

Longueurs de liaison

1. Formation du catalyseur

Table 1 – Longueurs de liaison (Å) lors de l'activation du catalyseur par SiH₄. P1 correspond à l'atome de phosphore non coordonné dans les espèces asymétriques.

Ligand		Réactifs						VDW						TS					
		Cu-F	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-F	Cu-H	Si-F	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-F	Cu-H	Si-F	Si-H	Cu-P1	Cu-P2		
2 PH ₃		1.80	1.49	2.33	2.33	2.02	1.87	1.89	1.57	2.32	2.32	2.15	1.72	1.77	1.68	2.32	2.34		
BiEt-H	S	1.79	1.49	2.35	2.35	2.00	1.84	1.90	1.58	2.34	2.34	2.13	1.70	1.77	1.69	2.36	2.35		
	A	1.75	1.49	3.33	2.21	1.77	3.38	2.71	1.48	3.36	2.21	2.12	1.68	1.79	1.68	3.51	2.24		
BiEt-Me	S	1.80	1.49	2.34	2.34	2.03	1.86	1.89	1.57	2.32	2.32	2.22	1.69	1.77	1.68	2.37	2.31		
	A	1.78	1.49	3.18	2.21	1.80	3.26	2.73	1.48	3.19	2.21	2.14	1.68	1.79	1.67	3.60	2.25		
BiEt-Ph	S	1.83	1.49	2.41	2.28	2.08	1.82	1.92	1.57	2.33	2.32	2.22	1.70	1.78	1.67	2.35	2.33		
	A	1.79	1.49	3.15	2.21	1.81	3.65	2.76	1.48	3.10	2.22	2.14	1.69	1.79	1.67	3.94	2.25		
BiPh-H	S	1.79	1.49	2.35	2.35	2.01	1.83	1.89	1.58	2.33	2.34	2.14	1.70	1.77	1.68	2.36	2.35		
	A	1.76	1.49	3.17	2.21	1.78	3.46	2.70	1.48	3.09	2.21	2.12	1.67	1.79	1.69	4.11	2.24		
BiPh-Me	S	1.81	1.49	2.35	2.35	2.04	1.86	1.88	1.57	2.32	2.32	2.22	1.70	1.77	1.67	2.31	2.37		
	A	1.78	1.49	3.21	2.22	1.81	3.26	2.77	1.48	3.08	2.22	2.17	1.67	1.78	1.67	3.50	2.25		
BiPh-Ph	S	1.85	1.49	2.30	2.33	2.08	1.82	1.93	1.56	2.31	2.33	2.23	1.70	1.78	1.67	2.33	2.34		
	A	1.78	1.49	3.55	2.21	1.80	3.36	2.77	1.48	3.57	2.21	2.16	1.66	1.79	1.68	4.16	2.25		
BiNa-H	S	1.79	1.49	2.37	2.37	2.01	1.83	1.89	1.58	2.35	2.34	2.23	1.69	1.77	1.67	2.39	2.31		
	A	1.76	1.49	3.20	2.21	1.78	3.42	2.71	1.48	3.14	2.21	2.17	1.67	1.78	1.67	3.72	2.25		
BiNa-Me	S	1.81	1.49	2.35	2.36	2.04	1.85	1.88	1.57	2.33	2.33	2.14	1.70	1.77	1.68	2.37	2.36		
	A	1.78	1.49	3.23	2.21	1.80	3.30	2.77	1.48	3.24	2.22	2.12	1.68	1.79	1.68	3.92	2.24		
BiNa-Ph	S	1.78	1.49	3.55	2.20	1.80	3.49	2.74	1.48	3.55	2.21	2.16	1.67	1.79	1.67	3.85	2.24		
	A	1.83	1.49	2.49	2.26	2.08	1.82	1.93	1.56	2.31	2.33	2.23	1.70	1.78	1.67	2.33	2.34		

VDW!					Products!		
Cu-F!	Cu-H	Si-F!	Si-H!	Cu-P1!	Cu-P2!	Cu-H	Si-F! Cu-P1! Cu-P2!
2.69!	1.56!	1.64!	3.15!	2.39!	2.39!	1.55!	1.61! 2.41! 2.41!
2.79!	1.55!	1.63!	3.15!	2.46!	2.42!	1.54!	1.61! 2.50! 2.42!
2.78!	1.53!	1.63!	3.29!	3.47!	2.31!	1.52!	1.61! 3.19! 2.32!
3.28!	1.55!	1.63!	3.00!	2.43!	2.41!	1.55!	1.61! 2.46! 2.40!
2.89!	1.53!	1.63!	3.34!	3.47!	2.31!	1.53!	1.61! 3.24! 2.31!
2.81!	1.57!	1.64!	2.83!	2.38!	2.43!	1.56!	1.61! 2.42! 2.42!
3.44!	1.53!	1.63!	3.09!	3.36!	2.32!	1.53!	1.61! 3.07! 2.32!
2.96!	1.55!	1.64!	3.07!	2.43!	2.46!	1.54!	1.61! 2.46! 2.46!
2.79!	1.53!	1.63!	3.33!	3.00!	2.33!	1.52!	1.61! 3.09! 2.33!
2.53!	1.61!	1.68!	1.93!	2.40!	2.35!	1.56!	1.61! 2.43! 2.43!
3.08!	1.54!	1.63!	3.30!	2.99!	2.32!	1.53!	1.61! 3.04! 2.32!
2.78!	1.57!	1.64!	2.99!	2.40!	2.40!	1.56!	1.61! 2.42! 2.42!
3.03!	1.53!	1.63!	2.95!	4.01!	2.31!	1.53!	1.61! 3.85! 2.32!
3.06!	1.55!	1.63!	3.05!	2.49!	2.43!	1.54!	1.61! 2.47! 2.47!
2.82!	1.53!	1.63!	3.42!	3.19!	2.33!	1.52!	1.61! 3.22! 2.33!
2.88!	1.56!	1.64!	3.00!	2.42!	2.42!	1.56!	1.61! 2.44! 2.43!
3.00!	1.53!	1.63!	3.32!	3.28!	2.31!	1.53!	1.61! 3.20! 2.32!
3.17!	1.53!	1.63!	2.94!	3.95!	2.31!	1.53!	1.61! 3.90! 2.32!
2.81!	1.57!	1.64!	2.98!	2.40!	2.40!	1.56!	1.61! 2.42! 2.42!

Table 2 – Longueurs de liaison (Å) lors de l'activation du catalyseur par SiH₄. P1 et P3 correspondent respectivement à l'atome de phosphore non coordonné dans les espèces asymétriques et à l'atome de phosphore du PH₃.

