

Supporting Information to Accompany

Mono (imidazolin-2-iminato) Actinide Complexes: Synthesis and Application in the Catalytic Dimerization of Aldehydes

Isabell S.R. Karmel[†], Natalia Fridman[†], Matthias Tamm^{*‡}, Moris S. Eisen^{*†}.

Schulich Faculty of Chemistry, Institute of Catalysis Science and Technology, Technion – Israel Institute of Technology, Technion City, 32000 Israel.

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Technische Universität Braunschweig, Hagenring 30, 38106 Braunschweig, Germany.

Table of Contents

1. Crystallographic Data for Complex 3	2
2. Crystallographic Data for Complex 4	15
3. Crystallographic Data for Complex 5	31
4. Crystallographic Data for Complex 6	49
5. Crystallographic Data for Complex 7	63
6. Crystallographic Data for Complex 8	79

1. Crystallographic Data for Complex 3

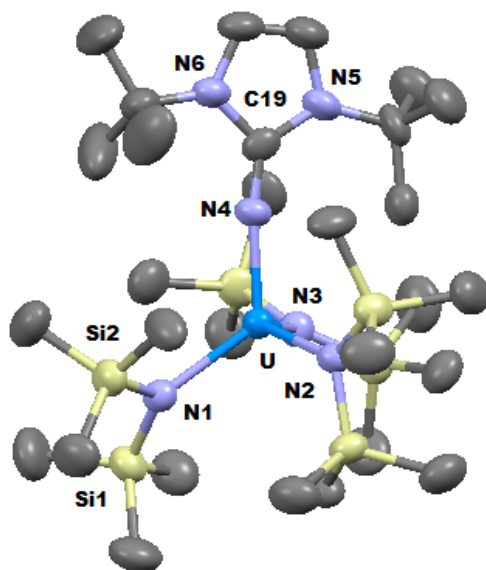


Figure 1: Molecular structure of $[(\text{Im}^{\text{tBu}}\text{N})\text{U}(\text{N}(\text{SiMe}_3)_2)_3]$ (**3**). Color code: U, green; N, blue; Si, yellow; C, grey. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

Table 1: Crystal Data and Structure Refinement for Complex 3.

Complex	3
Empirical Formula	C ₂₉ H ₇₄ N ₆ Si ₆ U
Formula weight/g mol ⁻¹	913.51
T/K	200(2)
$\lambda/\text{\AA}$	0.71073
Crystal System	Orthorhombic
Space group	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
<i>a</i> /\AA	11.9540(4)
<i>b</i> /\AA	19.2770(8)
<i>c</i> /\AA	19.4130(4)
$\alpha/^\circ$	90
$\beta/^\circ$	90
$\gamma/^\circ$	90
<i>V</i> /\AA ³	4473.5(3)
<i>Z</i>	4
$\rho/\text{g cm}^{-3}$	1.356
$\mu(\text{Mo-K}\alpha)/\text{mm}^{-1}$	3.814
Θ range for data collection/ $^\circ$	2.26 to 25.03
<i>F</i> (000)	1864
Limiting indices	0 $\leq h \leq 14$ 0 $\leq k \leq 21$ 0 $\leq l \leq 23$
Reflections collected/unique (<i>R</i> _{int})	4104/4104 (0.0802)
Completeness to Θ	99.1%
GOF on <i>F</i> ²	1.124
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	0.0351, 0.0713
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (all data)	0.0407, 0.0728
Largest diff. peak and hole/e\AA ⁻³	0.734 and -0.801

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
U(1)	5976(1)	-61(1)	8569(1)	36(1)
Si(1)	4982(3)	1397(2)	9653(2)	56(1)
Si(2)	3786(2)	64(2)	9718(1)	54(1)
Si(3)	4400(3)	-960(2)	7201(2)	52(1)
Si(4)	4204(2)	553(1)	7345(2)	48(1)
Si(5)	8160(3)	901(2)	7682(2)	58(1)
Si(6)	8520(2)	443(2)	9138(2)	56(1)
N(1)	4878(6)	544(4)	9358(4)	42(2)
N(2)	4828(5)	-207(4)	7627(4)	39(2)
N(3)	7665(6)	509(4)	8417(4)	44(2)
N(4)	6611(6)	-1066(4)	8772(4)	44(2)
N(5)	7849(7)	-1957(4)	8318(4)	53(2)
N(6)	7029(7)	-2173(4)	9313(4)	51(2)
C(1)	3791(11)	1974(6)	9365(7)	84(4)
C(2)	6282(10)	1849(6)	9364(7)	76(4)
C(3)	4989(13)	1460(8)	10623(6)	92(4)
C(4)	2428(9)	523(7)	9818(7)	78(4)
C(5)	4125(11)	-273(7)	10591(6)	90(4)
C(6)	3477(10)	-681(6)	9137(6)	71(3)
C(7)	2856(9)	-995(7)	7018(7)	78(4)
C(8)	4665(10)	-1761(5)	7707(6)	67(3)
C(9)	5143(11)	-1065(7)	6353(6)	81(4)
C(10)	2738(9)	672(7)	7653(7)	79(4)
C(11)	4206(11)	664(6)	6386(6)	79(3)
C(12)	4981(10)	1317(6)	7682(6)	63(3)
C(13)	8078(12)	1878(7)	7714(8)	82(4)
C(14)	7359(10)	612(6)	6894(5)	68(3)
C(15)	9668(9)	695(8)	7494(7)	89(5)
C(16)	9364(9)	1260(7)	9326(7)	77(4)
C(17)	9562(8)	-292(6)	9085(6)	71(4)
C(18)	7670(10)	256(7)	9929(5)	72(4)
C(19)	7102(8)	-1662(5)	8794(5)	46(2)
C(20)	8158(9)	-2619(5)	8552(7)	67(3)
C(21)	7680(9)	-2736(6)	9142(6)	64(3)
C(22)	6262(10)	-2176(6)	9910(6)	65(3)
C(23)	5103(11)	-2245(11)	9638(8)	126(7)
C(24)	6373(19)	-1538(8)	10323(7)	136(8)
C(25)	6494(14)	-2786(8)	10385(8)	118(6)
C(26)	8289(10)	-1716(6)	7636(6)	59(3)
C(27)	7839(10)	-1001(6)	7457(5)	61(3)
C(28)	7867(12)	-2216(7)	7087(6)	82(4)
C(29)	9549(10)	-1698(8)	7636(8)	90(5)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for shelxl.

U(1)-N(4)	2.118(8)
U(1)-N(2)	2.303(7)
U(1)-N(3)	2.318(7)
U(1)-N(1)	2.329(8)
U(1)-Si(6)	3.378(3)
U(1)-Si(4)	3.396(3)
U(1)-Si(2)	3.448(2)
Si(1)-N(1)	1.747(8)
Si(1)-C(2)	1.867(12)
Si(1)-C(3)	1.887(11)
Si(1)-C(1)	1.891(12)
Si(2)-N(1)	1.747(8)
Si(2)-C(4)	1.859(11)
Si(2)-C(5)	1.860(11)
Si(2)-C(6)	1.862(12)
Si(3)-N(2)	1.748(7)
Si(3)-C(8)	1.856(11)
Si(3)-C(7)	1.881(11)
Si(3)-C(9)	1.881(12)
Si(4)-N(2)	1.733(7)
Si(4)-C(12)	1.860(11)
Si(4)-C(10)	1.865(12)
Si(4)-C(11)	1.874(11)
Si(5)-N(3)	1.720(8)
Si(5)-C(15)	1.882(12)
Si(5)-C(13)	1.887(13)
Si(5)-C(14)	1.888(11)
Si(6)-N(3)	1.737(7)
Si(6)-C(18)	1.877(11)
Si(6)-C(17)	1.888(11)
Si(6)-C(16)	1.906(11)
N(4)-C(19)	1.290(12)
N(5)-C(20)	1.403(13)
N(5)-C(19)	1.407(12)
N(5)-C(26)	1.498(14)
N(6)-C(21)	1.377(13)
N(6)-C(19)	1.412(12)
N(6)-C(22)	1.478(14)
C(1)-H(1A)	0.9800
C(1)-H(1B)	0.9800
C(1)-H(1C)	0.9800
C(2)-H(2A)	0.9800
C(2)-H(2B)	0.9800
C(2)-H(2C)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9800
C(3)-H(3B)	0.9800
C(3)-H(3C)	0.9800
C(4)-H(4A)	0.9800
C(4)-H(4B)	0.9800
C(4)-H(4C)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9800
C(5)-H(5B)	0.9800

C(5)-H(5C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9800
C(6)-H(6B)	0.9800
C(6)-H(6C)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.9800
C(7)-H(7B)	0.9800
C(7)-H(7C)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9800
C(8)-H(8B)	0.9800
C(8)-H(8C)	0.9800
C(9)-H(9A)	0.9800
C(9)-H(9B)	0.9800
C(9)-H(9C)	0.9800
C(10)-H(10A)	0.9800
C(10)-H(10B)	0.9800
C(10)-H(10C)	0.9800
C(11)-H(11A)	0.9800
C(11)-H(11B)	0.9800
C(11)-H(11C)	0.9800
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-H(13A)	0.9800
C(13)-H(13B)	0.9800
C(13)-H(13C)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800
C(14)-H(14C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(15)-H(15C)	0.9800
C(16)-H(16A)	0.9800
C(16)-H(16B)	0.9800
C(16)-H(16C)	0.9800
C(17)-H(17A)	0.9800
C(17)-H(17B)	0.9800
C(17)-H(17C)	0.9800
C(18)-H(18A)	0.9800
C(18)-H(18B)	0.9800
C(18)-H(18C)	0.9800
C(20)-C(21)	1.300(16)
C(20)-H(20)	0.9500
C(21)-H(21)	0.9500
C(22)-C(24)	1.473(18)
C(22)-C(23)	1.489(18)
C(22)-C(25)	1.519(15)
C(23)-H(23A)	0.9800
C(23)-H(23B)	0.9800
C(23)-H(23C)	0.9800
C(24)-H(24A)	0.9800
C(24)-H(24B)	0.9800
C(24)-H(24C)	0.9800
C(25)-H(25A)	0.9800
C(25)-H(25B)	0.9800
C(25)-H(25C)	0.9800
C(26)-C(29)	1.506(16)

C(26)-C(27)	1.519(16)
C(26)-C(28)	1.524(16)
C(27)-H(27A)	0.9800
C(27)-H(27B)	0.9800
C(27)-H(27C)	0.9800
C(28)-H(28A)	0.9800
C(28)-H(28B)	0.9800
C(28)-H(28C)	0.9800
C(29)-H(29A)	0.9800
C(29)-H(29B)	0.9800
C(29)-H(29C)	0.9800
N(4)-U(1)-N(2)	104.5(3)
N(4)-U(1)-N(3)	98.3(3)
N(2)-U(1)-N(3)	118.5(2)
N(4)-U(1)-N(1)	122.5(3)
N(2)-U(1)-N(1)	104.3(2)
N(3)-U(1)-N(1)	109.7(3)
N(4)-U(1)-Si(6)	83.1(2)
N(2)-U(1)-Si(6)	146.22(17)
N(3)-U(1)-Si(6)	28.46(18)
N(1)-U(1)-Si(6)	98.53(18)
N(4)-U(1)-Si(4)	132.3(2)
N(2)-U(1)-Si(4)	27.82(18)
N(3)-U(1)-Si(4)	106.83(19)
N(1)-U(1)-Si(4)	86.22(18)
Si(6)-U(1)-Si(4)	133.65(7)
N(4)-U(1)-Si(2)	102.4(2)
N(2)-U(1)-Si(2)	94.00(17)
N(3)-U(1)-Si(2)	135.28(19)
N(1)-U(1)-Si(2)	27.38(19)
Si(6)-U(1)-Si(2)	116.86(7)
Si(4)-U(1)-Si(2)	87.41(7)
N(1)-Si(1)-C(2)	113.5(5)
N(1)-Si(1)-C(3)	112.9(5)
C(2)-Si(1)-C(3)	105.5(6)
N(1)-Si(1)-C(1)	113.8(5)
C(2)-Si(1)-C(1)	105.3(6)
C(3)-Si(1)-C(1)	105.1(7)
N(1)-Si(2)-C(4)	116.2(5)
N(1)-Si(2)-C(5)	112.8(5)
C(4)-Si(2)-C(5)	105.2(6)
N(1)-Si(2)-C(6)	108.3(4)
C(4)-Si(2)-C(6)	104.9(6)
C(5)-Si(2)-C(6)	109.0(6)
N(1)-Si(2)-U(1)	37.8(3)
C(4)-Si(2)-U(1)	139.8(4)
C(5)-Si(2)-U(1)	113.6(4)
C(6)-Si(2)-U(1)	72.8(3)
N(2)-Si(3)-C(8)	113.0(4)
N(2)-Si(3)-C(7)	114.0(5)
C(8)-Si(3)-C(7)	103.8(6)
N(2)-Si(3)-C(9)	111.4(5)
C(8)-Si(3)-C(9)	107.0(6)
C(7)-Si(3)-C(9)	107.1(6)
N(2)-Si(4)-C(12)	110.0(4)

