

# SHAPIRO 4623-4640

## Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>.



J-4640-m1

Table S1. Assigned Parameters for 2

Atom	$x, y, z$ and $U_{eq}^a \times 10^4$			$U_{eq}$ or $B$	
	$x$	$y$	$z$		
C21	5008	829	487	12.0	*
C22	5543	530	399	12.0	*
C23	5536	-300	-88	12.0	*
C24	6124	-626	-184	12.0	*
H 6A	795	1908	1217	7.0	*
H 6B	994	603	1391	7.0	*
H 6C	1446	1514	1291	7.0	*
H 7A	433	3851	2332	7.0	*
H 7B	301	3049	1746	7.0	*
H 7C	779	4054	1891	7.0	*
H8A1	1641	4245	3715	7.0	*
H8A2	1464	3287	4136	7.0	*
H8A3	965	3881	3519	7.0	*
H8B1	1731	3655	4091	7.0	*
H8B2	1036	3414	3817	7.0	*
H8B3	1303	4345	3462	7.0	*
H 9A	2804	1953	4059	7.0	*
H 9B	2486	843	4208	7.0	*
H 9C	2339	2088	4419	7.0	*
H11A	1795	-1050	1586	7.0	*
H11B	2478	-1343	1971	7.0	*
H11C	2283	-66	1715	7.0	*
H12A	3148	-152	3360	7.0	*
H12B	2993	-1490	3294	7.0	*
H12C	2847	-728	3827	7.0	*
H14A	966	-2436	3571	7.0	*
H14B	705	-3335	2978	7.0	*
H14C	504	-2019	2871	7.0	*
H15A	2213	-2766	3078	7.0	*
H15B	1801	-3783	3153	7.0	*
H15C	2016	-2801	3705	7.0	*
H16A	753	-2889	1992	7.0	*
H16B	1405	-3378	2152	7.0	*
H16C	1246	-2096	1883	7.0	*
H17A	1394	1979	4900	7.0	*
H17B	1002	1269	5220	7.0	*
H17C	693	1916	4529	7.0	*
H18A	577	-778	4926	7.0	*
H18B	611	-1603	4352	7.0	*
H18C	154	-556	4174	7.0	*
H19A	2167	39	5006	7.0	*
H19B	1900	-1226	4840	7.0	*
H19C	1796	-496	5410	7.0	*

$$^a U_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j [U_{ij} (a_i^* a_j^*) (\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j)]$$

\* Isotropic displacement parameter,  $B$

Table S2. Anisotropic Displacement Parameters for 2

J-4640-m2

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
Sc	428(9)	504(10)	440(9)	-50(8)	177(7)	-24(8)
P	653(16)	1032(21)	484(15)	-85(15)	188(12)	55(14)
Si	512(15)	692(18)	825(18)	5(14)	327(13)	-73(15)
C 6	802(64)	979(72)	611(60)	-200(54)	289(51)	28(52)
C 7	849(70)	847(69)	1268(84)	97(57)	512(65)	270(61)
C 8	1311(84)	675(65)	1248(86)	-291(58)	828(73)	-334(59)
C 9	714(64)	1157(80)	745(67)	-286(55)	192(54)	-81(56)
C11	1505(93)	834(76)	1546(100)	-118(65)	1102(83)	-243(66)
C12	655(65)	1074(82)	1716(103)	107(58)	367(68)	-54(75)
C13	788(68)	533(65)	1014(76)	40(55)	451(61)	76(56)
C14	1248(92)	726(75)	2279(134)	-170(65)	1125(95)	41(77)
C15	987(105)	991(104)	5807(361)	139(83)	771(156)	1410(160)
C16	6416(409)	979(112)	3070(227)	-1992(182)	3165(264)	-1073(134)
C17	1666(106)	1348(94)	821(77)	-152(80)	669(76)	-219(68)
C18	1052(77)	1391(93)	670(63)	-280(66)	293(57)	169(60)
C19	1027(81)	2288(130)	839(74)	56(86)	203(66)	597(82)

The form of the displacement factor is:

$$\exp -2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}hla^*c^* + 2U_{23}klb^*c^*)$$

J-4640-m3

Table S3. Complete Distances, and Angles not Involving Hydrogen, for 2.

Distance(Å)		Distance(Å)	
Sc -P	2.825(3)	C 6 -H 6A	0.974(8)
Sc -N	2.071(6)	C 6 -H 6B	0.971(8)
Sc -C 1	2.395(7)	C 6 -H 6C	0.985(8)
Sc -C 2	2.464(8)	C 7 -H 7A	0.943(9)
Sc -C 3	2.641(8)	C 7 -H 7B	1.007(9)
Sc -C 4	2.628(8)	C 7 -H 7C	0.983(9)
Sc -C 5	2.481(8)	C 8 -H8A1	0.980(9)
Sc -C10	2.320(9)	C 8 -H8A2	0.947(9)
Sc -C10'	2.357(9)	C 8 -H8A3	0.982(9)
C10 -C10'	1.433(12)	C 8 -H8B1	0.955(9)
C10 -H10A	0.88(7)	C 8 -H8B2	0.963(9)
C10 -H10B	0.93(6)	C 8 -H8B3	0.990(9)
Si -N	1.722(6)	C 9 -H 9A	0.978(9)
Si -C 1	1.871(8)	C 9 -H 9B	0.977(9)
Si -C11	1.855(11)	C 9 -H 9C	0.984(9)
Si -C12	1.865(10)	C17 -H17A	1.028(11)
C11 -H11A	0.967(10)	C17 -H17B	0.957(11)
C11 -H11B	0.948(10)	C17 -H17C	0.933(11)
C11 -H11C	0.976(10)	C18 -H18A	0.955(9)
C12 -H12A	0.953(10)	C18 -H18B	0.999(9)
C12 -H12B	0.968(10)	C18 -H18C	0.948(9)
C12 -H12C	0.967(10)	C19 -H19A	1.005(11)
N -C13	1.469(11)	C19 -H19B	0.925(11)
C13 -C14	1.453(15)	C19 -H19C	0.976(11)
C13 -C15	1.41(2)	C21 -C22	1.390(0)
C13 -C16	1.49(2)	C21 -C23	1.391(0)
C14 -H14A	1.007(11)	C22 -C23	1.390(0)
C14 -H14B	0.985(11)	C23 -C24	1.526(0)
C14 -H14C	0.947(11)		
C15 -H15A	1.037(17)		
C15 -H15B	0.972(17)		
C15 -H15C	0.939(17)		
C16 -H16A	0.87(2)		
C16 -H16B	1.03(2)		
C16 -H16C	0.93(2)		
P -C17	1.796(11)		
P -C18	1.808(10)		
P -C19	1.807(11)		
C 1 -C 2	1.419(11)		
C 1 -C 5	1.450(11)		
C 2 -C 3	1.405(11)		
C 2 -C 6	1.513(11)		
C 3 -C 4	1.388(11)		
C 3 -C 7	1.493(12)		
C 4 -C 5	1.381(11)		
C 4 -C 8	1.505(12)		
C 5 -C 9	1.513(12)		

Table S3. (con't.)

4  
J-4640-m4

Angle(°)		
Sc -C10 -C10'		73.6(5)
C10 -Sc -C10'		35.7(3)
Sc -P -C17		116.2(4)
Sc -P -C18		114.9(3)
Sc -P -C19		120.6(4)
Sc -N -Si		102.9(3)
Sc -N -C13		132.6(5)
C 5 -C 1 -C 2		104.1(6)
C 3 -C 2 -C 1		110.1(7)
C 6 -C 2 -C 1		125.5(7)
C 6 -C 2 -C 3		124.3(7)
C 4 -C 3 -C 2		107.3(7)
C 7 -C 3 -C 2		125.7(7)
C 7 -C 3 -C 4		126.5(7)
C 5 -C 4 -C 3		109.3(7)
C 8 -C 4 -C 3		124.0(7)
C 8 -C 4 -C 5		126.1(7)
C 4 -C 5 -C 1		109.2(7)
C 9 -C 5 -C 1		125.0(7)
C 9 -C 5 -C 4		125.4(7)
C14 -C13 -N		112.1(8)
C15 -C13 -N		113.6(10)
C16 -C13 -N		108.7(10)
C15 -C13 -C14		108.9(10)
C16 -C13 -C14		104.1(11)
C16 -C13 -C15		109.1(12)
C23 -C21 -C22		120.2
C23 -C22 -C21		120.0
C22 -C23 -C21		119.8
C24 -C23 -C21		120.3
C24 -C23 -C22		119.9

Table S5. Assigned Parameters for 3

 $x, y$  and  $z \times 10^4$ 

J-4640-m5

Atom	$x$	$y$	$z$	$B$
C14a	-4101	1054	3277	10.3
C15a	-2274	597	1980	10.3
C16a	-2852	1714	1752	10.3
H7a	1718	1668	3374	8.0
H7b	3239	1499	4161	8.0
H7c	2647	2158	4262	8.0
H8a	4050	760	5614	8.9
H8b	4101	600	7167	8.9
H8c	4587	1242	6746	8.9
H9a	2526	1079	9474	9.6
H9b	2490	448	8742	9.6
H9c	1103	705	9203	9.6
H10a	-536	1998	8433	8.2
H10b	-683	1299	8665	8.2
H10c	-1657	1619	7437	8.2
H11a	-2058	2692	6045	10.1
H11b	-3082	2134	5721	10.1
H11c	-3110	2659	4648	10.1
H12a	-1473	2810	2893	9.8
H12b	-201	2400	2610	9.8
H12c	40	2883	3792	9.8
H14a	-3689	516	3612	12.1
H14b	-2429	270	2918	12.1
H14c	-3877	458	2011	12.1
H15a	-4317	1594	3422	11.3
H15b	-4617	1472	1838	11.3
H15c	-3583	1996	2429	11.3
H16a	-1974	1623	1175	13.3
H16b	-2687	1000	703	13.3
H16c	-1139	1016	1552	13.3
H20a	1110	546	3652	5.6
H20b	189	37	2825	5.6
H21a	2048	-581	3542	8.7
H21b	2898	-4	4102	8.7
H22a	1970	-253	1305	9.9
H22b	3569	-246	2032	9.9
H22c	2701	361	1823	9.9