Ligand, PH ₃ !	Réactifs!					VDW!							
	Cu-F	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-P3	Cu-F	Cu-H	Si-F1	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-P3	
3 PH ₃ !	1.85!	1.49!	2.39!	2.39!	2.39!	1.95!	3.11!	2.11!	1.50!	2.34!	2.37!	2.47!	
BIEt-H!	Si	1.86!	1.49!	2.35!	2.34!	2.61!	1.95!	3.19!	2.03!	1.50!	2.37!	2.41!	2.37!
	Al	1.77!	1.49!	3.36!	2.21!	3.99!	2.05!	1.88!	1.91!	1.56!	3.66!	2.31!	2.36!
BIEt-Me!	Si	1.92!	1.49!	2.40!	2.30!	2.47!	1.99!	3.17!	2.04!	1.50!	2.35!	2.38!	2.39!
	Al	1.79!	1.49!	3.17!	2.21!	4.19!	1.81!	3.23!	2.82!	1.48!	3.17!	2.21!	4.18!
BIEt-Ph!	Si	1.94!	1.49!	2.35!	2.42!	2.36!	1.96!	3.45!	2.45!	1.49!	2.37!	2.44!	2.37!
	Al	1.81!	1.49!	3.14!	2.22!	4.11!	1.82!	3.20!	2.83!	1.48!	3.20!	2.22!	4.07!
BIPh-H!	Si	1.87!	1.49!	2.34!	2.38!	2.48!	1.94!	3.46!	2.04!	1.49!	2.39!	2.40!	2.38!
	Al	1.87!	1.49!	2.35!	2.58!	2.33!	1.97!	2.67!	2.06!	1.51!	2.48!	2.36!	2.33!
BIPh-Me!	Si	1.94!	1.49!	2.28!	2.43!	2.47!	2.00!	3.21!	2.01!	1.50!	2.39!	2.34!	2.37!
	Al	1.80!	1.49!	3.12!	2.22!	3.97!	1.82!	3.26!	2.83!	1.48!	3.10!	2.22!	3.44!
BIPh-Ph!	Si	1.98!	1.49!	2.32!	2.35!	2.43!	1.97!	3.54!	2.53!	1.48!	2.37!	2.40!	2.38!
	Al	1.80!	1.49!	3.47!	2.21!	3.81!	1.81!	3.48!	2.86!	1.48!	3.50!	2.21!	3.81!

TS!					VDW!					Produits!				
Cu-F	Cu-H	Si-F!	Si-H	Cu-P1!	Cu-P2!	Cu-P3!	Cu-F	Cu-H	Si-F!	Si-H!	Cu-P1!	Cu-P2!	Cu-P3!	Cu-P3!
2.17!	2.19!	1.93!	1.53!	2.43!	2.43!	2.33!	3.45!	1.58!	1.63!	2.98!	2.41!	2.41!	2.42!	2.42!
2.16!	1.69!	1.78!	1.68!	2.36!	2.36!	4.13!	3.76!	1.58!	1.63!	3.26!	2.42!	2.47!	2.44!	2.44!
2.17!	1.73!	1.78!	1.67!	3.85!	2.31!	2.40!	2.88!	1.56!	1.63!	3.14!	3.39!	2.36!	2.43!	2.74!
2.22!	1.69!	1.77!	1.67!	2.36!	2.33!	4.44!	3.35!	1.59!	1.63!	2.95!	2.41!	2.41!	2.50!	2.48!
2.16!	1.68!	1.79!	1.67!	3.71!	2.25!	3.93!	3.02!	1.54!	1.63!	3.44!	3.58!	2.31!	3.21!	3.23!
2.23!	1.70!	1.79!	1.66!	2.33!	2.35!	5.74!	4.12!	1.60!	1.63!	2.88!	2.46!	2.38!	2.43!	2.45!
2.17!	1.68!	1.79!	1.67!	3.72!	2.26!	4.06!	2.93!	1.54!	1.63!	3.33!	2.95!	2.32!	4.38!	2.55!
2.16!	1.70!	1.78!	1.68!	2.35!	2.35!	4.08!	3.84!	1.57!	1.63!	3.00!	2.43!	2.45!	2.45!	2.43!
2.18!	1.71!	1.77!	1.68!	3.95!	2.33!	2.35!	2.78!	1.54!	1.63!	3.31!	3.13!	2.32!	3.33!	3.32!
2.21!	1.71!	1.77!	1.67!	2.34!	2.33!	4.72!	2.84!	1.57!	1.63!	2.99!	2.42!	2.40!	3.93!	2.48!
2.18!	1.67!	1.79!	1.67!	3.50!	2.25!	4.27!	3.03!	1.53!	1.63!	2.91!	4.01!	2.31!	4.19!	3.55!
2.25!	1.70!	1.79!	1.67!	2.34!	2.33!	5.85!	4.53!	1.60!	1.62!	3.04!	2.40!	2.41!	2.45!	2.46!
2.17!	1.68!	1.79!	1.66!	2.25!	3.97!	3.88!	3.10!	1.53!	1.63!	2.99!	4.09!	2.32!	3.94!	3.73!

Table 3 – Longueurs de liaison (Å) lors de l'activation du catalyseur par HSiMe_3 et HSi(OMe)_3 .

HSiMe ₃ †	Réactifs†			VDW†			TS†									
	Cu-F	Si-H	Cu-P1 Cu-P2	Cu-F	Cu-H	Si-F Si-H	Cu-P1 Cu-P2	Cu-F	Cu-H	Si-F Si-H Cu-P1 Cu-P2						
BiEt-H†	1.79†	1.49†	2.35†	2.35†	1.83†	2.51†	3.23†	1.51†	2.35†	2.35†	2.13†	1.67†	1.80†	1.73†	2.36†	2.36†
BiEt-Me†	1.80†	1.49†	2.34†	2.34†	2.03†	1.80†	1.95†	1.59†	2.33†	2.33†	2.21†	1.67†	1.80†	1.72†	2.32†	2.38†
BiEt-Ph†	1.83†	1.49†	2.41†	2.28†	1.93†	1.97†	3.19†	1.52†	2.33†	2.34†	2.20†	1.68†	1.82†	1.71†	2.36†	2.33†
HSi(OMe) ₃ †	Réactifs†			VDW†			TS†									
	Cu-F	Si-H	Cu-P1 Cu-P2	Cu-F	Cu-H	Si-F Si-H	Cu-P1 Cu-P2	Cu-F	Cu-H	Si-F Si-H Cu-P1 Cu-P2						
BiEt-H†	1.79†	1.48†	2.35†	2.35†	1.85†	2.49†	3.32†	1.48†	2.32†	2.39†	2.18†	1.71†	1.77†	1.61†	2.39†	2.30†
BiEt-Me†	1.80†	1.48†	2.34†	2.34†	2.17†	1.78†	1.81†	1.56†	2.29†	2.37†	2.19†	1.73†	1.77†	1.59†	2.35†	2.30†
BiEt-Ph†	1.83†	1.48†	2.41†	2.28†	2.14†	1.76†	1.80†	1.57†	2.33†	2.32†	2.21†	1.70†	1.78†	1.59†	2.33†	2.31†

VDW					Produits				
VDW					Produits				
Cu-F	Cu-H	Si-F	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-H	Si-F	Cu-P1	Cu-P2
3.57	1.54	1.65	4.06	2.51	2.41	1.54	1.63	2.50	2.42
3.97	1.56	1.65	4.18	2.38	2.48	1.55	1.63	2.46	2.40
3.25	1.57	1.65	3.73	2.39	2.45	1.56	1.63	2.42	2.42
VDW					Produits				
Cu-F	Cu-H	Si-F	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-H	Si-F	Cu-P1	Cu-P2
3.15	1.54	1.62	4.07	2.50	2.41	1.54	1.60	2.50	2.42
3.56	1.56	1.62	4.14	2.46	2.39	1.55	1.60	2.46	2.40
2.97	1.57	1.62	3.75	2.39	2.45	1.56	1.60	2.42	2.42

Table 4 – Longueurs de liaison (Å) en fonction de la nature de l'atome d'halogène lors de l'activation du catalyseur par SiH_4 .

