	0.18980
H	0.31592	0.58972	0.50019	Ce	0.66667	0.00000	0.04847	O	0.89253	0.54793	0.29106
C	0.25404	0.52288	0.39780	Ce	0.33333	0.00000	0.04847	O	0.55556	0.55556	0.00000
C	0.33049	0.56460	0.43569	O	0.22222	0.22222	0.00000	O	0.44444	0.44444	0.09694
C	0.51624	0.21109	0.38489	O	0.11111	0.11111	0.09694	O	0.33904	0.33398	0.19312
C	0.39134	0.26910	0.41041	O	0.99612	0.00372	0.18906	O	0.56580	0.54023	0.28947
Ce	0.11096	0.10983	0.24057	O	0.21557	0.22603	0.28631	O	0.22222	0.55556	0.00000
Ce	0.77647	0.77982	0.23934	O	0.88889	0.88889	0.00000	O	0.11111	0.44444	0.09694
Ce	0.44432	0.78000	0.24405	O	0.77778	0.77778	0.09694	O	0.99764	0.33441	0.18854
Ce	0.10634	0.78704	0.24455	O	0.67458	0.66355	0.19088	O	0.23587	0.52763	0.31524
Ce	0.77891	0.44419	0.24013	O	0.87362	0.89789	0.28956	O	0.88889	0.22222	0.00000
Ce	0.45194	0.44965	0.23568	O	0.55556	0.88889	0.00000	O	0.77778	0.11111	0.09694
Ce	0.10364	0.43956	0.23834	O	0.44444	0.77778	0.09694	O	0.66034	0.01243	0.18984
Ce	0.78711	0.10611	0.23774	O	0.33315	0.65755	0.19431	O	0.88663	0.22290	0.28731
Ce	0.43841	0.10775	0.23816	O	0.56172	0.89791	0.28831	O	0.55556	0.22222	0.00000
Ce	0.00000	0.00000	0.04847	O	0.22222	0.88889	0.00000	O	0.44444	0.11111	0.09694
Ce	0.66667	0.66667	0.04847	O	0.11111	0.77778	0.09694	O	0.33258	0.00659	0.18915
Ce	0.33333	0.66667	0.04847	O	0.00257	0.65936	0.19370	O	0.56296	0.23119	0.31369