J-4640-m6

Table S6. Anisotropic Displacement Parameters for 3

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
Sc	567(10)	332(8)	449(10)	22(8)	-9(8)	19(8)
C1	564(56)	371(46)	478(55)	10(40)	154(44)	56(42)
C2	593(60)	349(48)	562(60)	-55(44)	82(52)	-38(44)
C3	458(57)	385(51)	670(64)	60(44)	-67(53)	-77(47)
C4	722(65)	392(51)	490(61)	-91(48)	-109(55)	-24(46)
C5	660(64)	323(48)	606(64)	-56(45)	183(54)	-208(46)
C7	878(66)	712(58)	1081(78)	-101(49)	357(61)	-10(56)
C8	685(63)	649(57)	1532(89)	28(50)	-101(62)	-237(58)
C9	1445(83)	706(59)	627(57)	45(59)	-262(58)	69(54)
C10	1056(73)	773(60)	841(68)	-32(55)	265(61)	-218(53)
Si	684(17)	346(12)	730(17)	68(12)	23(14)	50(12)
C11	1017(72)	875(64)	1246(86)	437(54)	-112(66)	-341(61)
C12	1245(75)	528(53)	1237(81)	-14(50)	-181(66)	470(56)
N	493(41)	290(32)	471(39)	74(28)	74(34)	56(29)
C13	685(59)	338(50)	572(59)	16(45)	-116(50)	10(44)
C14	819(76)	452(63)	804(79)	29(55)	-287(66)	-4(55)
C15	547(67)	532(60)	905(81)	89(55)	-210(60)	-41(59)
C16	910(83)	1197(92)	324(65)	-143(69)	80(61)	-85(62)
C20	545(51)	379(46)	856(64)	-21(41)	139(48)	-184(43)
C21	1066(78)	993(76)	678(69)	-190(59)	77(61)	42(56)
C22	954(69)	1606(91)	740(69)	269(67)	316(58)	355(65)

The form of the displacement factor is:

$$\exp -2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}hla^*c^* + 2U_{23}klb^*c^*)$$

Table S7. Distances and Angles not Involving Hydrogen for 3

J-4640-m7

Distance(Å)		Angle(°)	
Sc -N	2.083(5)	Sc -C20 -C21	144.0(5)
Sc -C20	2.334(7)	Sc -C20 -Sc	89.4(2)
Sc -C20	2.372(7)	Sc -C20 -C21	95.7(5)
Sc -Sc	3.310(2)	N -Sc -Cp*	102.5
C20 -C20	3.346(10)	C20 -Sc -C20	90.6(2)
Sc -Cp*	2.210	C22 -C21 -C20	117.5(7)
Si -N	1.720(5)	Cp* -Sc -C20	119.6
Si -C1	1.858(7)	Cp* -Sc -C20	118.5
Si -C11	1.885(8)	Cp* -C1 -Si	155.6
Si -C12	1.862(8)	Sc -Cp* -C1	82.8
C20 -C21	1.472(11)	C5 -C1 -C2	105.7(6)
C21 -C22	1.538(12)	C3 -C2 -C1	109.8(7)
C1 -C2	1.417(10)	C7 -C2 -C1	127.3(7)
C1 -C5	1.407(10)	C7 -C2 -C3	122.8(7)
C2 -C3	1.403(11)	C4 -C3 -C2	106.9(7)
C2 -C7	1.515(11)	C8 -C3 -C2	124.7(7)
C3 -C4	1.403(11)	C8 -C3 -C4	127.3(7)
C3 -C8	1.507(11)	C5 -C4 -C3	108.3(7)
C4 -C5	1.403(11)	C9 -C4 -C3	126.5(7)
C4 -C9	1.539(11)	C9 -C4 -C5	124.6(7)
C5 -C10	1.513(11)	C4 -C5 -C1	109.3(7)
N -C13	1.501(9)	C10 -C5 -C1	126.6(7)
C13 -C14	1.497(11)	C10 -C5 -C4	123.9(7)
C13 -C15	1.530(11)	C14 -C13 -N	108.9(6)
C13 -C16	1.550(12)	C15 -C13 -N	112.0(6)
C13 -C14A	1.548(7)	C16 -C13 -N	108.0(6)
C13 -C15A	1.521(7)	C14A -C13 -N	107.4(5)
C13 -C16A	1.520(7)	C15A -C13 -N	109.2(5)
		C16A -C13 -N	109.0(5)
		C15 -C13 -C14	108.3(6)
		C16 -C13 -C14	110.0(7)
		C16 -C13 -C15	109.6(6)
		C15A -C13 -C14A	109.8(4)
		C16A -C13 -C14A	109.9(4)
		C16A -C13 -C15A	111.4(4)
		C22 -C21 -C20	117.5(7)
		C5 -C1 -C2	105.7(6)
		Si -C1 -C2	122.1(5)
		Si -C1 -C5	124.5(5)
		C3 -C2 -C1	109.8(7)
		C7 -C2 -C1	127.3(7)
		C7 -C2 -C3	122.8(7)
		C4 -C3 -C2	106.9(7)
		C8 -C3 -C2	124.7(7)
		C8 -C3 -C4	127.3(7)
		C5 -C4 -C3	108.3(7)
		C9 -C4 -C3	126.5(7)



Table S7. (con't.)

J-4640-m8

Angle(°)

C9 -C4 -C5	124.6(7)
C4 -C5 -C1	109.3(7)
C10 -C5 -C1	126.6(7)
C10 -C5 -C4	123.9(7)
C11 -Si -C1	112.8(3)
C12 -Si -C1	112.1(3)
N -Si -C1	95.3(3)
C12 -Si -C11	103.7(4)
N -Si -C11	115.8(3)
N -Si -C12	117.5(3)
C13 -N -Si	123.8(4)

J-4640-m9

Table S4. Observed and Calculated Structure Factors for 2

The columns contain, in order,  $k$ ,  $10F_{obs}$ ,  $10F_{calc}$  and  $10\left(\frac{F_{obs}^2 - F_{calc}^2}{\sigma F_{obs}^2}\right)$ . A minus sign preceding  $F_{obs}$  indicates that  $F_{obs}^2$  is negative.

J-4640-1710 10

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

-22 k 4	1 88 131 -13	2 372 377 -4	1 518 534 -16
	3 298 274 16	4 68 33 4	3 438 425 11
0 347 322 13	-21 k 10	-20 k 11	5 51 52 0
2 135 130 1			
-22 k 5	1 357 345 9	2 271 294 -15	-19 k 11
	3 248 226 12	4 692 663 27	
2 355 332 17	-21 k 11	-20 k 12	1 -92 6 -12
			3 195 183 6
-22 k 6	1 225 219 3	0 -77 25 -6	5 155 97 19
	3 547 487 53	2 138 147 -3	-19 k 12
0 -75 24 -6	-21 k 12	4 255 295 -25	
2 91 56 6		-20 k 13	1 284 230 35
-22 k 7	1 148 102 15	2 189 226 -20	3 -23 39 -2
	3 102 41 11		5 133 106 8
2 240 243 -1	-21 k 13	-20 k 14	-19 k 13
			1 -44 8 -2
-22 k 8	1 -15 81 -9	0 223 211 4	3 -13 28 -1
		2 310 248 41	-19 k 14
0 83 47 4	-21 k 14	-19 k 1	1 376 401 -22
2 287 255 20		1 -67 29 -7	3 191 179 6
-22 k 9	1 296 242 34	3 -36 49 -5	5 364 349 12
	-20 k 1	5 364 349 12	-19 k 15
2 10 111 -16		-19 k 2	1 -55 32 -5
-22 k 10	2 179 136 17	1 406 456 -48	3 97 80 4
	4 370 360 8	3 547 518 28	-19 k 16
0 563 495 46	-20 k 2	5 159 143 6	1 197 203 -2
2 131 153 -8		-19 k 3	-18 k 1
-22 k 12	0 465 423 26	1 -48 42 -6	2 126 35 21
	2 708 697 9	3 256 227 18	4 63 102 -9
0 513 497 11	4 387 358 23	5 -95 15 -13	6 89 110 -5
-21 k 1	-20 k 3	-19 k 4	-18 k 2
1 193 205 -6	2 75 32 6	1 138 179 -18	0 395 453 -42
	4 179 123 22	3 103 21 14	2 163 187 -12
-21 k 2	-20 k 4	5 -78 18 -9	4 101 98 0
		-19 k 5	6 -84 23 -11
1 583 587 -3	0 -35 59 -4	1 55 127 -19	-18 k 3
3 182 187 -2	2 309 313 -2	3 339 366 -23	2 136 57 22
	4 -23 4 0	5 226 235 -6	4 97 155 -21
-21 k 3	-20 k 5	-19 k 6	6 88 125 -11
1 75 125 -13	2 91 33 10	1 108 30 15	-18 k 4
3 335 293 31	4 189 176 6	3 228 242 -8	0 604 576 21
-21 k 4	-20 k 6	5 202 255 -32	2 532 447 82
		-19 k 7	4 154 82 24
1 281 197 50	0 295 291 1	1 24 56 -3	6 -71 29 -8
3 53 57 0	2 460 438 19	3 367 312 44	-18 k 5
-21 k 5	4 63 105 -9	5 284 243 26	2 157 118 15
	-20 k 7	-19 k 8	4 97 20 13
1 93 78 3	2 181 206 -12	1 661 641 19	6 158 86 24
3 206 138 31	4 423 465 -41	3 395 414 -17	-18 k 6
	-20 k 8	5 89 85 0	
-21 k 6	2 246 247 0	-19 k 9	0 578 619 -34
	4 747 718 27		2 619 634 -16
1 302 288 24	-20 k 9	1 44 24 1	4 218 167 27
3 82 34 7		3 409 430 -19	6 138 108 10
-21 k 7	0 92 31 7	5 446 424 19	-18 k 7
	2 -31 11 -1		
1 55 56 0	4 99 105 -1	0 578 619 -34	2 619 634 -16
3 -108 74 -24	-20 k 10	2 246 247 0	4 218 167 27
		4 747 718 27	6 138 108 10
-21 k 8	2 246 247 0	-19 k 10	2 85 4 10
	4 747 718 27		
1 223 211 6	-20 k 10		
3 -63 58 -10			
-21 k 9	0 337 311 15		