N(2)-Si(4)-C(10)	114.0(5)
C(12)-Si(4)-C(10)	105.0(6)
N(2)-Si(4)-C(11)	114.2(5)
C(12)-Si(4)-C(11)	105.0(5)
C(10)-Si(4)-C(11)	107.8(6)
N(2)-Si(4)-U(1)	38.3(2)
C(12)-Si(4)-U(1)	73.6(4)
C(10)-Si(4)-U(1)	113.9(4)
C(11)-Si(4)-U(1)	137.2(4)
N(3)-Si(5)-C(15)	113.5(6)
N(3)-Si(5)-C(13)	113.1(5)
C(15)-Si(5)-C(13)	105.4(7)
N(3)-Si(5)-C(14)	111.6(4)
C(15)-Si(5)-C(14)	105.5(6)
C(13)-Si(5)-C(14)	107.1(6)
N(3)-Si(6)-C(18)	110.8(4)
N(3)-Si(6)-C(17)	113.5(5)
C(18)-Si(6)-C(17)	105.0(6)
N(3)-Si(6)-C(16)	113.9(5)
C(18)-Si(6)-C(16)	106.8(6)
C(17)-Si(6)-C(16)	106.3(5)
N(3)-Si(6)-U(1)	39.5(2)
C(18)-Si(6)-U(1)	74.0(3)
C(17)-Si(6)-U(1)	111.1(4)
C(16)-Si(6)-U(1)	141.0(4)
Si(2)-N(1)-Si(1)	114.8(4)
Si(2)-N(1)-U(1)	114.8(4)
Si(1)-N(1)-U(1)	130.3(4)
Si(4)-N(2)-Si(3)	115.3(4)
Si(4)-N(2)-U(1)	113.8(4)
Si(3)-N(2)-U(1)	130.7(4)
Si(5)-N(3)-Si(6)	119.9(4)
Si(5)-N(3)-U(1)	127.8(4)
Si(6)-N(3)-U(1)	112.1(4)
C(19)-N(4)-U(1)	169.5(7)
C(20)-N(5)-C(19)	108.8(9)
C(20)-N(5)-C(26)	118.4(9)
C(19)-N(5)-C(26)	132.7(9)
C(21)-N(6)-C(19)	110.0(9)
C(21)-N(6)-C(22)	122.5(9)
C(19)-N(6)-C(22)	127.0(8)
Si(1)-C(1)-H(1A)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1B)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2A)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2B)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3A)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5

Si(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4A)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4B)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5A)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5B)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6A)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6B)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7A)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8A)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8B)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9A)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9B)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10A)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10B)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11A)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12A)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5

H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13A)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14A)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15A)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16A)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16B)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17A)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18A)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
N(4)-C(19)-N(5)	128.9(9)
N(4)-C(19)-N(6)	128.0(9)
N(5)-C(19)-N(6)	103.1(8)
C(21)-C(20)-N(5)	109.1(10)
C(21)-C(20)-H(20)	125.4
N(5)-C(20)-H(20)	125.4
C(20)-C(21)-N(6)	108.9(10)
C(20)-C(21)-H(21)	125.5
N(6)-C(21)-H(21)	125.5
C(24)-C(22)-N(6)	111.6(12)
C(24)-C(22)-C(23)	110.6(14)
N(6)-C(22)-C(23)	107.4(10)
C(24)-C(22)-C(25)	107.4(11)
N(6)-C(22)-C(25)	111.5(10)
C(23)-C(22)-C(25)	108.3(13)
C(22)-C(23)-H(23A)	109.5
C(22)-C(23)-H(23B)	109.5
H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
C(22)-C(23)-H(23C)	109.5

H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
C(22)-C(24)-H(24A)	109.5
C(22)-C(24)-H(24B)	109.5
H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
C(22)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5
C(22)-C(25)-H(25A)	109.5
C(22)-C(25)-H(25B)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5
C(22)-C(25)-H(25C)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5
H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5
N(5)-C(26)-C(29)	111.0(12)
N(5)-C(26)-C(27)	111.0(9)
C(29)-C(26)-C(27)	109.5(12)
N(5)-C(26)-C(28)	107.8(10)
C(29)-C(26)-C(28)	110.2(11)
C(27)-C(26)-C(28)	107.3(10)
C(26)-C(27)-H(27A)	109.5
C(26)-C(27)-H(27B)	109.5
H(27A)-C(27)-H(27B)	109.5
C(26)-C(27)-H(27C)	109.5
H(27A)-C(27)-H(27C)	109.5
H(27B)-C(27)-H(27C)	109.5
C(26)-C(28)-H(28A)	109.5
C(26)-C(28)-H(28B)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(26)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(26)-C(29)-H(29A)	109.5
C(26)-C(29)-H(29B)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29B)	109.5
C(26)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29B)-C(29)-H(29C)	109.5

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
U(1)	29(1)	39(1)	40(1)	0(1)	-2(1)	0(1)
Si(1)	58(2)	52(2)	58(2)	-11(2)	2(2)	3(2)
Si(2)	45(1)	59(2)	57(1)	6(2)	13(1)	1(2)
Si(3)	56(2)	45(2)	57(2)	-6(1)	-17(1)	1(1)
Si(4)	45(2)	43(2)	56(2)	7(1)	-8(1)	1(1)
Si(5)	40(2)	73(2)	62(2)	5(2)	7(2)	15(2)
Si(6)	37(1)	67(2)	64(2)	-6(2)	-21(1)	4(1)
N(1)	36(4)	43(5)	47(4)	4(4)	-2(4)	2(3)
N(2)	32(3)	37(5)	47(4)	1(3)	-2(3)	1(3)
N(3)	35(4)	49(5)	48(5)	-1(4)	-3(3)	5(3)
N(4)	39(4)	39(5)	54(5)	0(3)	-1(4)	8(4)
N(5)	46(5)	49(5)	63(5)	-5(4)	2(4)	15(4)
N(6)	51(5)	44(5)	57(5)	0(4)	-6(4)	13(4)
C(1)	88(10)	49(7)	115(10)	-10(7)	-4(9)	16(7)
C(2)	68(8)	65(8)	95(9)	-9(7)	2(7)	17(6)
C(3)	121(12)	98(11)	56(7)	-23(7)	0(8)	5(9)
C(4)	50(6)	85(9)	100(10)	11(8)	18(7)	6(6)
C(5)	90(9)	114(11)	68(7)	31(7)	12(7)	21(9)
C(6)	72(7)	54(7)	85(8)	3(6)	30(7)	13(6)
C(7)	54(7)	71(8)	110(10)	1(7)	-26(7)	13(6)
C(8)	81(8)	37(6)	84(8)	1(6)	-25(7)	0(6)
C(9)	104(10)	81(8)	57(7)	-15(7)	-11(8)	19(7)
C(10)	59(7)	66(8)	110(10)	7(8)	0(7)	9(6)
C(11)	89(9)	72(7)	75(7)	15(7)	-24(8)	7(7)
C(12)	67(7)	45(7)	77(8)	1(6)	13(6)	2(6)
C(13)	72(9)	68(9)	106(11)	9(8)	21(9)	28(7)
C(14)	69(8)	72(8)	63(7)	18(6)	0(6)	12(6)
C(15)	51(7)	124(13)	92(9)	-2(9)	17(7)	22(8)
C(16)	51(7)	90(9)	90(9)	-19(8)	-18(6)	20(6)
C(17)	30(5)	98(10)	85(8)	-9(7)	4(5)	5(6)
C(18)	74(7)	83(10)	59(6)	2(6)	-20(6)	3(7)
C(19)	37(5)	48(6)	52(6)	6(4)	-16(4)	5(5)
C(20)	69(7)	50(6)	81(8)	-6(7)	-2(7)	20(5)
C(21)	70(7)	42(6)	80(8)	1(6)	-15(7)	15(6)
C(22)	78(8)	56(7)	61(7)	13(5)	1(6)	19(6)
C(23)	64(9)	187(19)	127(14)	61(13)	32(9)	9(11)
C(24)	260(30)	78(10)	65(8)	-1(7)	32(12)	11(14)
C(25)	151(15)	100(12)	104(11)	56(10)	47(11)	49(11)
C(26)	65(8)	62(8)	50(7)	-18(6)	18(6)	2(6)
C(27)	62(7)	74(8)	48(6)	1(6)	6(6)	2(6)
C(28)	94(9)	78(9)	73(8)	-26(7)	1(8)	8(8)
C(29)	58(7)	108(12)	102(11)	-15(9)	9(7)	12(8)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	3904	2444	9546	126
H(1B)	3083	1788	9541	126
H(1C)	3768	1989	8861	126
H(2A)	6288	2323	9545	114
H(2B)	6301	1862	8859	114
H(2C)	6938	1597	9535	114
H(3A)	5052	1948	10761	138
H(3B)	5627	1199	10807	138
H(3C)	4293	1265	10806	138
H(4A)	1878	208	10025	118
H(4B)	2161	675	9365	118
H(4C)	2529	928	10117	118
H(5A)	3486	-536	10770	136
H(5B)	4287	116	10900	136
H(5C)	4781	-577	10564	136
H(6A)	2866	-957	9331	106
H(6B)	4146	-971	9091	106
H(6C)	3258	-506	8683	106
H(7A)	2677	-1431	6783	118
H(7B)	2647	-603	6723	118
H(7C)	2440	-969	7452	118
H(8A)	4415	-2166	7443	101
H(8B)	4254	-1738	8143	101
H(8C)	5468	-1802	7801	101
H(9A)	4895	-1494	6130	121
H(9B)	5952	-1086	6432	121
H(9C)	4970	-668	6055	121
H(10A)	2443	1112	7478	118
H(10B)	2728	677	8158	118
H(10C)	2273	289	7485	118
H(11A)	3846	1104	6267	118
H(11B)	3795	280	6173	118
H(11C)	4979	665	6218	118
H(12A)	4622	1744	7521	94
H(12B)	5755	1302	7517	94
H(12C)	4976	1307	8187	94
H(13A)	8371	2072	7284	123
H(13B)	8523	2049	8103	123
H(13C)	7297	2020	7773	123
H(14A)	7663	843	6485	102
H(14B)	6568	735	6947	102
H(14C)	7429	109	6841	102
H(15A)	9898	933	7070	133
H(15B)	9757	193	7435	133
H(15C)	10136	853	7878	133
H(16A)	9827	1185	9736	116
H(16B)	8853	1649	9407	116
H(16C)	9846	1365	8931	116

H(17A)	10013	-303	9506	107
H(17B)	10051	-222	8686	107
H(17C)	9161	-733	9035	107
H(18A)	8167	216	10328	108
H(18B)	7260	-180	9866	108
H(18C)	7137	635	10006	108
H(20)	8639	-2931	8316	80
H(21)	7766	-3144	9411	76
H(23A)	4572	-2253	10023	188
H(23B)	5039	-2678	9376	188
H(23C)	4934	-1851	9337	188
H(24A)	5857	-1557	10715	204
H(24B)	6194	-1135	10036	204
H(24C)	7143	-1498	10493	204
H(25A)	5973	-2773	10775	177
H(25B)	7264	-2757	10556	177
H(25C)	6393	-3220	10130	177
H(27A)	8122	-860	7005	92
H(27B)	8085	-666	7806	92
H(27C)	7020	-1016	7446	92
H(28A)	8135	-2067	6633	123
H(28B)	7047	-2221	7089	123
H(28C)	8148	-2684	7184	123
H(29A)	9816	-1545	7183	134
H(29B)	9839	-2164	7733	134
H(29C)	9811	-1375	7990	134

2. Crytsallographic Data for Complex **4**.

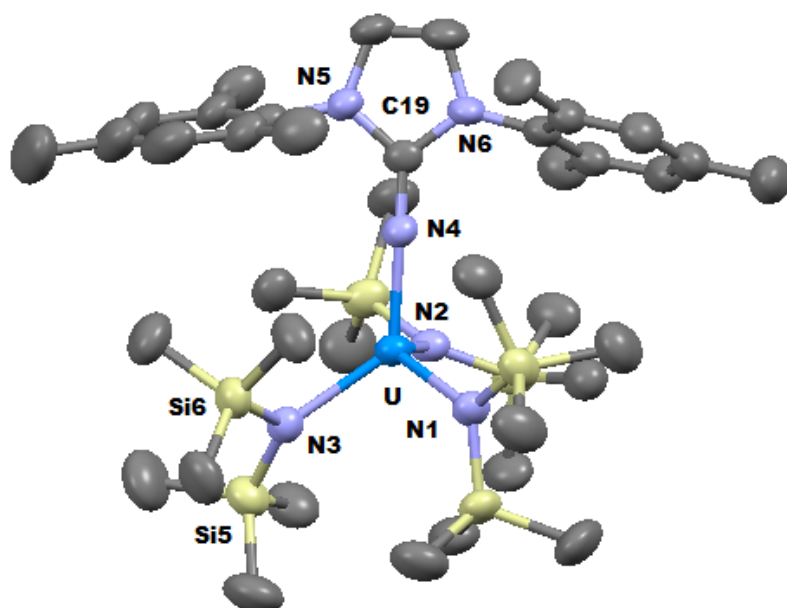


Figure 2: Molecular structure of $[(\text{Im}^{\text{Mes}}\text{N})\text{U}(\text{N}(\text{SiMe}_3)_2)_3]$ (**4**). Color code: U, green; N, blue; Si, yellow; C, grey. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

Table 6: Crystallographic Data and Structure Refinement for Complex 4.