[BiEt-H]CuX	Réactifs				VDW				TS							
	Cu-X	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-X	Cu-H	Si-X	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-X	Cu-H	Si-X	Si-H	Cu-P1	Cu-P2
X = F	1.79	1.49	2.35	2.35	2.00	1.84	1.90	1.58	2.34	2.34	2.13	1.70	1.77	1.69	2.36	2.35
X = Cl	2.19	1.49	2.38	2.38	2.21	2.52	3.80	1.49	2.39	2.37	2.72	1.60	2.19	1.96	2.38	2.40
X = I	2.52	1.49	2.39	2.39	2.52	4.24	4.66	1.49	2.38	2.39	3.11	1.58	2.58	2.12	2.38	2.40
[BiEt-Me]CuX	Réactifs				VDW				TS							
	Cu-X	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-X	Cu-H	Si-X	Si-H	Cu-P1	Cu-P2	Cu-X	Cu-H	Si-X	Si-H	Cu-P1	Cu-P2
X = F	1.80	1.49	2.34	2.34	2.03	1.86	1.89	1.57	2.32	2.32	2.22	1.69	1.77	1.68	2.37	2.31
X = Cl	2.22	1.49	2.36	2.36	2.23	3.19	3.76	1.49	2.38	2.35	2.91	1.59	2.15	2.10	2.38	2.38
X = I	2.55	1.49	2.36	2.36	2.55	4.13	4.59	1.49	2.37	2.36	3.26	1.58	2.56	2.22	2.36	2.40

VDW			Produits		
Cu-X	Cu-H	Si-X	Cu-P1	Cu-P2	Cu-P2
2.79	1.55	1.63	3.15	2.46	2.42
3.38	1.54	2.10	3.23	2.48	2.41
3.71	1.55	2.51	3.16	2.49	2.40
VDW			Produits		
Cu-X	Cu-H	Si-X	Cu-P1	Cu-P2	Cu-P2
3.28	1.55	1.63	3.00	2.43	2.41
3.68	1.56	2.10	3.20	2.43	2.41
3.89	1.59	2.51	3.11	2.43	2.40

2. Cycle catalytique

Dans les tables suivantes, P1 et P2 correspondent aux atomes de phosphore du ligand diphosphine alors que P3 correspond à l'atome de phosphore du ligand PH_3 .

Table 5 – Longueurs de liaison (Å) lors de la réaction non-catalysée.

SiH ₄	Réactifs			TS			Produits		
	C-O	C-H	Si-H	Si-O	C-O	C-H	Si-H	Si-O	
H ₂ CO	1.21	-	1.48	-	1.29	1.44	1.62	2.07	1.42 1.10 - 1.66
MeHCO	1.21	-	1.48	-	1.29	1.48	1.62	2.03	1.44 1.10 - 1.66
Me ₂ CO	1.22	-	1.48	-	1.30	1.50	1.62	2.01	1.43 1.10 - 1.66
PhMeCO	1.22	-	1.48	-	1.31	1.52	1.63	1.99	1.43 1.10 - 1.66
HSiMe ₃	Réactifs			TS			Produits		
	C-O	C-H	Si-H	Si-O	C-O	C-H	Si-H	Si-O	
H ₂ CO	1.21	-	1.49	-	1.29	1.39	1.65	2.20	1.42 1.09 - 1.68
Me ₂ CO	1.22	-	1.49	-	1.30	1.45	1.64	2.15	1.43 1.10 - 1.68
Hsi(OMe) ₃	Réactifs			TS			Produits		
	C-O	C-H	Si-H	Si-O	C-O	C-H	Si-H	Si-O	
H ₂ CO	1.21	-	1.48	-	1.28	1.45	1.61	2.23	1.42 1.09 - 1.64
Me ₂ CO	1.22	-	1.48	-	1.29	1.54	1.59	2.10	1.44 1.10 - 1.64

Table 6 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}(\text{PH}_3)_2$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2					
H ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H ₂ CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.63	-	Cu-H	-	1.63	1.61	1.56	1.55
Cu-O	-	2.55	2.29	1.81	Cu-O	1.81	2.21	2.24	2.53	-
C-O	1.21	1.23	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.95	2.06	3.32	-
C-H	-	2.66	1.80	1.11	Si-O	-	1.74	1.73	1.69	1.66
P1-Cu	2.41	2.40	2.36	2.22	P1-Cu	2.22	2.36	2.36	2.44	2.41
P2-Cu	2.41	2.40	2.30	2.27	P2-Cu	2.27	2.36	2.36	2.37	2.41
MeHCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H ₂ CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.59	1.64	-	Cu-H	-	1.91	1.62	1.56	1.55
Cu-O	-	2.90	2.25	1.81	Cu-O	1.81	2.01	2.23	2.57	-
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.57	2.05	3.26	-
C-H	-	3.13	1.77	1.11	Si-O	-	1.95	1.73	1.69	1.66
P1-Cu	2.41	2.40	2.36	2.22	P1-Cu	2.22	2.33	2.36	2.44	2.41
P2-Cu	2.41	2.41	2.30	2.27	P2-Cu	2.27	2.35	2.36	2.37	2.41
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H ₂ CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.66	-	Cu-H	-	1.92	1.61	1.56	1.55
Cu-O	-	2.86	2.18	1.82	Cu-O	1.82	2.00	2.24	2.60	-
C-O	1.22	1.22	1.28	1.40	Si-H	1.48	1.57	2.09	3.22	-
C-H	-	3.29	1.74	1.11	Si-O	-	1.96	1.73	1.68	1.66
P1-Cu	2.41	2.41	2.34	2.22	P1-Cu	2.22	2.34	2.36	2.43	2.41
P2-Cu	2.41	2.40	2.32	2.27	P2-Cu	2.27	2.34	2.36	2.37	2.41
PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H ₂ CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.66	-	Cu-H	-	-	-	-	1.55
Cu-O	-	2.99	2.19	1.87	Cu-O	1.87	-	-	-	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	-	-	-	-
C-H	-	3.65	1.76	1.11	Si-O	-	-	-	-	1.66
P1-Cu	2.41	2.44	2.32	2.32	P1-Cu	2.32	-	-	-	2.41
P2-Cu	2.41	2.38	2.32	2.36	P2-Cu	2.36	-	-	-	2.41

Table 7 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}(\text{PH}_3)_3$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2				
H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.58	1.59	1.66	-	Cu-H	-	1.64	1.62	1.58
Cu-O	-	3.62	3.34	1.91	Cu-O	1.91	2.21	2.25	4.48
C-O	1.21	1.22	1.25	1.39	Si-H	1.48	1.88	2.05	3.74
C-H	-	2.54	1.63	1.11	Si-O	-	1.75	1.73	1.67
P1-Cu	2.42	2.42	2.40	2.35	P1-Cu	2.35	2.36	2.35	2.41
P2-Cu	2.42	2.42	2.40	2.34	P2-Cu	2.34	2.34	2.38	2.42
P3-Cu	2.42	2.40	2.35	2.58	P3-Cu	2.58	5.67	5.21	2.43
MeHCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.58	1.58	1.67	-	Cu-H	-	2.88	1.61	1.58
Cu-O	-	3.80	3.33	1.91	Cu-O	1.91	1.98	2.25	4.57
C-O	1.21	1.22	1.26	1.39	Si-H	1.48	1.50	2.11	3.84
C-H	-	3.03	1.59	1.11	Si-O	-	2.13	1.72	1.67
P1-Cu	2.42	2.42	2.41	2.35	P1-Cu	2.35	2.45	2.6	2.40
P2-Cu	2.42	2.42	2.40	2.34	P2-Cu	2.34	2.40	2.36	2.42
P3-Cu	2.42	2.42	2.34	2.57	P3-Cu	2.57	2.38	5.61	2.43
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.58	1.58	1.66	-	Cu-H	-	2.89	1.61	1.58
Cu-O	-	3.86	3.33	1.92	Cu-O	1.92	1.98	2.25	4.80
C-O	1.22	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.50	2.13	4.05
C-H	-	3.28	1.56	1.11	Si-O	-	2.19	2.25	1.67
P1-Cu	2.42	2.42	2.41	2.38	P1-Cu	2.38	2.49	2.37	2.41
P2-Cu	2.42	2.42	2.41	2.33	P2-Cu	2.33	2.41	2.36	2.42
P3-Cu	2.42	2.42	2.34	2.57	P3-Cu	2.57	2.37	6.27	2.43