J-4640-m12

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

1	192	199	-4	1	616	584	30	2	510	561	-61	-13	k	4		
3	-36	53	-7	3	97	75	5	4	125	110	5	1	237	253	-15	
5	50	71	-3					6	172	138	14	3	26	163	-47	
7	240	168	40		-15	k	19	8	318	311	5	5	67	112	-13	
	-15	k	7		1	102	102	0		-14	k	11	7	231	246	-9
1	425	375	53		-14	k	1	2	348	375	-26		-13	k	5	
3	76	51	5					4	266	332	-55					
5	182	224	-25	2	854	785	72	6	308	328	-16	1	377	331	53	
7	-90	11	-12	4	609	607	2		-14	k	12	3	776	805	-33	
	-15	k	8	6	475	485	-10					5	265	292	-22	
1	762	764	-2	8	248	221	16	0	808	882	-64	7	690	703	-13	
3	690	699	-10		-14	k	2	2	45	39	0		-13	k	6	
5	274	188	54	0	722	693	26	4	116	98	5	1	54	40	2	
7	364	294	54	2	276	262	12	6	141	90	17	3	232	259	-21	
	-15	k	9	4	47	80	-7		-14	k	13	5	153	163	-5	
1	162	113	21	6	-94	51	-17	2	238	182	35	7	270	291	-15	
3	206	199	4	8	75	13	8	4	249	235	9		-13	k	7	
5	181	190	-4		-14	k	3	6	157	138	7	1	880	866	15	
7	403	388	13	2	260	278	-15		-14	k	14	3	1079	1003	69	
	-15	k	10	4	217	196	13	0	112	160	-15	5	559	556	3	
1	1048	1025	21	6	-68	49	-10	2	153	178	-12	7	823	804	18	
3	622	671	-55	8	76	99	-6	4	96	69	6		-13	k	8	
5	289	315	-20		-14	k	4	6	114	144	-10	1	541	621	-112	
7	215	156	29	0	637	698	-60		-14	k	15	3	443	478	-41	
	-15	k	11	2	546	499	55	2	61	110	-12	5	176	213	-21	
1	71	14	7	4	219	206	9	4	140	43	25	7	-141	71	-33	
3	57	22	4	6	54	130	-21	6	113	70	11		-13	k	9	
5	47	20	2	8	53	81	-5		-14	k	16	1	455	508	-68	
7	139	148	-3		-14	k	5	0	863	800	46	3	576	603	-32	
	-15	k	12	2	-66	131	-39	2	669	613	54	5	619	695	-89	
1	372	372	0	4	-47	36	-6	4	374	370	3	7	444	446	-1	
3	33	52	-2	6	305	257	36		-14	k	17		-13	k	10	
5	148	134	5	8	-15	57	-5	2	167	146	8	1	621	689	-86	
7	217	219	-1		-14	k	6	4	150	177	-11	3	334	377	-44	
	-15	k	13	0	114	214	-44		-14	k	18	5	232	186	27	
1	174	87	33	2	168	103	31	2	723	799	-60	7	-105	21	-16	
3	30	17	0	4	232	252	-15	0	382	414	-29		-13	k	11	
5	304	321	-14	6	-87	39	-13	2	382	414	-29	1	262	197	48	
	-15	k	14	8	359	403	-39		-14	k	19	3	363	257	89	
1	540	567	-29		-14	k	7	2	89	59	6	5	444	416	27	
3	510	517	-6	2	459	426	36		-13	k	1	7	68	51	2	
5	33	125	-20	4	292	312	-18						-13	k	12	
	-15	k	15	6	722	794	-79	2	123	118	2	1	763	718	48	
1	120	104	5	8	-64	41	-8	3	122	124	-1	3	255	282	-20	
3	135	158	-9		-14	k	8	5	-17	62	-6	5	-94	25	-13	
5	177	156	9	0	641	622	17	7	232	261	-20	7	199	192	3	
	-15	k	16	2	840	821	20		-14	k	18		-13	k	13	
1	195	183	6	4	203	216	-8	0	723	799	-60	1	243	261	-14	
3	94	74	4	6	426	451	-24	2	382	414	-29	3	178	308	-95	
5	57	4	4	8	383	367	13		-14	k	19	5	103	99	1	
	-15	k	17		-14	k	9	1	435	407	35	7	62	36	3	
1	115	78	10	2	476	420	61	3	292	312	-20		-13	k	14	
3	156	158	-1	4	392	385	6		121	108	4					
	-15	k	18	6	822	798	22		-83	36	-12		-13	k	14	
1	115	78	10	8	194	151	18	1	-52	98	-26	1	276	265	8	
3	156	158	-1		-14	k	10	3	718	793	-93	3	381	355	23	
	-15	k	18	0	47	7	2	5	529	510	20	5	131	119	4	
								7	647	648	-2		-13	k	15	

Supplementary material,  
page 12

J-4640-mv3

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

1 158 95 23	0 330 166 102	-12 k 20	1 519 606 -122
3 83 91 -1	2 714 584 143	0 68 4 4	3 595 589 7
5 512 532 -19	4 117 34 23		5 122 147 -10
-13 k 16	6 172 253 -50	-11 k 1	7 -82 14 -5
	8 149 60 27		-11 k 11
1 918 966 -46	-12 k 9	1 177 125 34	1 116 177 -35
3 794 812 -18	2 150 74 22	3 1342 1256 67	3 833 888 -61
5 92 124 -9	4 162 110 24	5 924 902 22	5 831 889 -62
-13 k 17	6 131 167 -15	7 426 457 -31	7 401 431 -28
	8 -57 24 -5	9 156 131 10	
1 208 171 18	-12 k 10	-11 k 2	-11 k 12
3 133 98 11	0 991 839 115	1 1068 927 130	1 163 176 -7
5 449 420 25	2 696 670 30	3 1070 1012 54	3 245 269 -19
-13 k 18	4 426 429 -3	5 208 188 14	5 360 334 22
	6 80 118 -11	7 143 158 -7	7 99 75 5
1 189 124 29	8 -40 33 -4	9 284 274 7	-11 k 13
3 248 261 -8	-12 k 11	-11 k 3	
-13 k 19	1 248 239 5	1 396 395 0	1 446 410 39
	2 35 149 -37	3 834 797 40	3 867 839 29
1 248 239 5	4 112 26 19	5 524 572 -61	5 1024 943 71
-12 k 1	6 308 260 35	7 157 127 12	7 348 339 7
	8 171 138 14	9 102 20 15	-11 k 14
2 942 982 -43	-12 k 12	-11 k 4	1 465 405 61
4 851 880 -32	0 246 341 -64	1 442 536 -145	3 436 429 7
6 801 811 -10	2 333 349 -15	3 463 458 6	5 124 6 22
8 294 265 21	4 -63 104 -23	5 245 203 32	7 -92 36 -13
-12 k 2	6 311 313 -1	7 357 389 -30	-11 k 15
	8 215 217 -1	9 411 355 48	
0 352 396 -43	-12 k 13	-11 k 5	1 422 457 -37
2 879 895 -18	0 246 341 -64	1 1038 958 78	3 526 594 -77
4 290 352 -64	2 333 349 -15	3 775 703 82	5 721 723 -2
6 109 111 0	4 -63 104 -23	5 335 393 -64	-11 k 16
8 153 154 0	6 311 313 -1	7 107 122 -5	1 82 117 -10
-12 k 3	8 215 217 -1	9 140 154 -5	3 188 197 -5
	2 139 227 -51	-11 k 6	5 100 71 7
2 747 723 28	4 512 585 -82	1 466 311 180	-11 k 17
4 797 758 42	6 399 421 -20	3 966 910 56	1 196 180 8
6 1059 1089 -27	-12 k 14	5 222 251 -24	3 -43 132 -28
8 281 266 10	0 123 85 9	7 92 105 -3	5 288 239 32
-12 k 4	2 522 537 -16	9 112 20 17	-11 k 18
	4 322 327 -3	-11 k 7	
0 371 215 120	6 252 244 5	1 468 430 51	1 430 471 -40
2 236 125 77	-12 k 15	3 -6 63 -8	3 129 116 4
4 703 659 50	0 589 530 44	5 257 229 22	-11 k 19
6 -46 106 -21	2 600 554 46	7 368 432 -64	1 83 67 3
8 484 475 8	4 357 317 33	9 148 129 7	3 99 93 1
-12 k 5	6 40 54 -1	-11 k 8	-11 k 20
	0 589 530 44	1 456 593 -212	
2 988 983 4	2 600 554 46	3 349 415 -81	1 -76 22 -9
4 531 572 -52	4 357 317 33	5 34 78 -8	-10 k 1
6 674 680 -7	6 40 54 -1	7 96 42 11	2 1172 1143 26
8 217 136 39	-12 k 17	9 105 59 10	4 730 745 -19
-12 k 6	0 348 289 33	-11 k 9	6 411 439 -30
	2 185 156 13	1 109 53 20	8 45 50 0
0 777 878 -105	4 105 61 10	3 949 870 79	-10 k 2
2 499 602 -149	-12 k 18	5 662 604 63	0 1227 1285 -44
4 592 571 24	0 348 289 33	7 645 584 63	2 1436 1471 -27
6 274 260 10	2 23 140 -27	9 175 95 29	4 945 981 -39
8 346 340 5	4 531 542 -11	-11 k 10	6 96 78 5
-12 k 7	-12 k 19		
	0 348 289 33		
2 756 759 -3	2 185 156 13		
4 821 850 -33	4 105 61 10		
6 567 595 -32	-12 k 19		
8 305 303 1	2 79 93 -3		
-12 k 8			