Complex	4
Empirical Formula	C ₃₉ H ₇₈ N ₆ Si ₆ U
Formula weight/g mol ⁻¹	1037.64
T/K	200(2)
$\lambda/\text{\AA}$	0.71073
Crystal System	Monoclinic
Space group	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>
<i>a</i> /\AA	21.6750(8)
<i>b</i> /\AA	12.2840(11)
<i>c</i> /\AA	20.0070(14)
$\alpha/^\circ$	90
$\beta/^\circ$	99.745(4)
$\gamma/^\circ$	90
<i>V</i> /\AA ³	5250.1(6)
<i>Z</i>	4
$\rho/\text{g cm}^{-3}$	1.313
$\mu(\text{Mo-K}\alpha)/\text{mm}^{-1}$	3.259
Θ range for data collection/ $^\circ$	0.95 to 24.13
<i>F</i> (000)	2120
Limiting indices	-24 $\leq h \leq$ 23 -13 $\leq k \leq$ 0 0 $\leq l \leq$ 22
Reflections collected/unique (<i>R</i> _{int})	7372/7372 (0.0650)
Completeness to Θ	88.4%
GOF on <i>F</i> ²	1.023
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ [<i>I</i> >2 σ (<i>I</i>)]	0.0350, 0.0788
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (all data)	0.0522, 0.0837
Largest diff. peak and hole/e\AA ⁻³	0.939 and -0.817

Table 7. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
U(1)	2499(1)	643(1)	4083(1)	41(1)
Si(1)	1410(1)	-1040(1)	3114(1)	59(1)
Si(2)	972(1)	1246(1)	3037(1)	56(1)
Si(3)	3390(1)	305(1)	5648(1)	57(1)
Si(4)	2131(1)	-722(1)	5566(1)	54(1)
Si(5)	3595(1)	-1449(1)	3591(1)	62(1)
Si(6)	3338(1)	629(1)	2842(1)	55(1)
N(1)	1551(2)	311(3)	3374(2)	46(1)
N(2)	2666(2)	-43(3)	5179(2)	45(1)
N(3)	3195(2)	-215(3)	3491(2)	43(1)
N(4)	2500(2)	2328(3)	4360(2)	41(1)
N(5)	3072(2)	4001(3)	4733(2)	44(1)
N(6)	2114(2)	3891(3)	4912(2)	48(1)
C(1)	1921(3)	-1969(5)	3732(4)	77(2)
C(2)	1574(4)	-1331(6)	2252(4)	87(2)
C(3)	597(3)	-1526(6)	3133(5)	97(3)
C(4)	601(4)	945(6)	2128(4)	85(2)
C(5)	1268(3)	2661(5)	3003(4)	72(2)
C(6)	341(3)	1288(6)	3551(4)	91(2)
C(7)	3801(4)	-844(6)	6167(4)	90(2)
C(8)	3371(3)	1469(5)	6255(3)	73(2)
C(9)	3908(3)	775(5)	5050(3)	67(2)
C(10)	2167(4)	-382(5)	6488(3)	74(2)
C(11)	2244(3)	-2239(4)	5583(3)	69(2)
C(12)	1325(3)	-366(5)	5113(3)	68(2)
C(13)	3582(4)	-2140(5)	4416(4)	80(2)
C(14)	4446(4)	-1280(7)	3569(5)	105(3)
C(15)	3295(4)	-2474(5)	2901(4)	95(3)
C(16)	3276(4)	-45(6)	1992(3)	82(2)
C(17)	4111(3)	1330(6)	3046(4)	89(2)
C(18)	2735(3)	1733(5)	2711(3)	73(2)
C(19)	2553(3)	3302(4)	4635(2)	40(1)
C(20)	2943(3)	4955(4)	5067(3)	58(2)
C(21)	2372(3)	4883(4)	5171(3)	61(2)
C(22)	1462(3)	3667(4)	4870(3)	47(1)
C(23)	1031(3)	4268(4)	4398(3)	51(2)
C(24)	409(3)	4087(5)	4394(4)	62(2)
C(25)	193(3)	3369(5)	4823(4)	62(2)
C(26)	627(3)	2819(5)	5289(3)	60(2)
C(27)	1264(3)	2952(4)	5326(3)	52(2)
C(28)	1738(3)	2405(5)	5870(3)	73(2)
C(29)	1235(3)	5095(5)	3932(4)	70(2)
C(30)	-495(3)	3184(6)	4789(4)	92(2)
C(31)	3591(3)	3931(4)	4385(3)	50(2)
C(32)	4183(3)	3746(5)	4754(3)	59(2)
C(33)	4682(4)	3740(6)	4400(5)	83(2)
C(34)	4591(5)	3949(7)	3719(5)	94(3)
C(35)	3997(5)	4199(6)	3376(4)	91(3)
C(36)	3484(3)	4211(5)	3700(4)	63(2)
C(37)	2847(4)	4554(5)	3327(4)	82(2)
C(38)	4310(3)	3575(5)	5515(3)	77(2)

C(39)

5135(5)

3918(9)

3339(6)

144(4)

Table 8. Bond lengths [Å] and angles [deg] for shelxl.

U(1)-N(4)	2.143(4)
U(1)-N(2)	2.319(4)
U(1)-N(3)	2.323(4)
U(1)-N(1)	2.328(4)
U(1)-Si(3)	3.4133(17)
Si(1)-N(1)	1.750(4)
Si(1)-C(2)	1.855(7)
Si(1)-C(3)	1.867(7)
Si(1)-C(1)	1.896(7)
Si(2)-N(1)	1.750(5)
Si(2)-C(6)	1.846(7)
Si(2)-C(5)	1.857(6)
Si(2)-C(4)	1.896(7)
Si(3)-N(2)	1.741(5)
Si(3)-C(9)	1.864(7)
Si(3)-C(8)	1.882(6)
Si(3)-C(7)	1.885(7)
Si(4)-N(2)	1.715(5)
Si(4)-C(12)	1.879(7)
Si(4)-C(10)	1.879(6)
Si(4)-C(11)	1.880(6)
Si(5)-N(3)	1.741(5)
Si(5)-C(13)	1.862(7)
Si(5)-C(14)	1.863(8)
Si(5)-C(15)	1.900(7)
Si(6)-N(3)	1.730(4)
Si(6)-C(17)	1.866(7)
Si(6)-C(18)	1.870(6)
Si(6)-C(16)	1.875(7)
N(4)-C(19)	1.313(6)
N(5)-C(20)	1.400(7)
N(5)-C(19)	1.401(6)
N(5)-C(31)	1.424(7)
N(6)-C(19)	1.383(7)
N(6)-C(21)	1.403(7)
N(6)-C(22)	1.429(7)
C(1)-H(1A)	0.9800
C(1)-H(1B)	0.9800
C(1)-H(1C)	0.9800
C(2)-H(2A)	0.9800
C(2)-H(2B)	0.9800
C(2)-H(2C)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9800
C(3)-H(3B)	0.9800
C(3)-H(3C)	0.9800
C(4)-H(4A)	0.9800
C(4)-H(4B)	0.9800
C(4)-H(4C)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9800
C(5)-H(5B)	0.9800
C(5)-H(5C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9800

C(6)-H(6B)	0.9800
C(6)-H(6C)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.9800
C(7)-H(7B)	0.9800
C(7)-H(7C)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9800
C(8)-H(8B)	0.9800
C(8)-H(8C)	0.9800
C(9)-H(9A)	0.9800
C(9)-H(9B)	0.9800
C(9)-H(9C)	0.9800
C(10)-H(10A)	0.9800
C(10)-H(10B)	0.9800
C(10)-H(10C)	0.9800
C(11)-H(11A)	0.9800
C(11)-H(11B)	0.9800
C(11)-H(11C)	0.9800
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-H(13A)	0.9800
C(13)-H(13B)	0.9800
C(13)-H(13C)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800
C(14)-H(14C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(15)-H(15C)	0.9800
C(16)-H(16A)	0.9800
C(16)-H(16B)	0.9800
C(16)-H(16C)	0.9800
C(17)-H(17A)	0.9800
C(17)-H(17B)	0.9800
C(17)-H(17C)	0.9800
C(18)-H(18A)	0.9800
C(18)-H(18B)	0.9800
C(18)-H(18C)	0.9800
C(20)-C(21)	1.291(8)
C(20)-H(20)	0.9500
C(21)-H(21)	0.9500
C(22)-C(27)	1.387(8)
C(22)-C(23)	1.417(8)
C(23)-C(24)	1.366(9)
C(23)-C(29)	1.496(8)
C(24)-C(25)	1.366(9)
C(24)-H(24)	0.9500
C(25)-C(26)	1.382(9)
C(25)-C(30)	1.499(9)
C(26)-C(27)	1.380(8)
C(26)-H(26)	0.9500
C(27)-C(28)	1.520(8)
C(28)-H(28A)	0.9800
C(28)-H(28B)	0.9800
C(28)-H(28C)	0.9800
C(29)-H(29A)	0.9800

C(29)-H(29B)	0.9800
C(29)-H(29C)	0.9800
C(30)-H(30A)	0.9800
C(30)-H(30B)	0.9800
C(30)-H(30C)	0.9800
C(31)-C(32)	1.384(8)
C(31)-C(36)	1.395(9)
C(32)-C(33)	1.389(9)
C(32)-C(38)	1.516(9)
C(33)-C(34)	1.368(11)
C(33)-H(33)	0.9500
C(34)-C(35)	1.386(12)
C(34)-C(39)	1.507(11)
C(35)-C(36)	1.379(11)
C(35)-H(35)	0.9500
C(36)-C(37)	1.515(10)
C(37)-H(37A)	0.9800
C(37)-H(37B)	0.9800
C(37)-H(37C)	0.9800
C(38)-H(38A)	0.9800
C(38)-H(38B)	0.9800
C(38)-H(38C)	0.9800
C(39)-H(39A)	0.9800
C(39)-H(39B)	0.9800
C(39)-H(39C)	0.9800
N(4)-U(1)-N(2)	96.54(15)
N(4)-U(1)-N(3)	126.74(15)
N(2)-U(1)-N(3)	107.85(15)
N(4)-U(1)-N(1)	106.81(15)
N(2)-U(1)-N(1)	119.53(16)
N(3)-U(1)-N(1)	101.04(15)
N(4)-U(1)-Si(3)	84.55(12)
N(2)-U(1)-Si(3)	27.84(11)
N(3)-U(1)-Si(3)	95.57(11)
N(1)-U(1)-Si(3)	147.36(12)
N(1)-Si(1)-C(2)	114.0(3)
N(1)-Si(1)-C(3)	114.6(3)
C(2)-Si(1)-C(3)	106.7(4)
N(1)-Si(1)-C(1)	108.9(3)
C(2)-Si(1)-C(1)	107.9(3)
C(3)-Si(1)-C(1)	104.1(3)
N(1)-Si(2)-C(6)	110.7(3)
N(1)-Si(2)-C(5)	113.6(3)
C(6)-Si(2)-C(5)	106.7(3)
N(1)-Si(2)-C(4)	113.6(3)
C(6)-Si(2)-C(4)	107.8(4)
C(5)-Si(2)-C(4)	103.9(3)
N(2)-Si(3)-C(9)	108.5(3)
N(2)-Si(3)-C(8)	114.7(3)
C(9)-Si(3)-C(8)	105.2(3)
N(2)-Si(3)-C(7)	114.3(3)
C(9)-Si(3)-C(7)	107.8(4)
C(8)-Si(3)-C(7)	105.8(3)
N(2)-Si(3)-U(1)	38.48(14)
C(9)-Si(3)-U(1)	71.5(2)

C(8)-Si(3)-U(1)	115.4(2)
C(7)-Si(3)-U(1)	137.6(2)
N(2)-Si(4)-C(12)	108.3(3)
N(2)-Si(4)-C(10)	114.6(3)
C(12)-Si(4)-C(10)	107.6(3)
N(2)-Si(4)-C(11)	113.2(3)
C(12)-Si(4)-C(11)	110.3(3)
C(10)-Si(4)-C(11)	102.6(3)
N(3)-Si(5)-C(13)	114.6(3)
N(3)-Si(5)-C(14)	112.1(3)
C(13)-Si(5)-C(14)	103.6(4)
N(3)-Si(5)-C(15)	113.0(3)
C(13)-Si(5)-C(15)	106.7(3)
C(14)-Si(5)-C(15)	106.0(4)
N(3)-Si(6)-C(17)	112.4(3)
N(3)-Si(6)-C(18)	109.2(3)
C(17)-Si(6)-C(18)	106.0(3)
N(3)-Si(6)-C(16)	115.0(3)
C(17)-Si(6)-C(16)	109.0(4)
C(18)-Si(6)-C(16)	104.6(3)
Si(2)-N(1)-Si(1)	115.5(3)
Si(2)-N(1)-U(1)	128.4(2)
Si(1)-N(1)-U(1)	116.1(2)
Si(4)-N(2)-Si(3)	119.6(3)
Si(4)-N(2)-U(1)	126.5(2)
Si(3)-N(2)-U(1)	113.7(2)
Si(6)-N(3)-Si(5)	117.3(3)
Si(6)-N(3)-U(1)	109.0(2)
Si(5)-N(3)-U(1)	133.7(2)
C(19)-N(4)-U(1)	169.8(4)
C(20)-N(5)-C(19)	111.1(5)
C(20)-N(5)-C(31)	121.5(4)
C(19)-N(5)-C(31)	125.2(4)
C(19)-N(6)-C(21)	110.2(5)
C(19)-N(6)-C(22)	128.0(4)
C(21)-N(6)-C(22)	121.2(5)
Si(1)-C(1)-H(1A)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1B)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2A)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2B)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3A)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4A)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4B)	109.5