Table 8 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-H}]$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2				
H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.64	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.54
Cu-O	-	2.77	2.19	1.83	Cu-O	1.83	2.17	2.24	4.10
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.87	2.10	5.53
C-H	-	2.73	1.78	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67
P1-Cu	2.50	2.45	2.36	2.41	P1-Cu	2.41	2.40	2.42	2.56
P2-Cu	2.42	2.48	2.35	2.32	P2-Cu	2.32	2.37	2.37	2.39
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO ax	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.64	-	Cu-H	-	1.63	1.60	1.54
Cu-O	-	3.47	2.16	1.83	Cu-O	1.83	2.18	2.23	4.32
C-O	1.21	1.22	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.89	2.12	6.21
C-H	-	3.29	1.75	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67
P1-Cu	2.50	2.49	2.35	2.28	P1-Cu	2.28	2.36	2.36	2.56
P2-Cu	2.42	2.42	2.35	2.52	P2-Cu	2.52	2.41	2.43	2.39
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO eq	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.64	-	Cu-H	-	1.63	1.60	1.54
Cu-O	-	3.08	2.17	1.83	Cu-O	1.83	2.18	2.23	4.32
C-O	1.21	1.22	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.89	2.12	6.21
C-H	-	3.27	1.75	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67
P1-Cu	2.50	2.45	2.35	2.28	P1-Cu	2.28	2.36	2.36	2.56
P2-Cu	2.42	2.43	2.35	2.52	P2-Cu	2.52	2.41	2.43	2.39
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	Me ₂ CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.54	1.65	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.54
Cu-O	-	3.81	2.15	1.83	Cu-O	1.83	2.17	2.23	4.33
C-O	1.22	1.22	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.88	2.11	6.22
C-H	-	3.64	1.73	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.66
P1-Cu	2.50	2.53	2.35	2.50	P1-Cu	2.50	2.41	2.43	2.56
P2-Cu	2.42	2.39	2.35	2.29	P2-Cu	2.29	2.36	2.36	2.39
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(R) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.65	-	Cu-H	-	1.65	1.58	1.57
Cu-O	-	3.13	2.15	1.84	Cu-O	1.84	2.16	2.30	2.41
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.82	2.33	2.79
C-H	-	3.67	1.75	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.69
P1-Cu	2.50	2.42	2.34	2.30	P1-Cu	2.30	2.39	2.37	2.40
P2-Cu	2.42	2.46	2.36	2.45	P2-Cu	2.45	2.36	2.43	2.44
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(S) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.54	1.65	-	Cu-H	-	1.63	1.61	1.54
Cu-O	-	4.07	2.15	1.84	Cu-O	1.84	2.20	2.24	4.38
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.91	2.06	6.11
C-H	-	4.05	1.75	1.11	Si-O	-	1.75	1.73	1.67
P1-Cu	2.50	2.40	2.34	2.28	P1-Cu	2.28	2.41	2.43	2.53
P2-Cu	2.42	2.53	2.36	2.50	P2-Cu	2.50	2.37	2.37	2.39

Table 9 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-Me}]$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2					
H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.57	1.63	-	Cu-H	-	1.67	1.60	1.55	1.55
Cu-O	-	2.83	2.28	1.84	Cu-O	1.84	2.18	2.33	3.65	-
C-O	1.21	1.23	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.79	2.27	3.66	-
C-H	-	2.63	1.82	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.68	1.66
P1-Cu	2.46	2.39	2.36	2.31	P1-Cu	2.31	2.38	2.40	2.47	2.46
P2-Cu	2.40	2.43	2.33	2.40	P2-Cu	2.40	2.35	2.37	2.39	2.40
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO ax	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.59	1.56	1.55
Cu-O	-	3.25	2.25	1.84	Cu-O	1.84	2.18	2.34	3.42	-
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.79	2.33	3.82	-
C-H	-	3.17	1.79	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.44	2.36	2.26	P1-Cu	2.26	2.38	2.36	2.48	2.46
P2-Cu	2.40	2.38	2.34	2.51	P2-Cu	2.51	2.35	2.51	2.39	2.40
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO eq	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.59	1.56	1.55
Cu-O	-	3.24	2.25	1.84	Cu-O	1.84	2.18	2.34	3.42	-
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.79	2.33	3.82	-
C-H	-	3.16	1.79	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.44	2.37	2.26	P1-Cu	2.26	2.38	2.36	2.48	2.46
P2-Cu	2.40	2.38	2.33	2.51	P2-Cu	2.51	2.35	2.51	2.39	2.40
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	Me_2CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.65	1.61	1.65	1.55
Cu-O	-	3.98	2.22	1.85	Cu-O	1.85	2.20	2.28	2.20	-
C-O	1.22	1.22	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.85	2.15	1.85	-
C-H	-	3.50	1.77	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.75	1.66
P1-Cu	2.46	2.39	2.33	2.46	P1-Cu	2.46	2.38	2.35	2.37	2.46
P2-Cu	2.40	2.45	2.35	2.28	P2-Cu	2.28	2.35	2.41	2.36	2.40
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(R) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.68	1.61	1.56	1.55
Cu-O	-	4.17	2.22	1.85	Cu-O	1.85	2.20	2.35	3.51	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.78	2.21	3.37	-
C-H	-	4.03	1.79	1.11	Si-O	-	1.77	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.39	2.34	2.54	P1-Cu	2.54	2.36	2.39	2.37	2.46
P2-Cu	2.40	2.46	2.35	2.56	P2-Cu	2.56	2.35	2.37	2.49	2.40
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(S) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.55	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.68	1.60	1.56	1.55
Cu-O	-	4.27	2.24	1.87	Cu-O	1.87	2.20	2.37	5.22	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.78	2.24	6.20	-
C-H	-	4.01	1.80	1.11	Si-O	-	1.77	1.71	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.39	2.33	2.35	P1-Cu	2.35	2.39	2.42	2.46	2.46
P2-Cu	2.40	2.47	2.36	2.36	P2-Cu	2.36	2.34	2.36	2.40	2.40