J-4640-m14

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

8	302	296	5	2	952	1013	-63	1	299	337	-53	3	130	75	17	
	-10	k	3	4	657	675	-20	3	895	906	-12	5	561	548	13	
				6	360	369	-8	5	567	469	114	7	128	133	-1	
2	334	369	-48	8	160	185	-11	7	78	77	0		-9	k	16	
4	478	385	113		-10	k	14	9	106	84	6	1	222	199	14	
6	112	107	1						-9	k	6	3	408	402	5	
8	251	234	11									5	-61	2	-5	
	-10	k	4	0	733	656	63	1	219	334	-151		-9	k	17	
				2	633	601	35	3	276	210	64					
				4	332	320	10	5	262	201	50	1	325	315	8	
0	135	264	-96	6	201	216	-8	7	208	198	6	3	225	268	-28	
2	410	332	99		-10	k	15	9	348	320	23	5	524	516	7	
4	283	161	102						-9	k	7		-9	k	18	
6	297	274	20	2	425	384	40									
8	102	57	11	4	229	193	21	1	500	502	-3	1	180	125	25	
	-10	k	5	6	110	111	0	3	1467	1316	108	3	61	43	2	
					-10	k	16	5	491	525	-44	3	168	159	3	
2	322	245	86					7	285	291	-4	5				
4	845	846	-1	0	-66	23	-5	9	73	117	-11		-9	k	19	
6	351	350	1	2	-33	69	-9		-9	k	8	1	310	329	-14	
8	205	199	3	4	180	199	-10					3	200	158	21	
	-10	k	6	6	-48	65	-9		1551	1331	147					
					-10	k	17		3	1364	1321	33		-9	k	20
0	172	31	48						5	368	382	-18				
2	821	918	-122	2	171	105	27		7	100	65	9	1	75	61	2
4	1214	1244	-26	4	202	164	19		9	364	337	23		-8	k	1
6	57	63	-1		-10	k	18			-9	k	9				
8	269	302	-24	0	393	379	8	1	120	43	28	2	485	443	61	
	-10	k	7	2	157	86	25	3	565	580	-20	4	360	350	13	
				4	112	138	-9	5	593	591	2	6	157	144	7	
2	995	969	26	7	180	145	17	7	180	145	17	8	454	452	3	
4	164	220	-41		-10	k	19	9	67	55	2	10	126	44	21	
6	715	714	0						-9	k	10		-8	k	2	
8	219	166	28	2	128	91	12									
	-10	k	8		-10	k	20	1	1229	1300	-63	0	105	11	21	
								3	181	196	-11	2	651	578	98	
0	25	112	-20	0	-69	86	-11	5	148	194	-28	4	260	257	3	
2	597	767	-259					7	208	173	20	6	812	722	95	
4	-85	52	-19		-9	k	1	9	514	510	3	8	-12	25	-1	
6	151	127	10						-9	k	11	10	98	2	14	
8	149	167	-8	1	804	787	20						-8	k	3	
	-10	k	9	3	527	487	54									
				5	542	531	14	1	337	318	21	2	925	904	23	
2	844	798	50	7	195	175	12	3	60	209	-76	4	399	381	25	
4	947	970	-23	9	78	104	-7	5	108	85	7	6	67	41	5	
6	952	958	-5		-9	k	2	7	101	10	15	8	365	408	-42	
8	291	295	-3						-9	k	12	10	-74	11	-8	
	-10	k	10	1	545	530	22									
				3	393	337	72	1	840	715	129		-8	k	4	
0	279	39	106	5	105	133	-14	3	133	106	12	0	458	454	4	
2	921	853	70	7	383	429	-51	5	58	56	0	2	1296	1247	41	
4	192	189	1	9	280	312	-25	7	100	92	2	4	99	81	7	
6	207	157	26		-9	k	3		-9	k	13	6	238	277	-34	
8	242	217	15									8	326	301	20	
	-10	k	11									10	407	393	12	
				1	107	10	30	1	239	216	18					
2	1115	1075	37	3	1025	884	134	3	206	164	25		-8	k	5	
4	680	593	74	5	119	128	-4	5	114	14	20					
6	440	412	27	7	305	300	4	7	77	47	5					
8	225	201	13	9	-84	12	-11		-9	k	14	2	456	349	143	
	-10	k	12		-9	k	4					4	621	589	42	
												6	-47	62	-11	
0	55	111	-12	1	414	280	168	1	766	792	-29	8	378	354	21	
2	-103	66	-27	3	250	243	8	3	372	364	8	10	-81	37	-10	
4	162	160	0	5	67	37	6	5	388	369	17		-8	k	6	
6	173	201	-15	7	156	76	30	7	159	114	18					
8	296	291	3	9	81	42	7		-9	k	15	0	639	603	39	
	-10	k	13		-9	k	5					2	1270	1186	70	
								1	100	102	0	4	19	4	0	

Supplementary material,  
page 14





J-4640-m16

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

				-5 k 2	9	152	173		-9	8	162	138	11		
	-6 k 10									10	224	218	3		
				1	1520	1568	-36		-5 k 12						
0	1345	1404	-40	3	1006	979	29				-4 k 4				
2	981	981	0	5	-15	51	-7	1	588	597					
4	704	662	49	7	476	409	74	3	108	88	0	2153	1898	111	
6	154	138	7	9	72	133	-19	5	40	26	1	2	1507	1567	-46
8	247	227	12					7	239	276	-25	4	147	16	56
												6	92	73	7
	-6 k 11								-5 k 13			8	134	130	1
				1	348	355	-12					10	140	202	-30
2	702	669	41	3	71	132	-35	1	187	169	11				
4	220	222	-1	5	831	813	20	3	368	378	-10		-4 k 5		
6	158	171	-6	7	599	618	-23	5	229	209	13				
8	104	121	-5	9	171	204	-18	7	444	463	-19	2	876	914	-46
												4	803	863	-76
	-6 k 12								-5 k 14			6	339	342	-3
0	1067	1036	24	1	854	690	185	1	446	423	26	8	65	1	7
2	302	238	61	3	904	828	84	3	309	303	4	10	-39	7	-2
4	99	32	16	5	490	530	-57	5	323	336	-12				
6	216	158	33	7	230	246	-12	7	112	50	15		-4 k 6		
8	496	494	2	9	-62	94	-19					0	650	586	71
												2	30	17	1
	-6 k 13								-5 k 15			4	164	186	-19
2	328	311	17	1	667	736	-107	1	32	23	0	6	219	155	45
4	144	143	0	3	405	268	176	3	213	215	-1	8	331	374	-42
6	131	147	-6	5	740	686	64	5	156	185	-14	10	347	348	0
8	-45	7	-2	7	622	629	-8	7	215	239	-14				
				9	335	324	9						-4 k 7		
	-6 k 14								-5 k 16			2	1297	1197	82
0	1123	1125	-1					1	339	288	44	4	634	572	78
2	811	819	-9	1	275	113	157	3	309	312	-3	6	866	861	4
4	422	434	-12	3	192	161	29	5	195	136	27	8	563	550	14
6	287	282	3	5	59	21	7					10	-71	30	-8
				7	194	267	-56								
	-6 k 15			9	369	370	0						-4 k 8		
2	342	390	-49					1	459	483	-24	0	167	43	48
4	244	249	-3					3	261	230	-20	2	600	631	-45
6	192	171	10					5	190	245	-31	4	1327	1292	28
				1	215	237	-24					6	143	147	-2
	-6 k 16			3	769	866	-129		-5 k 18			8	207	234	-17
0	369	355	9	5	180	112	41	1	488	464	24	10	86	116	-8
2	280	270	8	7	-53	14	-5	3	218	194	14				
4	-84	17	-10	9	182	218	-19						-4 k 9		
6	79	138	-18						-5 k 19			2	1089	1153	-65
								1	212	250	-24	4	1259	1315	-49
	-6 k 17							3	123	85	11	6	1002	983	18
0	369	355	9	1	1394	1420	-20					8	465	481	-16
2	280	270	8	3	1045	1018	27								
4	-84	17	-10	5	850	824	29		-5 k 20				-4 k 10		
6	79	138	-18	7	115	190	-37	1	255	203	31				
				9	452	412	36					0	751	601	136
	-6 k 18								-4 k 1			2	415	403	15
0	482	474	6	1	110	0	32	2	806	793	17	4	138	119	9
2	95	37	12	3	854	826	32	4	727	777	-69	6	268	301	-28
4	7	81	-9	5	760	752	8	6	616	646	-39	8	407	424	-16
				7	384	378	5	8	430	404	27				
	-6 k 19			9	181	179	1	10	195	164	13		-4 k 11		
2	205	201	1									2	153	177	-17
									-4 k 2			4	256	240	13
	-6 k 20							0	1723	1669	30	6	487	453	35
0	132	147	-4	1	292	263	32	2	3135	3019	41	8	219	235	-9
				3	312	352	-50								
	-5 k 1			5	284	330	-45						-4 k 12		
1	739	693	62	7	36	30	0	4	108	93	8				
3	1462	1412	37	9	486	480	4	6	423	434	-14	0	-50	3	-4
5	1305	1207	78					8	-52	1	-4	2	110	153	-23
7	964	956	7					10	127	110	6	4	150	134	8
9	443	446	-3									6	-93	30	-15
									-4 k 3			8	185	173	6
				1	264	266	-1								
				3	248	284	-36	2	1332	1245	71				
				5	207	247	-30	4	549	525	36		-4 k 13		
				7	269	291	-16	6	47	1	5				