H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5A)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5B)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6A)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6B)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7A)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8A)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8B)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9A)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9B)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10A)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10B)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11A)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12A)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13A)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13C)	109.5

H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14A)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15A)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16A)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16B)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17A)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18A)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
N(4)-C(19)-N(6)	128.8(5)
N(4)-C(19)-N(5)	128.9(5)
N(6)-C(19)-N(5)	102.3(4)
C(21)-C(20)-N(5)	107.1(5)
C(21)-C(20)-H(20)	126.5
N(5)-C(20)-H(20)	126.5
C(20)-C(21)-N(6)	109.4(5)
C(20)-C(21)-H(21)	125.3
N(6)-C(21)-H(21)	125.3
C(27)-C(22)-C(23)	121.7(6)
C(27)-C(22)-N(6)	119.8(5)
C(23)-C(22)-N(6)	118.3(5)
C(24)-C(23)-C(22)	117.3(6)
C(24)-C(23)-C(29)	120.2(6)
C(22)-C(23)-C(29)	122.5(6)
C(23)-C(24)-C(25)	122.9(6)
C(23)-C(24)-H(24)	118.6
C(25)-C(24)-H(24)	118.6
C(24)-C(25)-C(26)	118.3(6)
C(24)-C(25)-C(30)	120.8(7)
C(26)-C(25)-C(30)	120.9(7)
C(27)-C(26)-C(25)	122.6(6)
C(27)-C(26)-H(26)	118.7
C(25)-C(26)-H(26)	118.7

C(26)-C(27)-C(22)	117.2(6)
C(26)-C(27)-C(28)	122.4(6)
C(22)-C(27)-C(28)	120.3(6)
C(27)-C(28)-H(28A)	109.5
C(27)-C(28)-H(28B)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(27)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(23)-C(29)-H(29A)	109.5
C(23)-C(29)-H(29B)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29B)	109.5
C(23)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29B)-C(29)-H(29C)	109.5
C(25)-C(30)-H(30A)	109.5
C(25)-C(30)-H(30B)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30B)	109.5
C(25)-C(30)-H(30C)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30C)	109.5
H(30B)-C(30)-H(30C)	109.5
C(32)-C(31)-C(36)	123.3(6)
C(32)-C(31)-N(5)	119.2(6)
C(36)-C(31)-N(5)	116.9(6)
C(31)-C(32)-C(33)	117.4(7)
C(31)-C(32)-C(38)	123.5(6)
C(33)-C(32)-C(38)	119.1(7)
C(34)-C(33)-C(32)	120.8(8)
C(34)-C(33)-H(33)	119.6
C(32)-C(33)-H(33)	119.6
C(33)-C(34)-C(35)	120.0(8)
C(33)-C(34)-C(39)	120.4(10)
C(35)-C(34)-C(39)	119.6(10)
C(36)-C(35)-C(34)	121.6(8)
C(36)-C(35)-H(35)	119.2
C(34)-C(35)-H(35)	119.2
C(35)-C(36)-C(31)	116.5(7)
C(35)-C(36)-C(37)	120.8(7)
C(31)-C(36)-C(37)	122.6(6)
C(36)-C(37)-H(37A)	109.5
C(36)-C(37)-H(37B)	109.5
H(37A)-C(37)-H(37B)	109.5
C(36)-C(37)-H(37C)	109.5
H(37A)-C(37)-H(37C)	109.5
H(37B)-C(37)-H(37C)	109.5
C(32)-C(38)-H(38A)	109.5
C(32)-C(38)-H(38B)	109.5
H(38A)-C(38)-H(38B)	109.5
C(32)-C(38)-H(38C)	109.5
H(38A)-C(38)-H(38C)	109.5
H(38B)-C(38)-H(38C)	109.5
C(34)-C(39)-H(39A)	109.5
C(34)-C(39)-H(39B)	109.5
H(39A)-C(39)-H(39B)	109.5
C(34)-C(39)-H(39C)	109.5
H(39A)-C(39)-H(39C)	109.5

H(39B)-C(39)-H(39C)

109.5

Table 9. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + \dots + 2 h k a^* b^* U12]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
U(1)	46(1)	36(1)	39(1)	-3(1)	3(1)	3(1)
Si(1)	57(1)	51(1)	66(1)	-16(1)	4(1)	13(1)
Si(2)	47(1)	64(1)	54(1)	-12(1)	-3(1)	6(1)
Si(3)	68(1)	55(1)	43(1)	0(1)	-5(1)	7(1)
Si(4)	77(1)	40(1)	47(1)	4(1)	13(1)	6(1)
Si(5)	63(1)	55(1)	66(1)	-2(1)	11(1)	13(1)
Si(6)	54(1)	64(1)	49(1)	0(1)	16(1)	2(1)
N(1)	43(3)	48(3)	46(3)	-8(2)	1(2)	4(2)
N(2)	57(3)	36(2)	41(3)	0(2)	4(2)	2(2)
N(3)	43(3)	47(2)	39(3)	1(2)	4(2)	3(2)
N(4)	44(3)	36(2)	42(3)	1(2)	6(2)	4(2)
N(5)	49(3)	37(2)	46(3)	-3(2)	8(2)	9(2)
N(6)	55(3)	30(2)	59(3)	-8(2)	15(3)	2(2)
C(1)	97(6)	49(4)	86(5)	-5(4)	21(4)	13(4)
C(2)	114(7)	70(5)	75(5)	-24(4)	10(5)	5(4)
C(3)	66(5)	78(5)	147(8)	-17(5)	14(5)	31(4)
C(4)	78(5)	89(5)	77(5)	-13(4)	-15(4)	21(4)
C(5)	70(5)	65(4)	77(5)	-2(3)	-2(4)	15(3)
C(6)	73(5)	99(6)	100(6)	-17(5)	16(5)	13(4)
C(7)	90(6)	93(5)	77(6)	15(4)	-15(5)	9(4)
C(8)	91(6)	72(4)	53(4)	-13(3)	3(4)	20(4)
C(9)	58(4)	77(4)	63(5)	-10(3)	1(4)	12(3)
C(10)	110(6)	64(4)	50(4)	10(3)	18(4)	1(4)
C(11)	98(6)	47(4)	65(4)	11(3)	21(4)	6(3)
C(12)	74(5)	61(4)	71(5)	0(3)	20(4)	6(3)
C(13)	101(6)	60(4)	81(5)	10(4)	19(5)	18(4)
C(14)	74(6)	110(6)	133(8)	16(6)	25(5)	32(5)
C(15)	134(8)	64(4)	91(6)	-24(4)	28(6)	9(4)
C(16)	89(6)	107(6)	58(5)	-6(4)	31(4)	7(5)
C(17)	70(5)	83(5)	117(7)	11(5)	24(5)	19(4)
C(18)	84(5)	70(4)	71(5)	17(4)	32(4)	15(4)
C(19)	51(4)	39(3)	26(3)	3(2)	-1(3)	1(3)
C(20)	61(5)	40(3)	70(5)	-14(3)	3(4)	12(3)
C(21)	71(5)	36(3)	75(5)	-11(3)	7(4)	2(3)
C(22)	53(4)	38(3)	52(4)	-10(3)	11(3)	1(3)
C(23)	50(4)	42(3)	59(4)	-5(3)	9(3)	3(3)
C(24)	61(5)	55(4)	69(5)	1(3)	8(4)	8(3)
C(25)	62(5)	58(4)	70(5)	-12(3)	22(4)	3(3)
C(26)	72(5)	49(4)	64(4)	-4(3)	28(4)	10(3)
C(27)	65(5)	41(3)	52(4)	-4(3)	17(3)	2(3)
C(28)	88(6)	69(4)	60(5)	6(3)	8(4)	5(4)
C(29)	73(5)	54(4)	82(5)	23(3)	9(4)	1(3)
C(30)	68(5)	88(5)	124(7)	-22(5)	33(5)	13(4)
C(31)	60(4)	37(3)	55(4)	-4(3)	11(4)	15(3)
C(32)	54(5)	51(4)	71(5)	-6(3)	9(4)	20(3)
C(33)	54(5)	76(5)	121(8)	-21(5)	22(5)	26(4)
C(34)	99(8)	96(6)	97(7)	-33(5)	48(6)	49(5)
C(35)	131(8)	81(5)	65(5)	-15(4)	33(6)	49(5)

C(36)	74(5)	57(4)	58(5)	1(3)	14(4)	25(3)
C(37)	113(7)	74(5)	58(5)	13(4)	8(5)	12(4)
C(38)	75(5)	73(4)	74(5)	1(4)	-12(4)	12(4)
C(39)	133(9)	169(9)	155(10)	-57(8)	93(8)	69(8)

—

Table 10. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	1840	-2729	3595	115
H(1B)	1824	-1862	4189	115
H(1C)	2362	-1798	3732	115
H(2A)	1302	-882	1920	131
H(2B)	1494	-2102	2145	131
H(2C)	2013	-1162	2234	131
H(3A)	299	-1087	2821	146
H(3B)	505	-1456	3594	146
H(3C)	560	-2291	2993	148
H(4A)	283	1497	1972	127
H(4B)	405	224	2104	127
H(4C)	924	959	1839	127
H(5A)	922	3142	2809	108
H(5B)	1594	2682	2719	108
H(5C)	1442	2906	3462	108
H(6A)	21	1812	3353	136
H(6B)	515	1510	4016	136
H(6C)	153	564	3559	136
H(7A)	3999	-567	6611	135
H(7B)	4121	-1154	5932	135
H(7C)	3496	-1408	6228	135
H(8A)	3634	1294	6690	110
H(8B)	2939	1588	6326	110
H(8C)	3528	2130	6067	110
H(9A)	4338	851	5295	100
H(9B)	3760	1479	4857	100
H(9C)	3899	241	4685	100
H(10A)	1847	-801	6670	111
H(10B)	2089	397	6536	111
H(10C)	2582	-567	6739	111
H(11A)	1929	-2580	5814	104
H(11B)	2663	-2415	5827	104
H(11C)	2198	-2515	5118	104
H(12A)	1012	-738	5332	102
H(12B)	1279	-596	4638	102
H(12C)	1263	423	5133	81
H(13A)	3836	-2804	4442	120
H(13B)	3150	-2331	4453	120
H(13C)	3753	-1651	4788	120
H(14A)	4656	-1987	3644	157
H(14B)	4628	-771	3925	157
H(14C)	4501	-993	3125	157
H(15A)	3540	-3147	2979	143
H(15B)	3337	-2171	2457	143
H(15C)	2854	-2633	2910	143
H(16A)	3632	173	1779	123
H(16B)	2885	178	1703	123
H(16C)	3279	-837	2050	123
H(17A)	4328	1282	2655	134
H(17B)	4364	979	3439	134

H(17C)	4045	2096	3150	134
H(18A)	2765	2127	2292	109
H(18B)	2808	2238	3096	109
H(18C)	2317	1411	2678	109
H(20)	3222	5543	5193	69
H(21)	2160	5419	5388	74
H(24)	112	4477	4079	75
H(26)	480	2331	5595	71
H(28A)	1518	1937	6150	110
H(28B)	1975	2961	6156	110
H(28C)	2025	1963	5655	110
H(29A)	1694	5132	4008	105
H(29B)	1065	5809	4022	105
H(29C)	1081	4886	3461	105
H(30A)	-562	2672	5145	138
H(30B)	-672	2881	4344	138
H(30C)	-701	3877	4854	138
H(33)	5092	3588	4635	99
H(35)	3943	4365	2905	109
H(37A)	2868	4666	2846	124
H(37B)	2721	5234	3522	124
H(37C)	2540	3984	3371	124
H(38A)	4755	3422	5664	115
H(38B)	4061	2959	5632	115
H(38C)	4194	4233	5742	115
H(39A)	4984	4067	2857	217
H(39B)	5329	3196	3387	217
H(39C)	5443	4470	3524	217

3. Crystallographic Data for Complex 5.

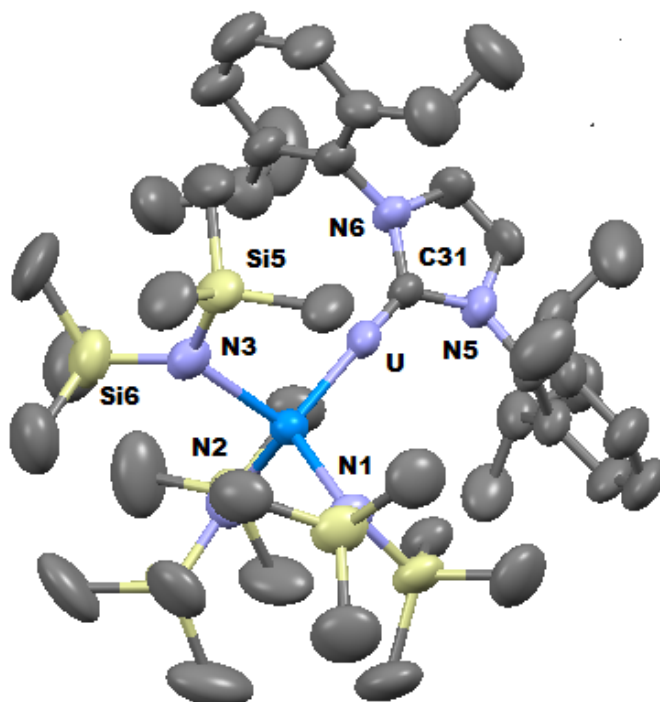


Figure 3: Molecular structure of $[(\text{Im}^{\text{Dipp}}\text{N})\text{U}(\text{N}(\text{SiMe}_3)_2)_3]$ (5). Color code: U, green; N, blue; Si, yellow; C, grey. Hydrogen atoms and distorted solvent molecules are omitted for clarity.