Table 10 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-Ph}]$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2					
H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.56	1.58	1.62	-	Cu-H	-	1.68	1.60	1.58	1.56
Cu-O	-	2.62	2.33	1.87	Cu-O	1.87	2.22	2.28	2.47	-
C-O	1.21	1.23	1.26	1.39	Si-H	1.48	1.77	2.22	3.03	-
C-H	-	2.43	1.91	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.68	1.66
P1-Cu	2.42	2.41	2.36	2.31	P1-Cu	2.31	2.36	2.35	2.40	2.42
P2-Cu	2.42	2.40	2.36	2.38	P2-Cu	2.38	2.37	2.40	2.39	2.42
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO ax	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.63	-	Cu-H	-	1.68	1.60	1.57	1.56
Cu-O	-	3.17	2.28	1.88	Cu-O	1.88	2.23	2.37	2.77	-
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.75	2.38	3.00	-
C-H	-	2.90	1.85	1.11	Si-O	-	1.77	1.71	1.68	1.66
P1-Cu	2.42	2.40	2.36	2.46	P1-Cu	2.46	2.38	2.38	2.46	2.42
P2-Cu	2.42	2.43	2.36	2.28	P2-Cu	2.28	2.36	2.41	2.39	2.42
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO eq	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.63	-	Cu-H	-	1.68	1.60	1.57	1.56
Cu-O	-	3.20	2.29	1.88	Cu-O	1.88	2.23	2.37	2.77	-
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.75	2.38	3.00	-
C-H	-	2.92	1.84	1.11	Si-O	-	1.77	1.71	1.68	1.66
P1-Cu	2.42	2.39	2.38	2.46	P1-Cu	2.46	2.38	2.38	2.46	2.42
P2-Cu	2.42	2.44	2.35	2.28	P2-Cu	2.28	2.36	2.41	2.39	2.42
Me ₂ CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	Me ₂ CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.56	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.68	1.57	1.56	1.56
Cu-O	-	4.94	2.25	1.88	Cu-O	1.88	2.22	2.98	4.56	-
C-O	1.22	1.22	1.28	1.40	Si-H	1.48	1.78	2.09	4.02	-
C-H	-	3.51	1.81	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.67	1.66
P1-Cu	2.42	2.45	2.35	2.46	P1-Cu	2.46	2.38	2.38	2.42	2.42
P2-Cu	2.42	2.40	2.36	2.28	P2-Cu	2.28	2.37	2.41	2.43	2.42
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(R) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.68	1.61	1.56	1.56
Cu-O	-	2.94	2.28	1.88	Cu-O	1.88	2.22	2.33	4.07	-
C-O	1.22	1.23	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.76	2.14	3.54	-
C-H	-	3.36	1.83	1.11	Si-O	-	1.77	1.72	1.68	1.66
P1-Cu	2.42	2.43	2.36	2.45	P1-Cu	2.45	2.37	2.39	2.47	2.42
P2-Cu	2.42	2.39	2.35	2.28	P2-Cu	2.28	2.37	2.39	2.40	2.42
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(S) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.60	1.58	1.56
Cu-O	-	3.63	2.27	1.89	Cu-O	1.89	2.21	2.38	2.50	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.77	2.24	3.18	-
C-H	-	3.54	1.83	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.68	1.66
P1-Cu	2.42	2.39	2.35	2.43	P1-Cu	2.43	2.36	2.38	2.47	2.42
P2-Cu	2.42	2.46	2.37	2.28	P2-Cu	2.28	2.38	2.40	2.38	2.42

Table 11 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiPh-H}]$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2				
H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.63	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.55 1.54
Cu-O	-	2.58	2.28	1.83	Cu-O	1.83	2.19	2.25	2.86 -
C-O	1.21	1.23	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.88	2.16	3.43 -
C-H	-	2.66	1.77	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.68 1.66
P1-Cu	2.46	2.43	2.31	2.44	P1-Cu	2.44	2.38	2.39	2.42 2.46
P2-Cu	2.46	2.45	2.42	2.30	P2-Cu	2.30	2.38	2.39	2.47 2.46
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO ax	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.64	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.56 1.54
Cu-O	-	4.00	2.21	1.84	Cu-O	1.84	2.18	2.23	2.48 -
C-O	1.21	1.22	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.86	2.12	3.29 -
C-H	-	3.27	1.74	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.69 1.66
P1-Cu	2.46	2.44	2.31	2.32	P1-Cu	2.32	2.37	2.38	2.47 2.46
P2-Cu	2.46	2.45	2.40	2.42	P2-Cu	2.42	2.38	2.39	2.42 2.46
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO eq	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.64	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.56 1.54
Cu-O	-	3.97	2.21	1.84	Cu-O	1.84	2.18	2.23	2.48 -
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.86	2.12	3.29 -
C-H	-	3.22	1.74	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.69 1.66
P1-Cu	2.46	2.44	2.31	2.32	P1-Cu	2.32	2.37	2.38	2.47 2.46
P2-Cu	2.46	2.45	2.39	2.42	P2-Cu	2.42	2.38	2.39	2.42 2.46
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	Me_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.64	-	Cu-H	-	2.99	1.64	1.57 1.54
Cu-O	-	4.11	2.18	1.84	Cu-O	1.84	1.88	2.17	2.43 -
C-O	1.22	1.22	1.28	1.40	Si-H	1.48	1.49	1.86	2.97 -
C-H	-	3.51	1.73	1.11	Si-O	-	2.39	1.75	1.69 1.66
P1-Cu	2.46	2.44	2.32	2.43	P1-Cu	2.43	2.41	2.38	2.46 2.46
P2-Cu	2.46	2.44	2.38	2.31	P2-Cu	2.31	2.33	2.38	2.40 2.46
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(R) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.64	-	Cu-H	-	1.66	1.58	1.55 1.54
Cu-O	-	4.41	2.18	1.86	Cu-O	1.86	2.17	2.36	3.03 -
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.81	2.43	3.47 -
C-H	-	4.01	1.75	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.68 1.66
P1-Cu	2.46	2.43	2.33	2.33	P1-Cu	2.33	2.38	2.45	2.48 2.46
P2-Cu	2.46	2.46	2.38	2.40	P2-Cu	2.40	2.36	2.37	2.41 2.46
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(S) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.54	1.55	1.65	-	Cu-H	-	1.66	1.59	1.55 1.54
Cu-O	-	4.41	2.16	1.85	Cu-O	1.85	2.17	2.31	3.58 -
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.81	2.33	3.58 -
C-H	-	3.96	1.75	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.67 1.66
P1-Cu	2.46	2.45	2.36	2.33	P1-Cu	2.33	2.37	2.39	2.44 2.46
P2-Cu	2.46	2.45	2.33	2.39	P2-Cu	2.39	2.38	2.40	2.45 2.46

Table 12 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiPh-Me}]$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2				
H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.63	-	Cu-H	-	1.66	1.60	1.56
Cu-O	-	2.98	2.33	1.82	Cu-O	1.82	2.23	2.36	3.05
C-O	1.21	1.22	1.26	1.40	Si-H	1.48	1.79	2.24	3.40
C-H	-	2.60	1.83	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.68
P1-Cu	2.43	2.40	2.32	2.23	P1-Cu	2.23	2.34	2.39	2.46
P2-Cu	2.43	2.41	2.37	2.23	P2-Cu	2.23	2.38	2.38	2.39
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO ax	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.56	1.63	-	Cu-H	-	1.68	1.59	1.56
Cu-O	-	3.99	2.29	1.82	Cu-O	1.82	2.19	2.36	2.90
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.78	2.30	3.31
C-H	-	3.13	1.80	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.68
P1-Cu	2.43	2.44	2.32	2.23	P1-Cu	2.23	2.35	2.38	2.46
P2-Cu	2.43	2.40	2.37	2.23	P2-Cu	2.23	2.35	2.39	2.39
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO eq	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.68	1.59	1.56
Cu-O	-	3.41	2.29	1.82	Cu-O	1.82	2.19	2.36	2.90
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.78	2.30	3.31
C-H	-	3.07	1.79	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.68
P1-Cu	2.43	2.43	2.33	2.23	P1-Cu	2.23	2.35	2.38	2.46
P2-Cu	2.43	2.41	2.39	2.23	P2-Cu	2.23	2.35	2.39	2.39
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	Me_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.66	1.60	1.56
Cu-O	-	4.19	2.26	1.86	Cu-O	1.86	2.20	2.34	3.36
C-O	1.22	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.82	2.14	3.68
C-H	-	3.49	1.64	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67
P1-Cu	2.43	2.45	2.36	2.52	P1-Cu	2.52	2.35	2.39	2.52
P2-Cu	2.43	2.39	2.33	2.27	P2-Cu	2.27	2.36	2.37	2.37
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(R) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.68	1.58	1.55
Cu-O	-	4.64	2.24	1.88	Cu-O	1.88	2.20	2.50	3.69
C-O	1.22	1.23	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.75	2.30	3.48
C-H	-	4.02	1.80	1.11	Si-O	-	1.77	1.71	1.67
P1-Cu	2.43	2.46	2.34	2.39	P1-Cu	2.39	2.38	2.38	2.52
P2-Cu	2.43	2.39	2.35	2.32	P2-Cu	2.32	2.33	2.38	2.36
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(S) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.69	1.60	1.56
Cu-O	-	4.40	2.27	1.88	Cu-O	1.88	2.19	2.39	3.35
C-O	1.22	1.23	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.74	2.23	3.67
C-H	-	3.90	1.79	1.11	Si-O	-	1.77	1.71	1.68
P1-Cu	2.43	2.43	2.33	2.35	P1-Cu	2.35	2.35	2.38	2.47
P2-Cu	2.43	2.40	2.35	2.34	P2-Cu	2.34	2.36	2.38	2.38

Table 13 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiPh-Ph}]$ et le silane SiH_4 .