J-4640-m18

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

4	90	153	-21	-1	k	10	10	127	132	-1	2	200	235	-30	
	-2	k	19	1	189	236	-47	0	k	2	4	603	571	37	
				3	203	238	-32				6	427	443	-16	
2	8	25	0	5	98	84	4	0	3731	4051	-86	8	189	157	16
	-1	k	1	7	154	123	13	2	1715	1651	42		0	k	12
				9	255	253	1	4	529	493	53				
1	1285	1284	1	-1	k	11		6	803	748	63	0	730	796	-64
3	1158	1155	2					8	338	294	39	2	557	582	-31
5	213	250	-43	1	489	391	119	10	535	521	14	4	163	162	0
7	963	947	15	3	694	661	39		0	k	3	6	242	246	-2
9	403	393	9	5	431	417	15					8	295	297	-1
	-1	k	2	7	612	615	-2	2	563	493	110		0	k	13
				9	80	68	2	4	76	12	16				
1	3248	3084	54	-1	k	12		6	205	227	-19	2	137	81	21
3	1853	1813	24					8	67	29	6	4	518	493	27
5	-51	43	-12	1	121	22	29	10	235	218	11	6	485	470	15
7	549	589	-51	3	191	198	-5		0	k	4		0	k	14
9	571	586	-16	5	247	194	37								
	-1	k	3	7	307	317	-7	0	3354	3366	-3	0	1104	1064	28
								2	1564	1480	59	2	859	849	9
1	280	177	185	-1	k	13		4	743	699	55	4	79	70	2
3	1538	1515	16	1	206	108	55	6	438	426	15	6	156	144	4
5	775	759	19	3	890	884	5	8	196	147	27				
7	343	303	40	5	644	630	14	10	256	236	13		0	k	15
9	-49	3	-3	7	711	723	-12		0	k	5	2	230	203	17
	-1	k	4									4	118	125	-2
								2	532	537	-7	6	70	23	6
1	1047	1006	43	1	716	774	-68	4	408	411	-4				
3	460	479	-31	3	634	638	-4	6	-102	25	-24		0	k	16
5	575	483	118	5	164	174	-4	8	56	82	-5				
7	473	456	19	7	130	159	-11	10	-116	16	-20	0	-154	48	-22
9	439	431	7						0	k	6	2	239	204	21
	-1	k	5									4	400	436	-33
								0	393	472	-106		0	k	17
1	971	968	3	1	74	4	9	2	327	321	9				
3	808	800	10	3	627	666	-44	4	331	311	25	2	71	5	7
5	334	278	65	5	373	327	38	6	301	323	23	4	344	338	5
7	49	52	0					8	194	173	12				
9	118	140	-8	-1	k	16		10	65	60	0		0	k	18
	-1	k	6						0	k	7	0	217	228	-5
				1	-83	40	-13					2	131	107	8
1	2646	2665	-8	3	197	200	-1	2	361	415	-87				
3	1230	1170	52	5	68	77	-1	4	478	539	-92		1	k	0
5	245	279	-38					6	572	585	8				
7	83	23	11	-1	k	17		8	423	413	10	1	2540	2728	-94
9	106	17	17	1	36	78	-8	10	148	122	9	3	1064	1027	42
	-1	k	7	3	100	136	-12					5	197	220	-35
				5	50	32	2		0	k	8	7	129	107	14
												9	316	346	-36
1	251	290	-51	-1	k	18		0	1441	1521	-54				
3	328	420	-145	1	-27	41	-3	2	883	848	39		1	k	1
5	360	350	13	3	193	173	10	4	684	658	32				
7	292	305	-11					6	178	187	-5	1	330	292	90
9	-84	3	-10	-1	k	19		8	211	212	0	3	1362	1446	-72
	-1	k	8						0	k	9	5	292	307	-20
				1	89	80	2					7	482	480	2
												9	163	167	-2
1	62	108	-22					2	162	158	3				
3	452	458	-8	0	k	0		4	785	714	79		1	k	2
5	262	296	-36					6	642	627	17				
7	15	59	-5	2	2074	1911	87	8	383	391	-7	1	97	17	54
9	59	139	-24	4	904	951	-56					3	360	325	54
	-1	k	9	6	366	355	13		0	k	10	5	545	546	-2
				8	282	313	-28					7	377	373	5
				10	680	651	28	0	795	772	22	9	212	242	-19
1	57	50	2					2	411	357	68				
3	761	819	-75	0	k	1		4	100	77	8		1	k	3
5	1130	1149	-18					6	239	248	-6				
7	859	842	17	2	590	488	161	8	366	361	4	1	506	407	165
9	140	142	0	4	323	335	-18					3	710	642	89
				6	490	541	-74		0	k	11	5	108	163	-37
				8	491	493	-1					7	81	65	4

Supplementary material,  
page 18

J-4640-m19

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

9	81	33	9					10	171	163	3	2	407	437	-27		
	1	k	4		1	k	14		2	k	6	4	123	69	15		
1	363	387	-43	1	635	689	-62	0	2390	2361	11		2	k	17		
3	417	385	50	3	56	18	4	2	1467	1409	43	2	200	176	12		
5	164	176	-9	5	32	76	-7	4	617	614	4						
7	233	214	14	7	54	33	2	6	202	218	-12		2	k	18		
9	131	114	6		1	k	15	8	173	103	31						
	1	k	5		10			10	279	258	14	0	-93	96	-18		
1	-33	90	-30	1	147	69	26		2	k	7		3	k	0		
3	669	653	22	3	150	92	20										
5	287	235	54	5	475	495	-20	2	809	823	-17	1	3074	2862	85		
7	262	237	20		1	k	16	4	979	889	90	3	480	458	43		
9	100	126	-8					6	169	86	38	5	-50	28	-12		
	1	k	6		1	174	221	-26	8	409	401	7	7	183	188	-5	
1	1482	1391	67	3	397	409	-10		2	k	8	9	176	138	25		
3	101	131	-20	5	137	109	10						3	k	1		
5	305	265	43		1	k	17	0	1606	1601	3						
7	176	139	19		1	94	68	6	2	1618	1565	36	1	132	163	-42	
9	205	165	21	1	274	277	-1	4	401	388	15	3	309	289	29		
	1	k	7	3				6	270	290	-18	5	56	11	7		
1	198	269	-86		1	k	18	8	143	132	4	7	265	270	-5		
3	541	526	22		1	128	65	18				9	302	317	-12		
5	474	469	6		2	k	0	2	221	260	-40		3	k	2		
7	351	368	-16		2	480	603	-303	4	405	407	-2	1	863	917	-70	
9	113	151	-15	0	2	639	540	168	6	164	163	0	3	667	690	-34	
	1	k	8	2	4	310	318	-14	8	93	86	1	5	236	219	16	
1	2294	2254	19	4	6	143	203	-67		2	k	10	7	229	242	-10	
3	1230	1197	28	8	8	71	40	8	0	64	23	6	9	207	201	3	
5	191	225	-26	10	129	166	-23	0	2	221	235	-13		3	k	3	
7	146	165	-9		2	k	1	2	258	206	41	1	1389	1351	30		
9	59	60	0		2	524	475	84	4	272	291	-16	3	403	424	-33	
	1	k	9		4	1844	1760	50	6	114	145	-12	5	710	731	-27	
1	559	548	15	6	6	349	312	45	8	188	188	0	7	93	93	0	
3	685	675	12	8	8	83	62	5		2	k	11	9	106	59	11	
5	272	262	8	10	-41	35	-4	2	157	135	11		3	k	4		
7	255	208	31		2	k	2	4	-102	12	-16	1	1484	1417	50		
9	82	17	9		0	4400	4247	33	6	-107	83	-26	3	187	199	-12	
	1	k	10		2	1580	1466	79	8	2	k	12	5	441	434	9	
1	723	776	-68		4	734	699	44		2	k	12	7	452	475	-27	
3	445	407	46		6	131	140	-5	0	631	677	-43	9	331	287	35	
5	423	458	-40		8	86	37	10	2	597	609	-14		3	k	5	
7	588	616	-30		10	-35	10	-2	4	319	324	-4	1	-38	35	-7	
9	167	110	21		8	86	37	10	6	67	121	-15	3	561	532	41	
	1	k	11		2	k	3		8	-82	37	-11	5	836	812	26	
1	494	512	-24		2	359	426	-122		2	k	13	7	448	409	41	
3	401	406	-5		4	292	268	32	2	114	132	-7	9	34	119	-18	
5	106	102	1		6	-46	66	-14	4	173	145	13		3	k	6	
7	83	89	-1		8	107	90	5	6	28	71	-6	1	2069	2085	-9	
	1	k	12		10	209	202	4		2	k	14	3	367	366	1	
1	1011	1005	5		0	328	315	15		0	369	376	5	97	75	7	
3	763	740	25		2	72	9	15	2	370	389	-18	7	50	93	-10	
5	106	118	-4		4	374	435	-97	4	158	128	13	9	102	70	8	
7	250	305	-41		6	810	805	6	6	-108	24	-18		3	k	7	
	1	k	13		8	282	228	42		2	k	15	1	421	411	14	
1	172	266	-69		10	279	238	28		2	166	120	3	336	325	14	
3	128	130	-1			2	k	5		4	276	237	5	558	619	-60	
5	205	183	12		2	735	804	-98		6	325	334	7	434	455	-22	
7	180	137	20		4	238	242	-4		2	k	16	9	159	189	-14	
					6	332	303	30						3	k	8	
					8	171	202	-17		0	627	625	1	1	173	189	-13