Table 11: Crystallographic Data and Structure Refinement for Complex 5.

Complex	5·3 C ₇ H ₈
Empirical Formula	C ₄₅ H ₉₀ N ₆ Si ₆ U · 3C ₇ H ₈
Formula weight/g mol ⁻¹	1398.89
T/K	200(2)
$\lambda/\text{\AA}$	0.71073
Crystal System	Triclinic
Space group	<i>P</i> -1
<i>a</i> /\AA	12.0440(2)
<i>b</i> /\AA	14.0560(3)
<i>c</i> /\AA	23.1880(4)
$\alpha/^\circ$	95.5880(18)
$\beta/^\circ$	92.6530(15)
$\gamma/^\circ$	102.1780(8)
<i>V</i> /\AA ³	3809.91(12)
<i>Z</i>	2
$\rho/\text{g cm}^{-3}$	1.198
$\mu(\text{Mo-K}\alpha)/\text{mm}^{-1}$	2.262
Θ range for data collection/ $^\circ$	0.88 to 24.56
<i>F</i> (000)	1408
Limiting indices	0 ≤ <i>h</i> ≤ 13 -15 ≤ <i>k</i> ≤ 15 -26 ≤ <i>l</i> ≤ 25
Reflections collected/unique (<i>R</i> _{int})	11339/11339 (0.0315)
Completeness to Θ	99.7%
GOF on <i>F</i> ²	1.073
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	0.0545, 0.1384
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (all data)	0.0799, 0.1526
Largest diff. peak and hole/e\AA ⁻³	1.066 and -0.873

Table 12. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
U(1)	2495(1)	4568(1)	2535(1)	44(1)
Si(1)	1509(2)	4745(2)	3886(1)	66(1)
Si(2)	-418(2)	4554(2)	3027(1)	74(1)
Si(3)	4647(2)	3225(2)	2863(1)	65(1)
Si(4)	2255(3)	2125(2)	2814(2)	80(1)
Si(5)	1257(2)	5146(2)	1296(1)	69(1)
Si(6)	1888(3)	3226(2)	1088(1)	81(1)
N(1)	1028(5)	4634(5)	3159(3)	54(2)
N(2)	3224(6)	3211(5)	2741(3)	55(2)
N(3)	1802(6)	4216(5)	1574(3)	55(2)
N(4)	3758(6)	5894(4)	2559(2)	48(2)
N(5)	5219(6)	7147(5)	3122(2)	53(2)
N(6)	5340(5)	7033(5)	2184(2)	49(2)
C(1)	1118(10)	5771(10)	4346(5)	107(4)
C(2)	979(10)	3632(9)	4271(5)	102(4)
C(3)	3107(7)	4934(8)	3919(4)	71(3)
C(4)	-844(9)	5781(9)	3075(5)	96(3)
C(5)	-958(9)	3913(9)	2290(5)	93(3)
C(6)	-1321(9)	3857(10)	3540(6)	108(4)
C(7)	5009(10)	2886(9)	3601(5)	110(4)
C(8)	5240(11)	2373(11)	2354(7)	138(6)
C(9)	5492(8)	4437(7)	2804(5)	81(3)
C(10)	809(9)	2304(8)	2682(6)	99(4)
C(11)	2331(11)	1678(10)	3545(7)	134(6)
C(12)	2406(11)	1057(7)	2313(7)	126(5)
C(13)	-231(9)	4716(9)	919(4)	94(4)
C(14)	2176(10)	5806(8)	759(4)	96(4)
C(15)	1186(10)	6085(7)	1920(4)	84(3)
C(16)	3267(12)	2856(11)	1192(6)	130(5)
C(17)	1837(15)	3447(11)	299(5)	141(6)
C(18)	708(12)	2147(10)	1124(6)	123(5)
C(19)	7559(9)	7224(8)	4300(5)	93(3)
C(20)	6485(8)	6485(6)	4058(4)	63(2)
C(21)	6426(9)	5551(8)	4330(4)	87(3)
C(22)	5431(7)	6889(6)	4153(3)	57(2)
C(23)	4786(7)	7192(6)	3698(3)	50(2)
C(24)	3894(8)	7631(6)	3796(4)	64(2)
C(25)	3593(10)	7749(8)	4379(4)	82(3)
C(26)	4167(10)	7436(8)	4816(4)	87(3)
C(27)	5080(9)	7027(7)	4712(3)	72(3)
C(28)	3770(14)	9116(9)	3355(6)	129(5)
C(29)	3284(9)	8058(7)	3333(4)	74(3)
C(30)	1999(11)	7792(11)	3315(5)	115(4)
C(31)	4662(6)	6611(5)	2606(3)	43(2)
C(32)	6216(7)	7751(6)	2437(4)	63(2)
C(33)	6159(7)	7826(6)	2999(4)	64(2)

C(34)	6146(14)	4688(9)	1058(6)	139(6)
C(35)	7518(14)	6176(12)	1514(7)	158(7)
C(36)	6287(10)	5659(8)	1446(5)	88(3)
C(37)	5110(7)	6957(6)	1564(3)	57(2)
C(38)	5555(8)	6303(7)	1201(3)	66(2)
C(40)	4931(10)	7018(9)	391(4)	88(3)
C(39)	5440(9)	6358(8)	607(4)	80(3)
C(41)	4503(9)	7675(8)	747(4)	74(3)
C(42)	4578(8)	7661(7)	1353(4)	66(2)
C(43)	2948(11)	8499(9)	1568(6)	106(4)
C(44)	4159(10)	8421(7)	1742(4)	78(3)
C(45)	4888(13)	9404(9)	1768(7)	133(5)
C(46)	9108(13)	9209(12)	1788(5)	222(10)
C(47)	9503(12)	8759(10)	2239(9)	202(9)
C(48)	9294(12)	9037(11)	2808(7)	195(8)
C(49)	8690(13)	9766(12)	2927(5)	179(7)
C(50)	8295(11)	10216(9)	2476(8)	196(8)
C(51)	8504(12)	9938(11)	1906(6)	170(7)
C(52)	9370(50)	8740(40)	1210(20)	540(30)
C(53)	1369(9)	9041(10)	5105(6)	186(8)
C(54)	1862(13)	9825(11)	4813(5)	160(6)
C(55)	2954(13)	10358(9)	4990(6)	222(10)
C(56)	3553(9)	10107(10)	5457(6)	162(6)
C(57)	3060(12)	9322(11)	5749(5)	183(7)
C(58)	1968(13)	8789(8)	5573(6)	154(6)
C(59)	360(30)	8610(20)	4796(13)	281(14)
C(60)	1980(14)	9285(13)	55(6)	356(19)
C(61)	2907(17)	9958(10)	-102(9)	289(14)
C(62)	3669(14)	9648(17)	-471(9)	331(17)
C(63)	3503(16)	8660(20)	-683(7)	316(16)
C(64)	2576(19)	7992(12)	-526(7)	241(11)
C(65)	1815(13)	8302(11)	-157(7)	187(8)
C(66)	1570(20)	9780(20)	410(9)	370(20)

Table 13. Bond lengths [Å] and angles [deg] for shelxl.

U(1)-N(4)	2.137(6)
U(1)-N(3)	2.313(6)
U(1)-N(2)	2.342(6)
U(1)-N(1)	2.346(6)
U(1)-Si(1)	3.405(2)
U(1)-Si(5)	3.421(2)
Si(1)-N(1)	1.737(7)
Si(1)-C(1)	1.864(11)
Si(1)-C(3)	1.883(9)
Si(1)-C(2)	1.885(10)
Si(2)-N(1)	1.733(7)
Si(2)-C(6)	1.860(11)
Si(2)-C(5)	1.873(11)
Si(2)-C(4)	1.894(11)
Si(3)-N(2)	1.720(7)
Si(3)-C(9)	1.812(10)
Si(3)-C(8)	1.870(13)
Si(3)-C(7)	1.878(10)
Si(4)-N(2)	1.743(7)
Si(4)-C(10)	1.828(11)
Si(4)-C(12)	1.852(12)
Si(4)-C(11)	1.870(12)
Si(5)-N(3)	1.744(7)
Si(5)-C(15)	1.879(10)
Si(5)-C(14)	1.886(10)
Si(5)-C(13)	1.907(10)
Si(6)-N(3)	1.727(7)
Si(6)-C(16)	1.855(13)
Si(6)-C(18)	1.859(13)
Si(6)-C(17)	1.885(12)
N(4)-C(31)	1.310(9)
N(5)-C(33)	1.378(10)
N(5)-C(31)	1.411(9)
N(5)-C(23)	1.455(9)
N(6)-C(32)	1.362(10)
N(6)-C(31)	1.400(9)
N(6)-C(37)	1.441(10)
C(1)-H(1A)	0.9800
C(1)-H(1B)	0.9800
C(1)-H(1C)	0.9800
C(2)-H(2A)	0.9800
C(2)-H(2B)	0.9800
C(2)-H(2C)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9800
C(3)-H(3B)	0.9800
C(3)-H(3C)	0.9800
C(4)-H(4A)	0.9800
C(4)-H(4B)	0.9800
C(4)-H(4C)	0.9800

C(5)-H(5A)	0.9800
C(5)-H(5B)	0.9800
C(5)-H(5C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9800
C(6)-H(6B)	0.9800
C(6)-H(6C)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.9800
C(7)-H(7B)	0.9800
C(7)-H(7C)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9800
C(8)-H(8B)	0.9800
C(8)-H(8C)	0.9800
C(9)-H(9A)	0.9800
C(9)-H(9B)	0.9800
C(9)-H(9C)	0.9800
C(10)-H(10A)	0.9800
C(10)-H(10B)	0.9800
C(10)-H(10C)	0.9800
C(11)-H(11A)	0.9800
C(11)-H(11B)	0.9800
C(11)-H(11C)	0.9800
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-H(13A)	0.9800
C(13)-H(13B)	0.9800
C(13)-H(13C)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800
C(14)-H(14C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(15)-H(15C)	0.9800
C(16)-H(16A)	0.9800
C(16)-H(16B)	0.9800
C(16)-H(16C)	0.9800
C(17)-H(17A)	0.9800
C(17)-H(17B)	0.9800
C(17)-H(17C)	0.9800
C(18)-H(18A)	0.9800
C(18)-H(18B)	0.9800
C(18)-H(18C)	0.9800
C(19)-C(20)	1.523(13)
C(19)-H(19A)	0.9800
C(19)-H(19B)	0.9800
C(19)-H(19C)	0.9800
C(20)-C(21)	1.501(12)
C(20)-C(22)	1.512(12)
C(20)-H(20)	1.0000
C(21)-H(21A)	0.9800
C(21)-H(21B)	0.9800
C(21)-H(21C)	0.9800