Etape 1					Etape 2				
H_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.62	-	Cu-H	-	1.68	1.60	1.57 1.56
Cu-O	-	2.76	2.33	1.87	Cu-O	1.87	2.21	2.39	2.98 -
C-O	1.21	1.23	1.26	1.39	Si-H	1.48	1.76	2.30	3.13 -
C-H	-	2.50	1.91	1.11	Si-O	-	1.77	1.71	1.68 1.66
P1-Cu	2.42	2.42	2.36	2.29	P1-Cu	2.29	2.36	2.37	2.45 2.42
P2-Cu	2.42	2.38	2.34	2.44	P2-Cu	2.44	2.36	2.40	2.37 2.42
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO ax	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.63	-	Cu-H	-	1.67	1.59	1.56 1.56
Cu-O	-	3.07	2.30	1.87	Cu-O	1.87	2.24	2.58	4.00 -
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.77	2.25	3.47 -
C-H	-	2.95	1.85	1.10	Si-O	-	1.77	1.71	1.68 1.66
P1-Cu	2.42	2.43	2.35	2.41	P1-Cu	2.41	2.36	2.37	2.46 2.42
P2-Cu	2.42	2.39	2.34	2.30	P2-Cu	2.30	2.36	2.42	2.38 2.42
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS1	Int	MeHCO eq	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.63	-	Cu-H	-	1.67	1.59	1.56 1.56
Cu-O	-	3.15	2.31	1.87	Cu-O	1.87	2.24	2.58	4.00 -
C-O	1.21	1.22	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.77	2.25	3.47 -
C-H	-	2.99	1.84	1.10	Si-O	-	1.77	1.71	1.68 1.66
P1-Cu	2.42	2.42	2.36	2.41	P1-Cu	2.41	2.36	2.37	2.46 2.42
P2-Cu	2.42	2.38	2.33	2.30	P2-Cu	2.30	2.36	2.42	2.38 2.42
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS1	Int	Me_2CO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.59	1.56 1.56
Cu-O	-	3.27	2.27	1.88	Cu-O	1.88	2.25	2.58	4.01 -
C-O	1.22	1.22	1.28	1.40	Si-H	1.48	1.77	2.31	3.53 -
C-H	-	3.25	1.81	1.11	Si-O	-	1.76	1.71	1.67 1.66
P1-Cu	2.42	2.44	2.36	2.40	P1-Cu	2.40	2.36	2.37	2.43 2.42
P2-Cu	2.42	2.38	2.34	2.30	P2-Cu	2.30	2.37	2.42	2.41 2.42
(R) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(R) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.66	1.61	1.56 1.56
Cu-O	-	2.83	2.32	1.89	Cu-O	1.89	2.28	2.40	4.96 -
C-O	1.22	1.23	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.82	2.12	5.07 -
C-H	-	3.90	1.84	1.11	Si-O	-	1.76	1.72	1.67 1.66
P1-Cu	2.42	2.44	2.37	2.40	P1-Cu	2.40	2.37	2.37	2.45 2.42
P2-Cu	2.42	2.39	2.34	2.31	P2-Cu	2.31	2.38	2.40	2.38 2.42
(S) PhMeCO	Réactifs	VDW	TS1	Int	(S) PhMeCO	Int	VDW	TS1	VDW Produits
Cu-H	1.56	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.60	1.56 1.56
Cu-O	-	3.57	2.27	1.90	Cu-O	1.90	2.24	2.53	4.58 -
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.76	2.20	4.20 -
C-H	-	3.68	1.83	1.11	Si-O	-	1.77	1.72	1.67 1.66
P1-Cu	2.42	2.43	2.34	2.31	P1-Cu	2.31	2.36	2.37	2.45 2.42
P2-Cu	2.42	2.39	2.35	2.45	P2-Cu	2.45	2.37	2.43	2.39 2.42

Table 14 – Longueurs de liaison (Å) le long du cycle catalytique pour le catalyseur $\text{HCu}[\text{BiEt-H}].\text{PH}_3$ et le silane SiH_4 .

Etape 1						Etape 2					
H_2CO	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	H_2CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.58	1.63	1.64	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.57	1.57
Cu-O	-	3.63	3.11	2.19	1.89	Cu-O	1.89	2.18	2.26	4.36	-
C-O	1.21	1.22	1.25	1.27	1.39	Si-H	1.48	1.85	2.16	3.64	-
C-H	-	2.57	1.73	1.76	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.45	2.40	2.34	2.41	P1-Cu	2.41	2.39	2.42	2.47	2.46
P2-Cu	2.42	2.44	2.49	2.37	2.33	P2-Cu	2.33	2.37	2.38	2.41	2.42
P3-Cu	2.44	2.44	2.36	3.93	2.69	P3-Cu	2.69	6.04	6.12	2.46	2.44
MeHCO ax	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	MeHCO ax	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.58	1.65	1.65	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.57	1.57
Cu-O	-	4.02	3.08	2.17	1.90	Cu-O	1.90	2.18	2.25	4.43	-
C-O	1.21	1.22	1.26	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.86	2.15	3.74	-
C-H	-	3.14	1.68	1.74	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.47	2.40	2.33	2.45	P1-Cu	2.45	2.40	2.43	2.46	2.46
P2-Cu	2.42	2.43	2.48	2.37	2.33	P2-Cu	2.33	2.36	2.37	2.42	2.42
P3-Cu	2.44	2.44	2.35	3.97	2.60	P3-Cu	2.60	6.11	6.18	2.47	2.44
MeHCO eq	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	MeHCO eq	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.58	1.64	1.65	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.57	1.57
Cu-O	-	3.96	3.08	2.19	1.90	Cu-O	1.90	2.18	2.25	4.43	-
C-O	1.21	1.22	1.26	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.86	2.15	3.74	-
C-H	-	3.09	1.68	1.73	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.47	2.41	2.34	2.45	P1-Cu	2.45	2.40	2.43	2.46	2.46
P2-Cu	2.42	2.42	2.48	2.36	2.33	P2-Cu	2.33	2.36	2.37	2.42	2.42
P3-Cu	2.44	2.45	2.36	3.94	2.60	P3-Cu	2.60	6.11	6.18	2.47	2.44
Me_2CO	Réactifs	VDW	TS tetra	TS trig	Int	Me_2CO	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.28	1.65	1.65	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.57	1.57
Cu-O	-	3.88	3.06	2.15	1.91	Cu-O	1.91	2.17	2.24	5.18	-
C-O	1.21	1.22	1.26	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.87	2.18	4.92	-
C-H	-	3.31	1.63	1.72	1.11	Si-O	-	1.75	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.46	2.45	2.41	2.34	2.44	P1-Cu	2.44	2.40	2.44	2.46	2.46
P2-Cu	2.42	2.45	2.48	2.36	2.33	P2-Cu	2.33	2.36	2.36	2.41	2.42
P3-Cu	2.44	2.47	2.36	3.97	2.58	P3-Cu	2.58	6.01	6.14	2.47	2.44

Table 15 – Longueurs de liaison (Å) en fonction du catalyseur le long du cycle catalytique lors de la formation du R-PhMeHCOSiH₃.