J-4640-m20

Ethylene-Bridged Scandium Dimer										Page	11				
3	41	29	2	10	-14	67	-7	6	-9	102	-15	5	k	5	
5	157	184	-16					8	40	53	-1				
7	142	176	-16		4	k	2					1	174	177	-3
9	42	0	2						4	k	12	3	523	481	58
				0	1156	1124	25					5	521	511	12
	s	k	9	2	277	350	-116	0	795	726	56	7	324	324	0
1	200	166	26	4	362	315	65	2	424	469	-51	9	67	19	6
3	308	280	30	6	940	885	56	4	150	178	-14				
5	-39	1	-2	8	122	176	-25	6	-79	15	-9		5	k	6
7	-10	19	0	10	271	271	0								
9	-115	37	-21		4	k	3		4	k	13	1	314	312	1
				2	360	348	19	2	256	256	0	3	228	239	-11
	s	k	10	4	555	543	17	4	-15	40	-2	5	325	364	-43
1	668	668	-1	6	496	481	18	6	266	249	12	7	125	113	4
3	539	568	-36	8	533	498	38					9	40	116	-18
5	-68	69	-16	10	-77	80	-19		4	k	14		5	k	7
7	36	3	2		4	k	4	0	1083	1088	-3	1	396	318	95
								2	696	716	-21	3	653	649	5
	s	k	11	4	74	62	2	4	74	62	2	5	209	212	-2
1	268	252	14	0	284	226	53	6	118	132	-5	7	312	227	63
3	-33	105	-21	2	320	257	81					9	150	139	4
5	197	191	3	4	241	245	-4		4	k	15		5	k	8
7	79	69	2	6	557	546	13								
				8	274	311	-30	2	272	271	0				
	s	k	12	10	126	157	-12	4	37	47	-1	1	1425	1456	-24
1	270	283	-11		4	k	5		4	k	16	3	1135	1050	75
3	106	118	-4	2	662	683	-29	0	109	1	12	5	107	45	16
5	295	305	-8	4	642	684	-57	2	115	48	16	7	164	220	-31
7	256	257	0	6	805	819	-15	4	95	196	-28	9	118	137	-7
				8	612	614	-1						5	k	9
	s	k	13	10	107	143	-12		4	k	17	1	516	472	55
1	112	70	12		4	k	6	2	98	25	12	3	658	631	31
3	326	349	-21									5	365	421	-60
5	94	69	6	0	163	127	21		5	k	0	7	485	472	12
7	199	190	4	2	380	350	42						5	k	10
				4	607	655	-65	1	737	743	-10				
	s	k	14	6	79	155	-32	3	335	257	135	1	-43	4	-3
1	1246	1265	-15	8	62	78	-3	5	308	251	87	3	-60	41	-9
3	458	409	46		4	k	7	7	89	79	4	5	183	185	0
5	184	203	-10					9	133	151	-11	7	385	449	-62
				2	-104	34	-30		5	k	1		5	k	11
				4	62	130	-27								
				6	423	390	35	1	443	419	41	1	54	17	4
1	83	29	8	8	61	111	-13	3	1151	1227	-74	3	628	652	-28
3	187	207	-11					5	879	902	-26	5	142	117	10
5	84	46	7		4	k	8	7	886	866	21	7	393	383	8
				9	216	228	-7						5	k	12
	s	k	16	0	948	956	-7		5	k	2				
1	421	471	-50	2	1134	1171	-35					1	346	349	-2
3	-74	89	-19	4	598	583	18					3	190	171	10
				6	-75	87	-22	1	155	138	13	5	198	163	18
	s	k	17	8	105	127	-7	3	813	761	62	7	214	210	2
					4	k	9	5	136	158	-14				
1	133	10	25					7	340	357	-17				
3	49	117	-16					9	408	451	-43		5	k	13
				2	623	660	-48								
	4	k	0	4	178	153	14		5	k	3	1	-95	10	-15
				6	70	10	7					3	412	485	-76
				8	66	23	5	1	233	268	-43	5	333	292	31
0	3480	3340	43					3	625	565	82				
2	1057	1024	37		4	k	10	5	522	521	1		5	k	14
4	777	758	27					7	493	481	13				
6	110	13	38	0	783	783	0	9	99	85	3	1	170	183	-6
8	363	353	14	2	821	854	-36					3	143	126	6
10	226	233	-5	4	99	3	17		5	k	4	5	103	82	5
				6	359	344	13								
	4	k	1	8	161	194	-16	1	1159	1120	36		5	k	15
								3	339	334	6				
2	657	617	57		4	k	11	5	363	326	42	1	91	49	8
4	1212	1167	40					7	239	231	5	3	-14	125	-24
6	926	859	69	2	123	79	16	9	155	166	-5		5	k	16
8	857	877	-21	4	214	214	0								



S-4640-m22

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

0	127	109	5	3	639	649	-12	4	33	42	-1	1	135	200	-50
2	89	16	13	5	359	319	37	6	-89	3	-13	3	688	720	-41
4	145	153	-3	7	78	43	6	8	-42	35	-4	5	504	504	0
6	97	0	14		9 k	7		10	k	4		7	184	180	2
	8	k	11	1	246	244	1	0	1102	1055	36	9	80	13	9
				3	336	296	38	2	593	643	-66		11	k	2
2	157	152	2	5	-72	60	-15	4	361	322	39	1	340	305	40
4	137	143	-2	7	390	341	42	6	106	125	-7	3	446	446	0
6	308	311	-2		9 k	8		8	-74	31	-10	5	433	488	-64
	8	k	12					10	k	5		7	135	79	19
0	128	16	18	1	340	343	-3					9	-63	99	-20
2	69	57	2	3	131	125	2	2	288	336	-49		11	k	3
4	157	223	-35	5	216	249	-22	4	162	173	-6	1	345	367	-26
	8	k	13	7	-45	15	-3	6	-79	32	-11	3	410	388	24
					9 k	9		8	68	22	6	5	321	349	-26
2	290	307	-12					10	k	6		7	88	1	12
4	431	408	20	1	176	199	-14	0	319	269	34		11	k	4
	8	k	14	3	388	382	5	2	113	60	17	1	-42	23	-4
0	440	407	22	5	321	292	23	4	119	141	-9	3	222	251	-23
2	458	464	-6	7	517	535	-16	6	71	97	-6	5	88	7	13
	9	k	0		9 k	10		8	149	151	0	7	297	299	-1
				1	91	13	13		10	k	7		11	k	5
1	2185	2179	3	3	-75	20	-9	2	270	249	17	1	56	44	2
3	1136	1146	-10	5	81	55	5	4	95	118	-7	3	109	56	15
5	806	833	-37		9 k	11		6	319	320	0	5	343	350	-7
7	131	176	-32	1	148	223	-42		10	k	8	7	76	126	-15
9	475	449	34	3	354	352	1	0	763	666	78		11	k	6
	9	k	1	5	355	308	36	2	623	680	-66	1	1058	1015	39
1	201	157	36		9 k	12		4	284	293	-7	3	508	501	7
3	660	709	-65	1	212	220	-4	6	86	182	-37	5	398	397	0
5	498	489	10	3	307	267	30		10	k	9	7	92	45	9
7	302	288	12	5	-104	23	-15	2	95	70	6		11	k	7
9	92	15	12		9 k	13		4	373	338	30	1	260	250	7
	9	k	2					6	392	357	30	3	516	509	7
1	1416	1399	13	1	100	37	13		10	k	10	5	162	133	11
3	417	380	48	3	449	467	-16	0	-51	12	-3	7	254	255	0
5	117	94	9		9 k	14		2	332	350	-16		11	k	8
7	324	336	-10	1	374	370	3	4	99	55	10	1	548	544	5
9	636	683	-49		10 k	0		6	279	235	27	3	579	571	8
	9	k	3						10	k	11	5	181	193	-6
1	41	52	-2	0	2109	1981	67	2	60	3	5		11	k	9
3	311	282	32	2	1677	1654	17	4	260	325	-48	1	74	112	-10
5	237	220	12	4	944	892	61		10	k	12	3	301	297	3
7	-48	60	-9	6	22	86	-17					5	152	119	13
9	204	223	-10	8	310	299	12	0	328	313	7		11	k	10
	9	k	4		10 k	1		2	523	563	-40	1	308	285	18
1	1486	1405	58	2	902	838	69	4	371	351	16	3	266	286	-14
3	652	642	13	4	38	46	-1		10	k	13	5	134	91	14
5	282	292	-8	6	163	110	24	2	184	179	2		11	k	11
7	135	66	21	8	-102	19	-16					1	131	133	0
9	492	520	-27		10 k	2		1	829	866	-52	3	241	184	33
	9	k	5	0	1087	1026	48	3	461	465	-7		11	k	12
1	546	492	67	2	563	597	-46	5	73	96	-9	1	420	387	30
3	209	202	5	4	129	153	-13	7	20	28	0	3	401	409	-6
5	190	195	-3	6	471	409	65	9	281	284	-2		12	k	0
7	121	142	-8	8	481	490	-8		11	k	1				
	9	k	6		10 k	3									
1	884	902	-18	2	796	826	-35								

J-4640-m23

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

0	805	826	-25	12 k	12	14 k	C	5	610	640	-32				
2	425	420	9	0	189	190	0	7	168	180	-5				
4	375	412	-58						15 k	2					
6	222	200	19	13 k	0	2	336	355	-25						
8	-30	74	-13			4	239	194	41						
				1	788	739	65	6	163	198	-25				
				3	348	328	28	8	47	21	3				
				5	251	221	31								
				7	225	239	-13	14 k	1	1	160	214	-32		
2	168	154	8					3	-37	8	-2				
4	393	415	-25					5	350	369	-17				
6	293	298	-4	13 k	1	2	1001	1001	0	7	202	202	0		
8	-80	60	-15			4	764	768	-2						
				1	557	482	86	6	507	465	41	1	96	89	2
				3	549	587	-47	8	252	227	11	3	58	119	-16
				5	246	190	37					5	269	305	-26
				7	121	82	11	14 k	2						
0	853	828	21					0	539	520	16				
2	431	359	80	13 k	2	2	295	302	-5	1	298	340	-36		
4	198	250	-38			4	191	222	-19	3	327	315	9		
6	169	125	20			6	208	239	-18	5	-40	39	-4		
8	228	215	7	1	85	22	12								
				3	176	147	15	14 k	3						
				5	-60	12	-6								
				7	16	4	0								
2	223	246	-18	13 k	3	2	282	266	13	1	84	87	0		
4	241	287	-38			4	633	669	-40	3	85	79	1		
6	101	46	12			6	351	348	2	5	105	161	-21		
8	80	119	-10	1	458	441	19								
				3	432	469	-41	14 k	4						
				5	402	351	46								
				7	104	121	-5								
0	595	619	-22					0	202	167	14	1	307	289	14
2	204	141	36	13 k	4	2	265	233	23	3	145	144	0		
4	21	22	0			4	82	111	-8	5	106	46	13		
6	59	38	3			6	193	204	-6						
8	404	394	9	1	213	202	7								
				3	270	222	34	14 k	5						
				5	69	85	-3								
				7	137	129	3								
2	400	405	-4	13 k	5	2	84	109	-7	1	171	154	7		
4	190	161	15			4	559	553	6	3	437	460	-22		
6	205	181	13			6	363	349	11						
				1	398	387	11								
				3	437	505	-74	14 k	6						
				5	598	569	30								
				7	176	184	-3								
0	1001	1007	-4					0	64	18	4	1	357	323	28
2	776	767	9	13 k	6	2	39	134	-24	3	211	160	26		
4	451	413	36			4	42	68	-4						
6	218	237	-12	1	351	297	46	6	109	117	-2	1	191	188	1
				3	425	486	-65								
				5	77	44	5	14 k	7						
								2	17	0	0	0	100	2	16
2	425	454	-30	13 k	7	4	-78	47	-12	2	446	429	23		
4	552	529	23							4	213	224	-10		
6	242	252	-6	1	371	403	-31	14 k	8	6	317	295	23		
				3	300	285	11								
				5	372	384	-10	0	242	180	25				
								2	489	516	-27				
				1	351	297	46	4	268	247	13	2	361	360	0
				3	425	486	-65					4	-114	6	-19
				5	77	44	5					6	64	58	1
2	425	454	-30					14 k	9						
4	552	529	23	1	184	188	-1								
6	242	252	-6	3	298	269	21	2	160	123	16				
				5	216	276	-38								
								14 k	10						
								0	121	26	14	0	229	218	5
2	260	229	20	13 k	9			2	199	223	-15				
4	152	125	10	1	258	325	-52	4	137	87	16				
				3	48	62	-2	6	211	260	-30				
								15 k	0						
0	368	366	1	13 k	10	1	375	434	-90						
2	-66	16	-7			3	215	253	-38	2	195	244	-30		
4	81	61	4	1	28	25	0	5	45	46	0	4	231	214	10
				3	235	193	23	7	20	22	0	6	151	146	1
								15 k	1						
2	192	216	-13	1	164	206	-22	1	74	122	-15	0	317	328	-6
								3	315	305	8	2	103	129	-8