C(22)-C(27)	1.389(12)
C(22)-C(23)	1.432(10)
C(23)-C(24)	1.365(12)
C(24)-C(25)	1.419(12)
C(24)-C(29)	1.512(12)
C(25)-C(26)	1.361(14)
C(25)-H(25)	0.9500
C(26)-C(27)	1.364(14)
C(26)-H(26)	0.9500
C(27)-H(27)	0.9500
C(28)-C(29)	1.474(16)
C(28)-H(28A)	0.9800
C(28)-H(28B)	0.9800
C(28)-H(28C)	0.9800
C(29)-C(30)	1.511(15)
C(29)-H(29)	1.0000
C(30)-H(30A)	0.9800
C(30)-H(30B)	0.9800
C(30)-H(30C)	0.9800
C(32)-C(33)	1.303(11)
C(32)-H(32)	0.9500
C(33)-H(33)	0.9500
C(34)-C(36)	1.534(16)
C(34)-H(34A)	0.9800
C(34)-H(34B)	0.9800
C(34)-H(34C)	0.9800
C(35)-C(36)	1.501(18)
C(35)-H(35A)	0.9800
C(35)-H(35B)	0.9800
C(35)-H(35C)	0.9800
C(36)-C(38)	1.519(14)
C(36)-H(36)	1.0000
C(37)-C(38)	1.393(12)
C(37)-C(42)	1.400(12)
C(38)-C(39)	1.389(12)
C(40)-C(39)	1.339(14)
C(40)-C(41)	1.375(14)
C(40)-H(40)	0.9500
C(39)-H(39)	0.9500
C(41)-C(42)	1.407(12)
C(41)-H(41)	0.9500
C(42)-C(44)	1.512(13)
C(43)-C(44)	1.525(15)
C(43)-H(43A)	0.9800
C(43)-H(43B)	0.9800
C(43)-H(43C)	0.9800
C(44)-C(45)	1.466(15)
C(44)-H(44)	1.0000
C(45)-H(45A)	0.9800
C(45)-H(45B)	0.9800
C(45)-H(45C)	0.9800
C(46)-C(47)	1.3900

C(46)-C(51)	1.3900
C(46)-C(52)	1.51(6)
C(47)-C(48)	1.3900
C(48)-C(49)	1.3900
C(49)-C(50)	1.3900
C(50)-C(51)	1.3900
C(53)-C(59)	1.37(3)
C(53)-C(54)	1.3900
C(53)-C(58)	1.3900
C(54)-C(55)	1.3900
C(55)-C(56)	1.3900
C(56)-C(57)	1.3900
C(57)-C(58)	1.3900
C(60)-C(66)	1.2191
C(60)-C(61)	1.3900
C(60)-C(65)	1.3900
C(61)-C(62)	1.3900
C(61)-C(66)	2.0366
C(62)-C(63)	1.3900
C(63)-C(64)	1.3900
C(64)-C(65)	1.3900

N(4)-U(1)-N(3)	104.8(2)
N(4)-U(1)-N(2)	114.0(2)
N(3)-U(1)-N(2)	104.7(2)
N(4)-U(1)-N(1)	115.2(2)
N(3)-U(1)-N(1)	111.7(2)
N(2)-U(1)-N(1)	106.1(2)
N(4)-U(1)-Si(1)	102.47(16)
N(3)-U(1)-Si(1)	139.52(17)
N(2)-U(1)-Si(1)	90.55(17)
N(1)-U(1)-Si(1)	28.18(16)
N(4)-U(1)-Si(5)	88.94(16)
N(3)-U(1)-Si(5)	27.68(18)
N(2)-U(1)-Si(5)	132.38(17)
N(1)-U(1)-Si(5)	99.64(16)
Si(1)-U(1)-Si(5)	126.11(7)
N(1)-Si(1)-C(1)	114.5(5)
N(1)-Si(1)-C(3)	107.7(4)
C(1)-Si(1)-C(3)	108.8(5)
N(1)-Si(1)-C(2)	114.7(5)
C(1)-Si(1)-C(2)	104.4(6)
C(3)-Si(1)-C(2)	106.2(5)
N(1)-Si(1)-U(1)	39.6(2)
C(1)-Si(1)-U(1)	132.7(4)
C(3)-Si(1)-U(1)	68.3(3)
C(2)-Si(1)-U(1)	122.0(4)
N(1)-Si(2)-C(6)	114.0(4)
N(1)-Si(2)-C(5)	112.1(4)
C(6)-Si(2)-C(5)	104.9(6)
N(1)-Si(2)-C(4)	114.1(4)
C(6)-Si(2)-C(4)	104.2(6)

C(5)-Si(2)-C(4)	106.6(5)
N(2)-Si(3)-C(9)	110.1(4)
N(2)-Si(3)-C(8)	116.1(5)
C(9)-Si(3)-C(8)	105.6(6)
N(2)-Si(3)-C(7)	113.0(5)
C(9)-Si(3)-C(7)	107.5(5)
C(8)-Si(3)-C(7)	103.9(7)
N(2)-Si(4)-C(10)	109.1(4)
N(2)-Si(4)-C(12)	114.9(5)
C(10)-Si(4)-C(12)	107.3(6)
N(2)-Si(4)-C(11)	114.8(5)
C(10)-Si(4)-C(11)	106.9(6)
C(12)-Si(4)-C(11)	103.2(7)
N(3)-Si(5)-C(15)	107.7(4)
N(3)-Si(5)-C(14)	113.7(5)
C(15)-Si(5)-C(14)	106.7(5)
N(3)-Si(5)-C(13)	114.0(4)
C(15)-Si(5)-C(13)	108.0(5)
C(14)-Si(5)-C(13)	106.4(5)
N(3)-Si(5)-U(1)	38.0(2)
C(15)-Si(5)-U(1)	70.1(3)
C(14)-Si(5)-U(1)	119.8(4)
C(13)-Si(5)-U(1)	132.5(4)
N(3)-Si(6)-C(16)	111.7(5)
N(3)-Si(6)-C(18)	113.0(5)
C(16)-Si(6)-C(18)	109.0(7)
N(3)-Si(6)-C(17)	115.3(5)
C(16)-Si(6)-C(17)	102.9(7)
C(18)-Si(6)-C(17)	104.2(7)
Si(2)-N(1)-Si(1)	115.7(4)
Si(2)-N(1)-U(1)	132.1(3)
Si(1)-N(1)-U(1)	112.2(3)
Si(3)-N(2)-Si(4)	117.4(4)
Si(3)-N(2)-U(1)	124.7(3)
Si(4)-N(2)-U(1)	117.8(3)
Si(6)-N(3)-Si(5)	116.8(4)
Si(6)-N(3)-U(1)	128.6(4)
Si(5)-N(3)-U(1)	114.3(3)
C(31)-N(4)-U(1)	169.5(5)
C(33)-N(5)-C(31)	110.4(6)
C(33)-N(5)-C(23)	120.6(7)
C(31)-N(5)-C(23)	127.5(6)
C(32)-N(6)-C(31)	110.5(6)
C(32)-N(6)-C(37)	118.5(6)
C(31)-N(6)-C(37)	129.6(6)
Si(1)-C(1)-H(1A)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1B)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2A)	109.5

Si(1)-C(2)-H(2B)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3A)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4A)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4B)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5A)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5B)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6A)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6B)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7A)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8A)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8B)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9A)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9B)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10A)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10B)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5

H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11A)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12A)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13A)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14A)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15A)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16A)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16B)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17A)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18A)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
C(20)-C(19)-H(19A)	109.5
C(20)-C(19)-H(19B)	109.5
H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5

C(20)-C(19)-H(19C)	109.5
H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5
H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5
C(21)-C(20)-C(22)	111.4(8)
C(21)-C(20)-C(19)	109.3(8)
C(22)-C(20)-C(19)	111.3(8)
C(21)-C(20)-H(20)	108.2
C(22)-C(20)-H(20)	108.2
C(19)-C(20)-H(20)	108.2
C(20)-C(21)-H(21A)	109.5
C(20)-C(21)-H(21B)	109.5
H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
C(20)-C(21)-H(21C)	109.5
H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5
C(27)-C(22)-C(23)	116.7(8)
C(27)-C(22)-C(20)	119.7(7)
C(23)-C(22)-C(20)	123.5(7)
C(24)-C(23)-C(22)	123.0(7)
C(24)-C(23)-N(5)	119.4(7)
C(22)-C(23)-N(5)	117.0(7)
C(23)-C(24)-C(25)	116.7(8)
C(23)-C(24)-C(29)	124.0(8)
C(25)-C(24)-C(29)	119.2(9)
C(26)-C(25)-C(24)	121.4(10)
C(26)-C(25)-H(25)	119.3
C(24)-C(25)-H(25)	119.3
C(25)-C(26)-C(27)	121.0(9)
C(25)-C(26)-H(26)	119.5
C(27)-C(26)-H(26)	119.5
C(26)-C(27)-C(22)	121.2(8)
C(26)-C(27)-H(27)	119.4
C(22)-C(27)-H(27)	119.4
C(29)-C(28)-H(28A)	109.5
C(29)-C(28)-H(28B)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(29)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(28)-C(29)-C(30)	114.4(10)
C(28)-C(29)-C(24)	109.6(9)
C(30)-C(29)-C(24)	115.4(9)
C(28)-C(29)-H(29)	105.5
C(30)-C(29)-H(29)	105.5
C(24)-C(29)-H(29)	105.5
C(29)-C(30)-H(30A)	109.5
C(29)-C(30)-H(30B)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30B)	109.5
C(29)-C(30)-H(30C)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30C)	109.5
H(30B)-C(30)-H(30C)	109.5
N(4)-C(31)-N(6)	131.1(6)

N(4)-C(31)-N(5)	127.1(6)
N(6)-C(31)-N(5)	101.8(6)
C(33)-C(32)-N(6)	109.6(7)
C(33)-C(32)-H(32)	125.2
N(6)-C(32)-H(32)	125.2
C(32)-C(33)-N(5)	107.8(7)
C(32)-C(33)-H(33)	126.1
N(5)-C(33)-H(33)	126.1
C(36)-C(34)-H(34A)	109.5
C(36)-C(34)-H(34B)	109.5
H(34A)-C(34)-H(34B)	109.5
C(36)-C(34)-H(34C)	109.5
H(34A)-C(34)-H(34C)	109.5
H(34B)-C(34)-H(34C)	109.5
C(36)-C(35)-H(35A)	109.5
C(36)-C(35)-H(35B)	109.5
H(35A)-C(35)-H(35B)	109.5
C(36)-C(35)-H(35C)	109.5
H(35A)-C(35)-H(35C)	109.5
H(35B)-C(35)-H(35C)	109.5
C(35)-C(36)-C(38)	110.9(10)
C(35)-C(36)-C(34)	109.9(12)
C(38)-C(36)-C(34)	110.9(10)
C(35)-C(36)-H(36)	108.3
C(38)-C(36)-H(36)	108.3
C(34)-C(36)-H(36)	108.3
C(38)-C(37)-C(42)	122.8(8)
C(38)-C(37)-N(6)	120.0(8)
C(42)-C(37)-N(6)	116.6(8)
C(39)-C(38)-C(37)	117.4(9)
C(39)-C(38)-C(36)	120.8(9)
C(37)-C(38)-C(36)	121.2(8)
C(39)-C(40)-C(41)	121.5(9)
C(39)-C(40)-H(40)	119.3
C(41)-C(40)-H(40)	119.3
C(40)-C(39)-C(38)	121.4(10)
C(40)-C(39)-H(39)	119.3
C(38)-C(39)-H(39)	119.3
C(40)-C(41)-C(42)	120.5(9)
C(40)-C(41)-H(41)	119.7
C(42)-C(41)-H(41)	119.7
C(37)-C(42)-C(41)	116.4(9)
C(37)-C(42)-C(44)	123.5(8)
C(41)-C(42)-C(44)	119.9(8)
C(44)-C(43)-H(43A)	109.5
C(44)-C(43)-H(43B)	109.5
H(43A)-C(43)-H(43B)	109.5
C(44)-C(43)-H(43C)	109.5
H(43A)-C(43)-H(43C)	109.5
H(43B)-C(43)-H(43C)	109.5
C(45)-C(44)-C(42)	113.3(10)
C(45)-C(44)-C(43)	107.6(10)

C(42)-C(44)-C(43)	113.3(9)
C(45)-C(44)-H(44)	107.5
C(42)-C(44)-H(44)	107.5
C(43)-C(44)-H(44)	107.5
C(44)-C(45)-H(45A)	109.5
C(44)-C(45)-H(45B)	109.5
H(45A)-C(45)-H(45B)	109.5
C(44)-C(45)-H(45C)	109.5
H(45A)-C(45)-H(45C)	109.5
H(45B)-C(45)-H(45C)	109.5
C(47)-C(46)-C(51)	120.0
C(47)-C(46)-C(52)	110(3)
C(51)-C(46)-C(52)	130(3)
C(48)-C(47)-C(46)	120.0
C(47)-C(48)-C(49)	120.0
C(50)-C(49)-C(48)	120.0
C(49)-C(50)-C(51)	120.0
C(50)-C(51)-C(46)	120.0
C(59)-C(53)-C(54)	106.0(18)
C(59)-C(53)-C(58)	133.6(18)
C(54)-C(53)-C(58)	120.0
C(53)-C(54)-C(55)	120.0
C(56)-C(55)-C(54)	120.0
C(57)-C(56)-C(55)	120.0
C(58)-C(57)-C(56)	120.0
C(57)-C(58)-C(53)	120.0
C(66)-C(60)-C(61)	102.4
C(66)-C(60)-C(65)	137.2
C(61)-C(60)-C(65)	120.0
C(62)-C(61)-C(60)	120.0
C(62)-C(61)-C(66)	155.4
C(60)-C(61)-C(66)	35.8
C(61)-C(62)-C(63)	120.0
C(62)-C(63)-C(64)	120.0
C(63)-C(64)-C(65)	120.0
C(64)-C(65)-C(60)	120.0
C(60)-C(66)-C(61)	41.8