Etape 1					Etape 2					
BiEt-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiEt-H.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.58	1.65	-	Cu-H	-	1.65	1.61	1.56	1.57
Cu-O	-	4.55	2.15	1.92	Cu-O	1.92	2.19	2.26	2.70	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.38	Si-H	1.48	1.84	2.06	2.97	-
C-H	-	3.98	1.73	1.11	Si-O	-	1.76	1.73	1.69	1.66
P1-Cu	2.46	2.48	2.33	2.38	P1-Cu	2.38	2.41	2.41	2.42	2.46
P2-Cu	2.42	2.42	2.38	2.37	P2-Cu	2.37	2.37	2.39	2.45	2.42
P3-Cu	2.44	2.45	3.96	2.56	P3-Cu	2.56	5.67	6.31	3.77	2.44
BiEt-Me.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiEt-Me.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.59	1.59	1.65	-	Cu-H	-	1.68	1.59	1.55	1.59
Cu-O	-	4.78	2.21	1.96	Cu-O	1.96	2.20	2.48	4.23	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.38	Si-H	1.48	1.76	2.20	3.89	-
C-H	-	3.98	1.78	1.12	Si-O	-	1.77	1.71	1.68	1.66
P1-Cu	2.42	2.39	2.33	2.38	P1-Cu	2.38	2.38	2.36	2.42	2.42
P2-Cu	2.39	2.43	2.36	2.33	P2-Cu	2.33	2.35	2.42	2.43	2.39
P3-Cu	2.48	2.51	4.17	2.55	P3-Cu	2.55	5.77	6.56	3.96	2.48
BiEt-Ph.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiEt-Ph.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.59	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.61	1.56	1.59
Cu-O	-	3.52	2.28	1.98	Cu-O	1.98	2.23	2.34	3.86	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.77	2.23	3.46	-
C-H	-	3.44	1.81	1.11	Si-O	-	1.77	1.72	1.68	1.66
P1-Cu	2.38	2.39	2.36	2.38	P1-Cu	2.38	2.37	2.39	2.43	2.38
P2-Cu	2.46	2.46	2.35	2.44	P2-Cu	2.44	2.37	2.40	2.41	2.46
P3-Cu	2.45	3.94	4.94	2.39	P3-Cu	2.39	5.57	5.33	4.81	2.45
BiPh-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiPh-H.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.56	1.64	-	Cu-H	-	1.66	1.61	1.55	1.57
Cu-O	-	2.81	2.20	1.94	Cu-O	1.94	2.16	2.22	4.78	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.38	Si-H	1.48	1.80	2.03	4.65	-
C-H	-	3.53	1.73	1.12	Si-O	-	1.76	1.73	1.68	1.66
P1-Cu	2.42	2.45	2.32	2.35	P1-Cu	2.35	2.36	2.37	2.50	2.42
P2-Cu	2.46	2.42	2.39	2.39	P2-Cu	2.39	2.39	2.39	2.41	2.46
P3-Cu	2.43	3.85	3.89	2.54	P3-Cu	2.54	5.90	6.46	4.38	2.43
BiPh-Me.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiPh-Me.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.59	1.59	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.61	1.65	1.59
Cu-O	-	4.58	2.25	1.95	Cu-O	1.95	2.20	2.29	2.26	-
C-O	1.22	1.23	1.27	1.38	Si-H	1.48	1.77	2.16	1.84	-
C-H	-	3.86	1.79	1.12	Si-O	-	1.76	1.72	1.75	1.66
P1-Cu	2.39	2.40	2.33	2.34	P1-Cu	2.34	2.33	2.37	2.36	2.39
P2-Cu	2.43	2.43	2.35	2.37	P2-Cu	2.37	2.38	2.39	2.37	2.43
P3-Cu	2.48	2.51	4.17	2.62	P3-Cu	2.62	6.74	6.55	4.06	2.48
BiP-Ph.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiP-Ph.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.60	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.66	1.61	1.57	1.60
Cu-O	-	3.84	2.32	1.99	Cu-O	1.99	2.23	2.35	4.80	-
C-O	1.22	1.23	1.27	1.38	Si-H	1.48	1.82	2.16	4.83	-
C-H	-	3.88	1.81	1.12	Si-O	-	1.76	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.40	2.46	2.38	2.38	P1-Cu	2.38	2.36	2.37	2.45	2.40
P2-Cu	2.41	2.38	2.35	2.43	P2-Cu	2.43	2.37	2.39	2.38	2.41
P3-Cu	2.46	4.44	4.90	2.41	P3-Cu	2.41	6.00	6.20	4.68	2.46

Table 16 – Longueurs de liaison (Å) en fonction du catalyseur le long du cycle catalytique lors de la formation du S-PhMeHCOSiH₃.

Etape 1					Etape 2					
BiEt-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiEt-H.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.58	1.65	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.55	1.57
Cu-O	-	4.49	2.15	1.91	Cu-O	1.91	2.19	2.27	3.18	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.38	Si-H	1.48	1.86	2.12	3.58	-
C-H	-	3.90	1.74	1.11	Si-O	-	1.76	1.73	1.68	1.66
P1-Cu	2.46	2.43	2.35	2.33	P1-Cu	2.33	2.42	2.44	2.41	2.46
P2-Cu	2.42	2.46	2.36	2.44	P2-Cu	2.44	2.36	2.37	2.46	2.42
P3-Cu	2.44	2.47	3.98	2.56	P3-Cu	2.56	5.75	5.98	3.68	2.44
BiEt-Me.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiEt-Me.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.59	1.59	1.64	-	Cu-H	-	1.68	1.60	1.59	1.59
Cu-O	-	4.52	2.25	1.95	Cu-O	1.95	2.20	2.40	5.33	-
C-O	1.22	1.23	2.28	1.38	Si-H	1.48	1.77	2.25	5.84	-
C-H	-	3.85	1.78	1.11	Si-O	-	1.77	1.71	1.67	1.66
P1-Cu	2.42	2.40	2.33	2.42	P1-Cu	2.42	2.38	2.42	2.43	2.42
P2-Cu	2.39	2.43	2.37	2.34	P2-Cu	2.34	2.35	2.35	2.39	2.39
P3-Cu	2.48	2.53	4.25	2.48	P3-Cu	2.48	6.55	6.57	2.50	2.48
BiEt-Ph.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiEt-Ph.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.59	1.57	1.64	-	Cu-H	-	1.67	1.59	1.56	1.59
Cu-O	-	3.61	2.27	1.98	Cu-O	1.98	2.22	2.48	4.94	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.77	2.21	6.12	-
C-H	-	3.50	1.82	1.11	Si-O	-	1.77	1.72	1.66	1.66
P1-Cu	2.38	2.39	2.34	2.39	P1-Cu	2.39	2.37	2.39	2.46	2.38
P2-Cu	2.46	2.45	2.37	2.48	P2-Cu	2.48	2.37	2.41	2.39	2.46
P3-Cu	2.45	3.74	4.78	2.39	P3-Cu	2.39	5.91	6.34	3.85	2.45
BiPh-H.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiPh-H.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.57	1.58	1.65	-	Cu-H	-	1.64	1.60	1.56	1.57
Cu-O	-	4.73	2.19	1.94	Cu-O	1.94	2.19	2.25	2.51	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.88	2.12	3.24	-
C-H	-	3.79	1.73	1.12	Si-O	-	1.75	1.72	1.69	1.66
P1-Cu	2.42	2.43	2.33	2.37	P1-Cu	2.37	2.39	2.40	2.46	2.42
P2-Cu	2.46	2.45	2.37	2.36	P2-Cu	2.36	2.36	2.37	2.42	2.46
P3-Cu	2.43	2.47	4.04	2.50	P3-Cu	2.50	6.06	6.04	4.08	2.43
BiPh-Me.PH ₃	Réactifs	90.91	97.44	95.64	BiPh-Me.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.59	1.59	1.64	-	Cu-H	-	1.66	1.61	1.54	1.59
Cu-O	-	4.83	2.28	1.97	Cu-O	1.97	2.21	2.30	4.85	-
C-O	1.22	1.23	1.27	1.38	Si-H	1.48	1.73	2.14	4.48	-
C-H	-	3.84	1.77	1.11	Si-O	-	1.76	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.39	2.41	2.33	2.32	P1-Cu	2.32	2.36	2.36	2.96	2.39
P2-Cu	2.43	2.41	2.35	2.42	P2-Cu	2.42	2.37	2.40	2.32	2.43
P3-Cu	2.48	2.54	4.12	2.50	P3-Cu	2.50	6.38	6.49	3.59	2.48
BiP-Ph.PH ₃	Réactifs	VDW	TS1	Int	BiP-Ph.PH ₃	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	1.60	1.57	1.65	-	Cu-H	-	1.68	1.60	1.56	1.60
Cu-O	-	3.56	2.28	1.99	Cu-O	1.99	2.23	2.44	3.93	-
C-O	1.22	1.23	1.28	1.39	Si-H	1.48	1.76	2.19	3.33	-
C-H	-	3.63	1.80	1.11	Si-O	-	1.77	1.72	1.67	1.66
P1-Cu	2.40	2.40	2.35	2.39	P1-Cu	2.39	2.36	2.41	2.46	2.40
P2-Cu	2.41	2.43	2.36	2.49	P2-Cu	2.49	2.36	2.37	2.38	2.41
P3-Cu	2.46	4.46	4.92	2.40	P3-Cu	2.40	5.96	7.31	6.85	2.46