J-4640-m25

Table S8. Observed and Calculated Structure Factors for 3

**n-Propyl Bridged Scandium Dimer**

The columns contain, in order,  $k$ ,  $10F_{obs}$ ,  $10F_{calc}$  and  $10\left(\frac{F_{obs}^2 - F_{calc}^2}{\sigma F_{obs}^2}\right)$ . A minus sign preceding  $F_{obs}$  indicates that  $F_{obs}^2$  is negative.

J-4640-m26

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

0	k	0		16	135	141	-7	11	-22	0	-2	6	380	381	-1
				17	26	28	0	12	76	26	25	7	162	159	3
				18	176	174	4	13	135	104	34	8	118	122	-3
2	169	163	28	19	180	165	24					9	73	42	14
4	923	835	104					8	k	0		10	254	257	-4
6	95	84	14	4	k	0						11	120	119	0
8	77	93	-17					0	260	252	10	12	353	363	-17
10	151	161	-17	0	402	425	-51	1	52	46	2	13	21	42	-4
12	389	389	1	1	285	282	7	2	59	45	6	14	79	64	7
14	348	332	30	2	401	408	-17	3	111	105	5	15	171	149	22
16	218	222	-6	3	82	71	15	4	25	37	-3	16	-61	4	-13
18	149	104	40	4	71	35	33	5	34	33	0	17	68	50	7
20	127	88	30	5	261	256	12	6	157	158	-2				
				6	392	406	-37	7	75	72	2				
				7	139	143	-7	8	100	110	-9	-4	k	1	
				8	-45	18	-18	9	-40	30	-12				
1	1315	1336	-20	9	275	274	2					1	-62	8	-24
2	105	92	54	10	178	172	12					2	213	206	14
3	640	629	21	11	91	114	-28	-9	k	1		3	256	249	15
4	129	127	9	12	403	403	1	0	173	186	-10	4	58	29	15
5	55	51	4	13	44	48	-1	1	28	7	2	5	287	283	8
6	310	319	-28	14	80	62	13	2	50	37	3	6	244	219	50
7	217	246	-71	15	29	7	4					7	328	334	-12
8	129	125	8	16	119	126	-7					8	-54	15	-16
9	199	228	-89	17	54	69	-9	-8	k	1		9	436	452	-31
10	355	356	-1	18	-29	8	-4					10	24	16	1
11	295	322	-74					1	275	270	7	11	114	106	7
12	27	15	4					2	-8	13	0	12	122	120	1
13	270	279	-21	5	k	0		3	103	128	-19	13	269	270	-1
14	326	323	5	1	423	411	29	4	238	248	-14	14	50	35	5
15	490	488	2	2	96	99	-4	5	113	107	3	15	-22	6	-2
16	188	167	36	3	56	16	22	6	88	80	4	16	204	187	21
17	156	162	-9	4	280	276	10	7	131	103	22	17	109	122	-10
18	36	6	6	5	609	615	-12	8	73	41	12	18	91	88	2
19	148	125	29	6	39	31	3	9	-59	10	-12				
20	30	10	4	7	143	144	-1								
				8	81	92	-12	-7	k	1					
				9	282	282	0	0	271	284	-15	0	816	795	23
				10	-24	52	-19	1	161	155	6	1	298	284	33
0	408	406	3	11	143	145	-3	2	147	124	22	2	257	262	-11
1	333	345	-40	12	61	51	5	3	226	222	5	3	148	156	-14
2	177	160	59	13	367	369	-3	4	118	101	13	4	175	188	-25
3	378	373	14	14	143	136	8	5	157	166	-9	5	429	406	49
4	-33	36	-24	15	17	52	-12	6	102	123	-16	6	589	605	-29
5	155	149	14	16	44	9	9	7	150	130	18	7	131	141	-16
6	305	340	-112	17	-53	8	-14	8	121	102	14	8	516	509	11
7	244	234	29					9	55	17	9	9	284	303	-41
8	789	782	10	6	k	0		10	75	99	-14	10	74	89	-13
9	253	248	13	0	-48	7	-10	11	106	106	0	11	136	155	-25
10	105	110	-9	1	208	216	-18	12	133	104	22	12	540	553	-23
11	283	282	4	2	218	218	0	13	62	54	3	13	336	336	0
12	451	453	-3	3	95	99	-4					14	233	235	-3
13	254	263	-20	4	257	251	13					15	105	103	1
14	450	469	-42	5	175	177	-2	-6	k	1		16	-27	4	-3
15	40	46	-3	6	280	297	-40	1	218	229	-17	17	157	142	15
16	-31	31	-11	7	74	79	-3	2	133	146	-14	18	185	178	8
17	201	208	-13	8	209	210	0	3	71	18	19	19	110	113	-2
18	198	247	-64	9	126	123	3	4	304	281	39				
19	191	197	-10	10	162	158	5	5	308	320	-22	-2	k	1	
20	130	114	19	11	143	153	-15	6	65	41	10	1	381	396	-41
				12	127	109	19	7	11	60	-13	2	668	688	-34
				13	46	71	-14	8	28	6	2	3	46	67	-18
				14	203	206	-5	9	253	282	-45	4	216	224	-19
				15	44	14	9	10	121	124	-2	5	681	670	17
1	274	270	14					11	67	34	11	6	54	78	-20
2	243	244	-4	7	k	0		12	83	59	11	7	607	644	-65
3	419	403	40	1	187	183	6	13	333	333	0	8	347	366	-43
4	548	527	44	2	63	46	9	14	85	132	-35	9	9	1	0
5	177	194	-51	3	31	39	-3	15	23	35	-2	10	112	140	-40
6	115	124	-20	4	319	339	-44					11	262	257	11
7	556	528	56	5	209	212	-4	-5	k	1		12	80	99	-17
8	124	114	18	6	94	90	3	0	113	80	23	13	160	145	19
9	459	451	18	7	184	190	-9	1	-36	34	-13	14	326	334	-14
10	261	244	43	8	28	57	-12	2	201	196	10	15	440	445	-8
11	198	197	3	9	-58	5	-17	3	166	177	-17	16	240	233	10
12	64	36	17	10	62	33	13	4	384	387	-7	17	159	172	-14
13	453	450	8					5	468	460	15	18	98	61	22
14	221	211	21									19	214	213	1
15	59	59	0												