Table 14. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
U(1)	44(1)	46(1)	45(1)	8(1)	7(1)	12(1)
Si(1)	60(2)	92(2)	50(1)	18(1)	19(1)	17(1)
Si(2)	48(2)	102(2)	80(2)	21(2)	14(1)	28(1)
Si(3)	59(2)	58(2)	84(2)	11(1)	-2(1)	25(1)
Si(4)	71(2)	49(2)	124(2)	23(2)	6(2)	17(1)
Si(5)	72(2)	81(2)	53(1)	12(1)	-3(1)	16(1)
Si(6)	78(2)	92(2)	68(2)	-17(2)	-2(1)	22(2)
N(1)	45(4)	65(4)	57(4)	14(3)	15(3)	21(3)
N(2)	58(4)	46(4)	65(4)	6(3)	2(3)	23(3)
N(3)	50(4)	71(5)	48(4)	7(3)	10(3)	19(3)
N(4)	61(4)	47(4)	34(3)	1(3)	0(3)	11(3)
N(5)	60(4)	56(4)	38(3)	-4(3)	-1(3)	8(3)
N(6)	50(4)	55(4)	41(3)	5(3)	10(3)	5(3)
C(1)	97(9)	144(11)	86(7)	-6(7)	34(7)	46(8)
C(2)	101(9)	138(11)	74(7)	51(7)	25(6)	17(8)
C(3)	61(6)	100(8)	56(5)	14(5)	8(4)	19(5)
C(4)	71(7)	120(10)	111(9)	16(7)	19(6)	47(7)
C(5)	57(6)	112(9)	108(8)	30(7)	-5(6)	10(6)
C(6)	51(6)	149(12)	128(10)	34(9)	18(6)	17(7)
C(7)	87(8)	125(10)	125(10)	69(8)	-23(7)	20(7)
C(8)	98(10)	141(13)	177(14)	-47(11)	-9(9)	58(9)
C(9)	55(6)	94(8)	102(7)	30(6)	19(5)	22(5)
C(10)	66(7)	74(7)	144(10)	13(7)	-3(7)	-11(6)
C(11)	107(10)	130(12)	195(15)	108(11)	40(10)	45(9)
C(12)	104(10)	45(6)	226(16)	10(8)	0(10)	15(6)
C(13)	77(7)	132(10)	77(7)	13(7)	-19(6)	33(7)
C(14)	126(10)	90(8)	60(6)	19(5)	-6(6)	-5(7)
C(15)	112(9)	89(7)	66(6)	21(5)	9(6)	52(7)
C(16)	117(11)	161(14)	119(10)	-15(9)	-5(9)	63(10)
C(17)	220(18)	150(13)	57(7)	-27(7)	21(8)	60(12)
C(18)	115(11)	106(10)	133(11)	-30(8)	0(9)	14(8)
C(19)	73(7)	109(9)	85(7)	-5(6)	-10(6)	8(6)
C(20)	69(6)	67(6)	54(5)	-3(4)	-11(4)	22(5)
C(21)	102(8)	95(8)	78(7)	7(6)	-8(6)	59(7)
C(22)	64(6)	62(5)	45(4)	-4(4)	-6(4)	19(4)
C(23)	57(5)	62(5)	34(4)	-2(3)	3(3)	22(4)
C(24)	77(7)	57(5)	54(5)	-9(4)	4(4)	13(5)
C(25)	103(8)	92(8)	53(6)	-3(5)	15(5)	33(6)
C(26)	114(9)	105(8)	40(5)	-6(5)	10(5)	29(7)
C(27)	97(8)	89(7)	37(4)	7(4)	-2(5)	33(6)
C(28)	183(15)	100(10)	112(10)	-1(8)	-17(10)	63(10)
C(29)	108(9)	77(7)	51(5)	1(5)	16(5)	50(6)
C(30)	97(10)	176(14)	84(8)	17(8)	12(7)	51(9)
C(31)	48(5)	47(5)	36(4)	4(3)	10(3)	11(4)
C(32)	50(5)	70(6)	56(5)	4(4)	7(4)	-14(5)
C(33)	55(6)	58(6)	64(6)	-6(4)	-8(4)	-14(4)

C(34)	208(17)	77(9)	140(12)	4(8)	66(11)	41(10)
C(35)	152(15)	165(15)	158(14)	-37(11)	-59(12)	78(12)
C(37)	62(6)	60(5)	45(4)	8(4)	17(4)	4(4)
C(38)	82(7)	72(6)	46(5)	8(4)	18(4)	16(5)
C(40)	97(8)	128(10)	45(5)	12(6)	15(5)	34(7)
C(39)	101(8)	99(8)	52(6)	22(5)	27(5)	42(7)
C(41)	85(7)	91(7)	55(5)	23(5)	2(5)	32(6)
C(42)	78(6)	61(6)	60(5)	19(4)	3(5)	13(5)
C(43)	122(11)	81(8)	121(10)	1(7)	24(8)	36(7)
C(44)	103(8)	67(7)	70(6)	9(5)	8(6)	31(6)
C(45)	138(13)	69(8)	186(15)	9(9)	18(11)	10(8)

Table 15. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	1417	5782	4747	160
H(1B)	288	5678	4333	160
H(1C)	1445	6393	4199	160
H(2A)	1287	3756	4676	154
H(2B)	1228	3069	4078	154
H(2C)	145	3493	4258	154
H(3A)	3402	4996	4325	107
H(3B)	3429	5531	3746	107
H(3C)	3320	4372	3704	107
H(4A)	-1670	5678	2997	144
H(4B)	-456	6175	2788	144
H(4C)	-627	6124	3466	144
H(5A)	-1776	3884	2232	139
H(5B)	-823	3247	2259	139
H(5C)	-557	4272	1992	139
H(6A)	-1085	4155	3939	163
H(6B)	-1232	3177	3501	163
H(6C)	-2120	3871	3452	163
H(7A)	5826	2904	3646	165
H(7B)	4579	2225	3643	165
H(7C)	4810	3353	3900	165
H(8A)	6050	2436	2463	208
H(8B)	5150	2540	1956	208
H(8C)	4831	1698	2376	208
H(9A)	6301	4438	2876	121
H(9B)	5273	4910	3092	121
H(9C)	5359	4618	2414	121
H(10A)	260	1695	2723	148
H(10B)	714	2485	2288	148
H(10C)	677	2827	2965	148
H(11A)	1763	1066	3548	201
H(11B)	2178	2172	3841	201
H(11C)	3093	1560	3630	201
H(12A)	1833	481	2384	189
H(12B)	3169	930	2378	189
H(12C)	2295	1196	1910	189
H(13A)	-480	5274	774	142
H(13B)	-761	4432	1196	142
H(13C)	-216	4220	593	142
H(14A)	1819	6313	618	144
H(14B)	2259	5337	430	144
H(14C)	2929	6110	948	144
H(15A)	879	6617	1777	126
H(15B)	1952	6349	2105	126
H(15C)	690	5778	2205	126

H(16A)	3286	2294	909	195
H(16B)	3351	2673	1586	195
H(16C)	3891	3403	1135	195
H(17A)	1888	2848	57	212
H(17B)	2477	3977	235	212
H(17C)	1119	3631	194	212
H(18A)	797	1610	840	184
H(18B)	-22	2324	1038	184
H(18C)	726	1938	1515	184
H(19A)	8226	6945	4229	139
H(19B)	7520	7381	4719	139
H(19C)	7620	7822	4108	139
H(20)	6536	6341	3630	76
H(21A)	7115	5304	4257	131
H(21B)	5756	5063	4161	131
H(21C)	6369	5676	4749	131
H(25)	2978	8053	4465	98
H(26)	3929	7502	5200	104
H(27)	5483	6834	5026	87
H(28A)	3376	9391	3054	193
H(28B)	4582	9221	3288	193
H(28C)	3674	9440	3738	193
H(29)	3490	7761	2954	89
H(30A)	1682	8108	3007	173
H(30B)	1745	8016	3690	173
H(30C)	1738	7080	3237	173
H(32)	6781	8139	2235	75
H(33)	6673	8269	3274	77
H(34A)	6599	4274	1233	208
H(34B)	6408	4818	673	208
H(34C)	5342	4351	1019	208
H(35A)	7971	5750	1677	237
H(35B)	7607	6782	1776	237
H(35C)	7780	6332	1133	237
H(36)	6032	5511	1839	105
H(40)	4862	7032	-18	106
H(39)	5730	5917	349	96
H(41)	4155	8142	583	89
H(43A)	2722	8993	1838	160
H(43B)	2429	7863	1581	160
H(43C)	2914	8689	1173	160
H(44)	4163	8220	2144	94
H(45A)	4581	9860	2030	200
H(45B)	4910	9619	1379	200
H(45C)	5660	9388	1914	200

4. Crystallographic Data for Complex **6**

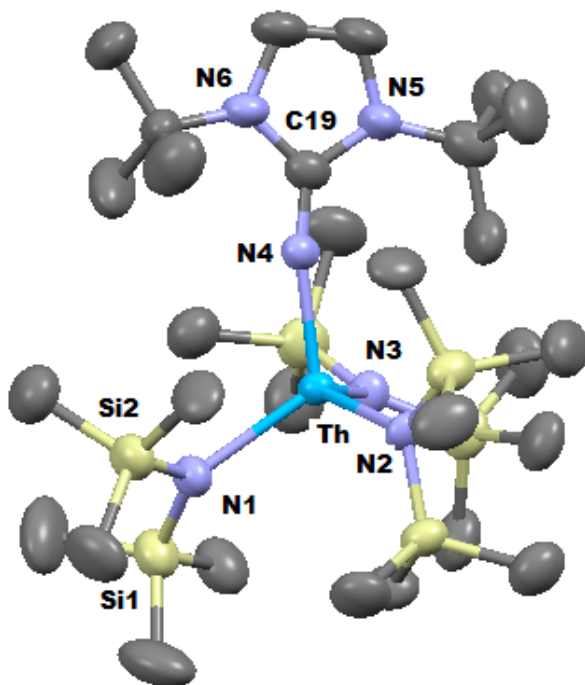


Figure 4: Molecular structure of $[(\text{Im}^{\text{tBu}}\text{N})\text{Th}(\text{N}(\text{SiMe}_3)_2)_3]$ (**6**). Color code: Th, green; N, blue; Si, yellow; C, grey. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

Table 16: Crystallographic Data and Structure Refinement for Complex **6**.

Complex	6
Empirical Formula	C ₂₉ H ₇₄ N ₆ Si ₆ Th
Formula weight/g mol ⁻¹	907.52
T/K	200(2)
$\lambda/\text{\AA}$	0.71073
Crystal System	Orthorhombic
Space group	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
<i>a</i> /\AA	11.9540(4)
<i>b</i> /\AA	19.2770(8)
<i>c</i> /\AA	19.4130(4)
$\alpha/^\circ$	90
$\beta/^\circ$	90
$\gamma/^\circ$	90
<i>V</i> /\AA ³	4473.5(3)
<i>Z</i>	4
$\rho/\text{g cm}^{-3}$	1.347
$\mu(\text{Mo-K}\alpha)/\text{mm}^{-1}$	3.519
Θ range for data collection/ $^\circ$	2.00 to 24.18
<i>F</i> (000)	1856
Limiting indices	0 $\leq h \leq 13$ 0 $\leq k \leq 21$ 0 $\leq l \leq 21$
Reflections collected/unique (<i>R</i> _{int})	3788/3788 (0.0890)
Completeness to Θ	99.1%
GOF on <i>F</i> ²	1.164
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	0.0423, 0.0608
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (all data)	0.0494, 0.0622
Largest diff. peak and hole/e\AA ⁻³	0.599 and -0.953

Table 17. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Th(1)	5987(1)	-95(1)	8475(1)	32(1)
Si(1)	5026(3)	1340(2)	9625(2)	62(1)
Si(2)	3780(2)	33(2)	9639(2)	56(1)
Si(3)	4430(3)	-1004(2)	7087(2)	53(1)
Si(4)	4197(3)	504(2)	7240(2)	50(1)
Si(5)	8168(3)	873(2)	7576(2)	61(1)
Si(6)	8569(2)	421(2)	9026(2)	61(1)
N(1)	4880(7)	511(4)	9313(4)	47(2)
N(2)	4804(6)	-244(4)	7521(4)	40(2)
N(3)	7696(6)	483(4)	8320(4)	45(2)
N(4)	6590(6)	-1127(4)	8737(4)	39(2)
N(5)	7865(7)	-2003(4)	8312(5)	52(3)
N(6)	7037(7)	-2209(4)	9301(5)	49(2)
C(1)	3824(12)	1927(6)	9396(9)	112(6)
C(2)	6270(10)	1797(6)	9280(7)	76(4)
C(3)	5143(15)	1368(8)	10589(7)	114(6)
C(4)	2415(9)	496(7)	9694(8)	88(5)
C(5)	4084(12)	-304(6)	10528(6)	88(4)
C(6)	3518(10)	-719(5)	9055(6)	69(4)
C(7)	2922(10)	-1054(6)	6876(7)	85(4)
C(8)	4676(10)	-1794(5)	7609(7)	68(4)
C(9)	5192(12)	-1110(7)	6262(6)	87(4)
C(10)	2715(9)	598(7)	7515(7)	77(4)
C(11)	4230(11)	640(6)	6292(6)	78(4)
C(12)	4925(10)	1269(5)	7626(7)	67(4)
C(13)	8056(12)	1841(6)	7603(7)	76(4)
C(14)	7377(9)	563(6)	6799(6)	72(4)
C(15)	9650(10)	669(8)	7363(8)	99(5)
C(16)	9336(10)	1231(7)	9214(7)	91(5)
C(17)	9601(10)	-298(6)	8962(7)	84(4)
C(18)	7747(9)	193(7)	9812(6)	74(4)
C(19)	7107(9)	-1714(6)	8779(6)	48(3)
C(20)	8214(10)	-2646(6)	8552(8)	72(4)
C(21)	7728(10)	-2765(6)	9147(7)	66(4)
C(22)	6234(10)	-2201(6)	9876(6)	58(3)
C(23)	5080(11)	-2301(8)	9564(8)	104(5)
C(24)	6307(15)	-1551(6)	10287(7)	112(7)
C(25)	6467(11)	-2813(7)	10351(7)	90(5)
C(26)	8258(11)	-1785(7)	7622(9)	66(4)
C(27)	7843(11)	-1086(6)	7397(7)	71(4)
C(28)	7841(12)	-2309(7)	7088(7)	90(5)
C(29)	9530(10)	-1768(8)	7604(8)	87(5)

Table 18. Bond lengths [Å] and angles [deg] for shelxl.