Table 17 – Longueurs de liaison ($\text{\AA}$) le long de la seconde étape du cycle catalytique lors de la réduction du H_2CO et du Me_2CO par HSiMe_3 .

H_2CO						Me_2CO					
BiEt-H	Int	VDW	TS1	VDW	Produits	BiEt-H	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	-	4.14	1.88	1.54	1.54	Cu-H	-	4.56	1.87	1.54	1.54
Cu-O	1.83	1.84	2.11	3.04	-	Cu-O	1.83	1.85	2.11	4.07	-
Si-H	1.49	1.50	1.63	4.00	-	Si-H	1.49	1.50	1.63	4.39	-
Si-O	-	3.79	1.86	1.70	1.68	Si-O	-	3.87	1.86	1.69	1.68
P1-Cu	2.41	2.45	2.36	2.58	2.50	P1-Cu	2.38	2.48	2.38	2.48	2.50
P2-Cu	2.32	2.30	2.36	2.38	2.40	P2-Cu	2.52	2.30	2.36	2.42	2.40
BiEt-Me	Int	VDW	TS1	VDW	Produits	BiEt-Me	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	-	4.22	1.91	1.55	1.55	Cu-H	-	4.40	1.91	1.55	1.55
Cu-O	1.84	1.86	2.16	4.38	-	Cu-O	1.84	1.87	2.17	4.18	-
Si-H	1.49	1.50	1.63	4.28	-	Si-H	1.49	1.50	1.63	4.33	-
Si-O	-	3.84	1.84	1.69	1.68	Si-O	-	3.92	1.84	1.69	1.68
P1-Cu	2.31	2.36	2.36	2.47	2.46	P1-Cu	2.26	2.32	2.36	2.46	2.46
P2-Cu	2.40	2.35	2.35	2.39	2.40	P2-Cu	2.51	2.42	2.35	2.39	2.40
BiEt-Ph	Int	VDW	TS1	VDW	Produits	BiEt-Ph	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	-	2.18	1.88	1.57	1.56	Cu-H	-	5.20	1.90	1.56	1.56
Cu-O	1.87	1.92	2.22	2.63	-	Cu-O	1.88	1.88	2.20	3.35	-
Si-H	1.49	1.51	1.63	3.60	-	Si-H	1.49	1.50	1.62	3.85	-
Si-O	-	3.38	1.85	1.70	1.68	Si-O	-	4.51	1.85	1.68	1.68
P1-Cu	2.31	2.30	2.38	2.41	2.42	P1-Cu	2.46	2.44	2.40	2.39	2.42
P2-Cu	2.38	2.44	2.38	2.41	2.42	P2-Cu	2.28	2.31	2.38	2.42	2.42

Table 18 – Longueurs de liaison ($\text{\AA}$) le long de la seconde étape du cycle catalytique lors de la réduction du H_2CO et du Me_2CO par HSi(OMe)_3 .

H_2CO						Me_2CO					
BiEt-H	Int	VDW	TS1	VDW	Produits	BiEt-H	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	-	1.67	1.59	1.56	1.54	Cu-H	-	1.68	1.59	1.54	1.54
Cu-O	1.83	2.12	2.20	2.42	-	Cu-O	1.83	2.11	2.21	2.36	-
Si-H	1.48	1.73	2.27	3.66	-	Si-H	1.48	1.72	2.30	4.02	-
Si-O	-	1.74	1.70	1.67	1.64	Si-O	-	1.74	1.70	1.65	1.64
P1-Cu	2.41	2.37	2.37	2.48	2.50	P1-Cu	2.38	2.37	2.37	2.51	2.50
P2-Cu	2.32	2.36	2.41	2.41	2.40	P2-Cu	2.52	2.37	2.41	2.39	2.40
BiEt-Me	Int	VDW	TS1	VDW	Produits	BiEt-Me	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	-	1.70	1.59	1.56	1.55	Cu-H	-	1.71	1.59	1.56	1.55
Cu-O	1.84	2.15	2.26	4.92	-	Cu-O	1.84	2.14	2.28	4.85	-
Si-H	1.48	1.70	2.37	5.93	-	Si-H	1.48	1.69	2.42	5.86	-
Si-O	-	1.74	1.69	1.65	1.64	Si-O	-	1.74	1.69	1.64	1.64
P1-Cu	2.31	2.35	2.39	2.48	2.46	P1-Cu	2.26	2.36	2.40	2.48	2.46
P2-Cu	2.40	2.35	2.36	2.38	2.40	P2-Cu	2.51	2.35	2.36	2.38	2.40
BiEt-Ph	Int	VDW	TS1	VDW	Produits	BiEt-Ph	Int	VDW	TS1	VDW	Produits
Cu-H	-	1.71	1.60	1.57	1.56	Cu-H	-	1.71	1.60	1.56	1.56
Cu-O	1.87	2.17	2.27	2.59	-	Cu-O	1.88	2.18	2.27	4.53	-
Si-H	1.48	1.70	2.29	3.90	-	Si-H	1.48	1.69	2.25	4.49	-
Si-O	-	1.74	1.69	1.66	1.64	Si-O	-	1.74	1.69	1.64	1.64
P1-Cu	2.31	2.36	2.40	2.39	2.42	P1-Cu	2.46	2.37	2.40	2.38	2.42
P2-Cu	2.38	2.37	2.36	2.43	2.42	P2-Cu	2.28	2.38	2.36	2.51	2.42