J-4640-m27

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

10	74	12	28	18	332	340	-13	5	54	25	12	2	82	1	24
11	316	317	-1	19	24	56	-9	6	457	453	6	3	100	106	-3
12	63	25	14	20	124	144	-18	7	92	91	1	4	248	227	27
13	200	195	7					8	129	132	-3	5	37	36	0
14	147	180	-39		1 k	2		9	64	84	-13	6	62	54	3
15	87	94	-5					10	161	172	-13	7	97	88	5
16	347	338	15	1	752	686	80	11	172	170	2	8	-39	50	-13
17	73	39	14	2	250	234	30	12	359	392	-56	9	71	73	0
18	-56	50	-20	4	88	52	23	13	18	45	-6				
19	263	248	21	5	54	66	-6	14	135	140	-4				
				6	76	95	-14	15	198	206	-10	-7 k	3		
				7	983	966	16	16	69	32	14	0	207	189	17
				8	557	524	47	17	106	95	8	1	91	98	-4
				9	367	343	38					2	135	140	-4
0	606	586	29	10	316	311	9	5 k	2			3	143	120	20
1	320	303	41	11	379	349	46					4	-55	12	-11
2	131	109	32	12	212	217	-8	1	311	312	-1	5	84	61	11
3	428	426	4	13	479	454	35	2	287	302	-31	6	24	32	-1
4	288	283	12	14	257	249	10	3	206	216	-16	7	33	8	3
5	39	67	-18	15	234	230	5	4	78	102	-19	8	96	66	17
6	209	225	-36	16	287	295	-11	5	319	326	-13	9	48	46	0
7	262	251	24	17	67	45	9	6	-9	31	-4	10	91	45	21
8	423	439	-35	18	165	123	41	7	194	184	14	11	187	183	4
9	501	494	12	19	260	243	24	8	89	101	-9	12	210	236	-32
10	254	248	12	20	1	21	-1	9	190	192	-3				
11	71	59	8					10	97	102	-4	-6 k	3		
12	179	188	-14					11	-14	17	-1				
13	244	231	22	2 k	2			12	268	265	4	1	245	238	10
14	279	262	29					13	295	283	18	2	120	118	1
15	38	25	3	0	532	497	54	14	97	114	-12	3	154	138	16
16	226	219	10	1	367	337	69	15	117	122	-4	4	106	127	-17
17	137	116	18	2	1660	1556	70	16	81	66	7	5	364	359	8
18	120	117	2	3	171	143	51					6	87	107	-13
19	58	48	4	4	78	79	0					7	46	90	-21
20	228	200	35	5	84	62	22	6 k	2			8	45	2	7
				6	820	765	72	0	316	320	-6	9	65	40	9
				7	125	129	-6	1	174	172	1	10	231	237	-8
				8	432	416	33	2	250	236	23	11	153	159	-5
				9	103	115	-13	3	257	257	0	12	120	128	-6
1	738	729	13	10	412	396	31	4	129	150	-23	13	152	135	16
2	378	389	-28	11	539	519	35	5	78	33	19	14	131	105	20
3	447	441	14	12	267	275	-15	6	141	134	6	15	16	51	-8
4	-18	50	-20	13	230	213	26	7	240	231	13				
5	307	319	-30	14	226	216	16	8	113	115	-1	-5 k	3		
6	71	69	1	15	91	63	18	9	74	97	-14	0	-18	30	-4
7	699	728	-46	16	141	145	-4	10	-29	1	-3	1	372	385	-24
8	403	393	21	17	-37	12	-5	11	114	74	27	2	366	388	-44
9	117	125	-11	18	58	30	9	12	134	120	12	3	193	202	-14
10	70	42	18	19	41	54	-4	13	-30	40	-9	4	48	47	0
11	105	104	0					14	205	222	-21	5	-33	5	-4
12	109	90	19	3 k	2							6	305	322	-31
13	56	30	10					7 k	2			7	66	88	-13
14	48	25	7	1	69	48	16	1	186	189	-4	8	153	173	-23
15	440	439	1	2	32	13	5	2	71	69	0	9	154	127	28
16	-71	5	-19	3	767	736	43	3	-47	2	-8	10	55	53	0
17	145	145	0	4	114	65	54	4	92	75	9	11	143	157	-14
18	29	41	-3	5	650	631	25	5	128	136	-7	12	248	236	17
19	109	90	13	6	80	47	23	6	180	201	-26	13	60	38	7
20	44	81	-16	7	256	259	-5	7	306	305	1	14	88	30	24
				8	-33	33	-12	8	94	55	21	15	173	186	-14
				9	144	152	-12	9	19	15	0	16	99	81	10
0	164	18	172	10	244	241	4	10	54	48	2				
1	219	243	-72	11	102	118	-15	11	86	81	2	-4 k	3		
2	457	442	34	12	71	98	-19					1	183	202	-34
3	391	403	-32	13	251	259	-12					2	550	550	0
4	181	193	-30	14	131	150	-19					3	257	250	13
5	127	118	14	15	82	63	10					4	53	29	10
6	585	607	-41	16	51	51	0					5	143	129	18
7	255	258	-7	17	211	228	-23					6	159	174	-22
8	853	868	-19	18	116	110	4					7	355	357	-5
9	56	64	-5	19	264	234	42					8	209	189	30
10	221	206	31									9	204	229	-41
11	153	162	-13									10	33	75	-18
12	229	206	28	4 k	2							11	293	288	8
13	167	165	1									12	-36	24	-7
14	440	466	-37	0	79	67	7					13	244	218	37
15	48	1	9	1	262	250	24								
16	113	100	10	2	383	388	-11								
17	68	105	-22	3	114	104	11	-8 k	3						
				4	225	231	-12	1	103	94	5				

Supplementary material,  
page 27







J-4640-m31

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

2 k 6	0 -73 25 -13	14 155 151 4	-5 k 8
0 35 0 3	1 250 251 -1	0 k 7	1 43 38 1
1 -34 15 -6	2 -60 33 -15	1 122 114 7	2 165 169 -4
2 244 247 -5	3 63 57 2	2 196 207 -15	3 68 22 14
3 207 222 -23	4 131 72 40	3 291 294 -4	4 102 65 20
4 175 184 -12	5 84 50 15	4 214 205 13	5 99 97 0
5 64 60 2	6 189 174 16	5 143 144 0	6 141 104 28
6 368 379 -21	7 164 159 5	6 117 104 10	-4 k 8
7 30 8 3	8 117 47 39	7 83 95 -8	0 -29 4 -2
8 51 59 -3	9 203 177 29	8 98 115 -12	1 38 82 -17
9 30 50 -6	10 -41 32 -9	9 55 4 11	2 62 17 12
10 163 164 -1	-4 k 7	10 81 97 -10	3 125 136 -8
11 -6 8 0	1 122 135 -11	11 127 119 7	4 -37 17 -5
12 128 120 7	2 234 248 -20	12 165 194 -33	5 169 171 -2
13 107 117 -8	3 41 74 -12	13 158 159 0	6 164 161 2
14 64 94 -16	4 52 47 1	1 k 7	7 41 39 0
3 k 6	5 84 67 9	0 193 210 -16	8 95 51 21
1 229 208 31	6 81 82 0	1 47 55 -2	9 188 204 -18
2 15 52 -9	7 155 148 6	2 315 327 -20	-3 k 8
3 166 155 13	8 138 131 5	3 326 331 -8	1 12 8 0
4 32 10 3	9 90 90 0	4 95 88 5	2 45 30 3
5 407 420 -23	10 160 161 -1	5 62 55 3	3 53 96 -22
6 188 199 -13	11 66 28 12	6 234 263 -44	4 239 233 8
7 145 145 0	12 53 11 9	7 135 124 10	5 44 50 -2
8 102 87 10	-3 k 7	8 44 56 -4	6 96 107 -7
9 30 66 -2	0 259 261 -2	9 25 31 -1	7 183 184 0
10 118 109 5	1 177 150 30	10 -44 53 -17	8 163 129 32
11 102 72 19	2 -61 56 -25	11 122 87 27	9 -49 36 -13
12 16 12 0	3 242 252 -14	12 154 120 32	10 160 161 -1
13 162 143 18	4 105 92 9	13 38 67 -11	2 k 8
4 k 6	5 97 93 2	2 k 7	0 37 28 1
0 219 208 10	6 194 187 8	1 184 197 -15	1 148 134 -13
1 118 112 5	7 122 111 8	2 40 53 -4	2 -6 54 -10
2 115 135 -18	8 58 60 0	3 83 79 1	3 147 154 -7
3 35 42 -2	9 230 214 21	4 176 180 -4	4 152 166 -15
4 106 120 -11	10 170 160 10	5 382 398 -28	5 138 138 0
5 165 180 -17	11 130 110 16	6 97 86 7	6 57 66 -3
6 198 200 -1	12 -43 2 -6	7 115 125 -8	7 68 49 8
7 -71 50 -28	13 55 27 7	8 168 184 -19	8 163 173 -11
8 136 111 21	-2 k 7	9 35 57 -7	9 160 111 44
9 239 239 0	1 140 81 36	10 90 133 -34	10 -37 32 -8
10 8 15 0	2 172 155 20	11 45 5 7	11 217 206 13
11 56 18 10	3 -62 35 -19	12 88 59 15	-1 k 8
5 k 6	4 276 283 20	3 k 7	0 74 18 13
1 170 170 0	5 66 38 11	0 37 62 -9	1 73 44 12
2 182 163 23	6 62 12 14	1 95 99 -3	2 78 95 -11
3 57 30 9	7 258 256 1	2 104 82 15	3 45 76 -13
4 -34 66 -20	8 99 61 21	3 164 185 0	4 194 207 -17
5 113 110 2	9 41 94 -25	4 236 233 5	5 93 143 -41
6 -33 47 -11	10 307 302 7	5 121 132 -9	6 104 113 -6
7 287 273 20	11 64 71 -2	6 -51 42 -16	7 168 164 4
8 190 176 16	12 168 168 0	7 105 126 -17	8 -15 14 -1
-7 k 7	13 86 86 0	8 268 270 -2	9 -81 11 -14
0 31 16 1	14 73 116 -28	9 17 43 -5	10 149 139 8
1 113 133 -15	-1 k 7	10 105 90 10	11 79 58 10
2 -26 47 -9	0 76 23 14	4 k 7	0 k 8
-6 k 7	1 75 57 9	1 105 90 10	0 129 118 6
1 -57 22 -12	2 47 60 -5	2 114 111 2	1 124 112 10
2 191 203 -13	3 210 213 -4	3 39 37 0	2 186 193 -7
3 -72 7 -17	4 122 109 12	4 115 128 -9	3 345 344 0
4 56 0 10	5 77 76 0	5 41 42 0	4 166 179 -14
5 149 110 32	6 125 124 0	6 192 177 18	5 90 78 7
6 64 89 -12	7 49 57 -3	7 139 150 -9	6 198 230 -43
7 101 45 27	8 226 243 -25	-6 k 8	7 116 115 0
8 30 25 1	9 -41 19 -8	0 43 30 2	8 -48 61 -22
-5 k 7	10 64 21 13	0 43 30 2	9 18 37 -3
1 113 133 -15	11 338 350 -18	10 25 24 0	10 25 24 0
2 -26 47 -9	12 105 123 -14		
-6 k 7	13 41 46 -1		



S-4640-m32

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

Page 8

1	k	8		6	32	55	-7	2	37	23	2	4	171	149	23
				7	15	7	0	3	120	136	-13	5	65	87	-11
1	193	199	-7	8	-75	36	-24	4	-11	32	-3	6	-32	53	-13
2	104	102	1					5	170	161	9				
3	167	175	-8	s	k	8						0	k	9	
4	259	253	8					-2	k	9					
5	191	224	-44	1	78	31	19					1	-14	70	-17
6	93	64	17	2	41	72	-13	1	83	88	-3	2	99	96	2
7	68	5	17	3	-52	4	-10	2	61	34	9	3	16	18	0
8	135	149	-14	4	69	96	-15	3	6	17	0	4	228	222	8
9	72	51	9	5	39	29	2	4	248	251	-4	5	153	162	-9
								5	-34	37	-9				
	2	k	8		-4	k	9	6	75	56	8	1	k	9	
0	37	1	3	1	76	24	17					0	35	81	-13
1	-37	10	-5					-1	k	9		1	-66	4	-16
2	192	168	29		-3	k	9	0	152	159	-4	2	110	111	0
3	61	60	0					1	-40	22	-7	3	95	64	12
4	-39	11	-6	0	33	33	0	2	49	80	-14				
5	174	174	0	1	-29	51	-12	3	274	267	10				