Th(1)-N(4)	2.176(8)
Th(1)-N(3)	2.346(7)
Th(1)-N(2)	2.347(7)
Th(1)-N(1)	2.401(8)
Th(1)-Si(4)	3.414(3)
Th(1)-Si(6)	3.415(3)
Th(1)-Si(2)	3.483(3)
Si(1)-N(1)	1.718(9)
Si(1)-C(2)	1.854(12)
Si(1)-C(3)	1.878(14)
Si(1)-C(1)	1.883(14)
Si(2)-N(1)	1.726(8)
Si(2)-C(4)	1.864(11)
Si(2)-C(6)	1.866(11)
Si(2)-C(5)	1.878(11)
Si(3)-N(2)	1.748(8)
Si(3)-C(7)	1.851(12)
Si(3)-C(8)	1.852(12)
Si(3)-C(9)	1.855(13)
Si(4)-N(2)	1.704(7)
Si(4)-C(11)	1.859(12)
Si(4)-C(10)	1.860(11)
Si(4)-C(12)	1.869(11)
Si(5)-N(3)	1.724(9)
Si(5)-C(15)	1.862(12)
Si(5)-C(13)	1.872(13)
Si(5)-C(14)	1.877(12)
Si(6)-N(3)	1.727(8)
Si(6)-C(16)	1.847(12)
Si(6)-C(17)	1.858(11)
Si(6)-C(18)	1.867(11)
N(4)-C(19)	1.292(12)
N(5)-C(20)	1.389(13)
N(5)-C(19)	1.397(13)
N(5)-C(26)	1.480(18)
N(6)-C(21)	1.386(13)
N(6)-C(19)	1.395(13)
N(6)-C(22)	1.473(13)
C(1)-H(1A)	0.9800
C(1)-H(1B)	0.9800
C(1)-H(1C)	0.9800
C(2)-H(2A)	0.9800
C(2)-H(2B)	0.9800
C(2)-H(2C)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9800
C(3)-H(3B)	0.9800
C(3)-H(3C)	0.9800
C(4)-H(4A)	0.9800
C(4)-H(4B)	0.9800
C(4)-H(4C)	0.9800

C(5)-H(5A)	0.9800
C(5)-H(5B)	0.9800
C(5)-H(5C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9800
C(6)-H(6B)	0.9800
C(6)-H(6C)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.9800
C(7)-H(7B)	0.9800
C(7)-H(7C)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9800
C(8)-H(8B)	0.9800
C(8)-H(8C)	0.9800
C(9)-H(9A)	0.9800
C(9)-H(9B)	0.9800
C(9)-H(9C)	0.9800
C(10)-H(10A)	0.9800
C(10)-H(10B)	0.9800
C(10)-H(10C)	0.9800
C(11)-H(11A)	0.9800
C(11)-H(11B)	0.9800
C(11)-H(11C)	0.9800
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-H(13A)	0.9800
C(13)-H(13B)	0.9800
C(13)-H(13C)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800
C(14)-H(14C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(15)-H(15C)	0.9800
C(16)-H(16A)	0.9800
C(16)-H(16B)	0.9800
C(16)-H(16C)	0.9800
C(17)-H(17A)	0.9800
C(17)-H(17B)	0.9800
C(17)-H(17C)	0.9800
C(18)-H(18A)	0.9800
C(18)-H(18B)	0.9800
C(18)-H(18C)	0.9800
C(20)-C(21)	1.313(17)
C(20)-H(20)	0.9500
C(21)-H(21)	0.9500
C(22)-C(24)	1.487(16)
C(22)-C(23)	1.519(17)
C(22)-C(25)	1.522(14)
C(23)-H(23A)	0.9800
C(23)-H(23B)	0.9800
C(23)-H(23C)	0.9800
C(24)-H(24A)	0.9800

C(24)-H(24B)	0.9800
C(24)-H(24C)	0.9800
C(25)-H(25A)	0.9800
C(25)-H(25B)	0.9800
C(25)-H(25C)	0.9800
C(26)-C(27)	1.500(17)
C(26)-C(29)	1.521(16)
C(26)-C(28)	1.531(17)
C(27)-H(27A)	0.9800
C(27)-H(27B)	0.9800
C(27)-H(27C)	0.9800
C(28)-H(28A)	0.9800
C(28)-H(28B)	0.9800
C(28)-H(28C)	0.9800
C(29)-H(29A)	0.9800
C(29)-H(29B)	0.9800
C(29)-H(29C)	0.9800
N(4)-Th(1)-N(3)	100.1(3)
N(4)-Th(1)-N(2)	105.8(3)
N(3)-Th(1)-N(2)	118.8(3)
N(4)-Th(1)-N(1)	118.0(3)
N(3)-Th(1)-N(1)	109.6(3)
N(2)-Th(1)-N(1)	105.2(3)
N(4)-Th(1)-Si(4)	132.9(2)
N(3)-Th(1)-Si(4)	107.2(2)
N(2)-Th(1)-Si(4)	27.15(18)
N(1)-Th(1)-Si(4)	88.0(2)
N(4)-Th(1)-Si(6)	83.9(2)
N(3)-Th(1)-Si(6)	27.7(2)
N(2)-Th(1)-Si(6)	145.83(19)
N(1)-Th(1)-Si(6)	98.3(2)
Si(4)-Th(1)-Si(6)	133.48(8)
N(4)-Th(1)-Si(2)	99.4(2)
N(3)-Th(1)-Si(2)	135.2(2)
N(2)-Th(1)-Si(2)	93.69(19)
N(1)-Th(1)-Si(2)	26.9(2)
Si(4)-Th(1)-Si(2)	87.55(7)
Si(6)-Th(1)-Si(2)	117.43(8)
N(1)-Si(1)-C(2)	113.3(5)
N(1)-Si(1)-C(3)	112.7(6)
C(2)-Si(1)-C(3)	106.7(7)
N(1)-Si(1)-C(1)	113.5(6)
C(2)-Si(1)-C(1)	104.0(6)
C(3)-Si(1)-C(1)	106.0(8)
N(1)-Si(2)-C(4)	115.6(5)
N(1)-Si(2)-C(6)	108.6(4)
C(4)-Si(2)-C(6)	105.1(6)
N(1)-Si(2)-C(5)	112.0(5)
C(4)-Si(2)-C(5)	106.4(6)
C(6)-Si(2)-C(5)	108.8(5)
N(1)-Si(2)-Th(1)	39.0(3)
C(4)-Si(2)-Th(1)	137.3(5)

C(6)-Si(2)-Th(1)	71.2(3)
C(5)-Si(2)-Th(1)	115.2(4)
N(2)-Si(3)-C(7)	113.6(5)
N(2)-Si(3)-C(8)	112.6(5)
C(7)-Si(3)-C(8)	103.5(6)
N(2)-Si(3)-C(9)	112.5(5)
C(7)-Si(3)-C(9)	106.4(6)
C(8)-Si(3)-C(9)	107.7(6)
N(2)-Si(4)-C(11)	115.3(5)
N(2)-Si(4)-C(10)	113.4(5)
C(11)-Si(4)-C(10)	106.9(6)
N(2)-Si(4)-C(12)	109.9(5)
C(11)-Si(4)-C(12)	106.0(6)
C(10)-Si(4)-C(12)	104.6(6)
N(2)-Si(4)-Th(1)	38.9(2)
C(11)-Si(4)-Th(1)	136.8(4)
C(10)-Si(4)-Th(1)	115.4(4)
C(12)-Si(4)-Th(1)	72.2(4)
N(3)-Si(5)-C(15)	113.9(6)
N(3)-Si(5)-C(13)	112.9(6)
C(15)-Si(5)-C(13)	106.6(7)
N(3)-Si(5)-C(14)	111.7(5)
C(15)-Si(5)-C(14)	103.6(6)
C(13)-Si(5)-C(14)	107.7(6)
N(3)-Si(6)-C(16)	113.5(5)
N(3)-Si(6)-C(17)	113.6(5)
C(16)-Si(6)-C(17)	108.3(6)
N(3)-Si(6)-C(18)	110.3(4)
C(16)-Si(6)-C(18)	107.3(6)
C(17)-Si(6)-C(18)	103.3(6)
N(3)-Si(6)-Th(1)	39.2(3)
C(16)-Si(6)-Th(1)	139.1(4)
C(17)-Si(6)-Th(1)	111.2(4)
C(18)-Si(6)-Th(1)	73.3(4)
Si(1)-N(1)-Si(2)	116.4(5)
Si(1)-N(1)-Th(1)	129.5(4)
Si(2)-N(1)-Th(1)	114.1(4)
Si(4)-N(2)-Si(3)	116.5(4)
Si(4)-N(2)-Th(1)	113.9(4)
Si(3)-N(2)-Th(1)	129.6(4)
Si(5)-N(3)-Si(6)	119.9(4)
Si(5)-N(3)-Th(1)	126.8(4)
Si(6)-N(3)-Th(1)	113.1(4)
C(19)-N(4)-Th(1)	166.9(8)
C(20)-N(5)-C(19)	109.5(10)
C(20)-N(5)-C(26)	117.5(10)
C(19)-N(5)-C(26)	132.8(9)
C(21)-N(6)-C(19)	109.7(10)
C(21)-N(6)-C(22)	124.1(10)
C(19)-N(6)-C(22)	125.6(9)
Si(1)-C(1)-H(1A)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1B)	109.5

H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2A)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2B)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3A)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4A)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4B)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5A)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5B)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6A)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6B)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7A)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8A)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8B)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9A)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9B)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5

Si(4)-C(10)-H(10A)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10B)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11A)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12A)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13A)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14A)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15A)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16A)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16B)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17A)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18A)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18C)	109.5

H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
N(4)-C(19)-N(6)	128.2(10)
N(4)-C(19)-N(5)	128.1(10)
N(6)-C(19)-N(5)	103.7(9)
C(21)-C(20)-N(5)	108.6(11)
C(21)-C(20)-H(20)	125.7
N(5)-C(20)-H(20)	125.7
C(20)-C(21)-N(6)	108.5(11)
C(20)-C(21)-H(21)	125.7
N(6)-C(21)-H(21)	125.7
N(6)-C(22)-C(24)	112.2(11)
N(6)-C(22)-C(23)	106.7(10)
C(24)-C(22)-C(23)	111.9(12)
N(6)-C(22)-C(25)	109.4(10)
C(24)-C(22)-C(25)	108.5(11)
C(23)-C(22)-C(25)	108.1(11)
C(22)-C(23)-H(23A)	109.5
C(22)-C(23)-H(23B)	109.5
H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
C(22)-C(23)-H(23C)	109.5
H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5
C(22)-C(24)-H(24A)	109.5
C(22)-C(24)-H(24B)	109.5
H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
C(22)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5
C(22)-C(25)-H(25A)	109.5
C(22)-C(25)-H(25B)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5
C(22)-C(25)-H(25C)	109.5
H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5
H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5
N(5)-C(26)-C(27)	114.4(11)
N(5)-C(26)-C(29)	110.1(13)
C(27)-C(26)-C(29)	107.7(12)
N(5)-C(26)-C(28)	108.8(10)
C(27)-C(26)-C(28)	106.7(12)
C(29)-C(26)-C(28)	108.9(12)
C(26)-C(27)-H(27A)	109.5
C(26)-C(27)-H(27B)	109.5
H(27A)-C(27)-H(27B)	109.5
C(26)-C(27)-H(27C)	109.5
H(27A)-C(27)-H(27C)	109.5
H(27B)-C(27)-H(27C)	109.5
C(26)-C(28)-H(28A)	109.5
C(26)-C(28)-H(28B)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(26)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5

H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(26)-C(29)-H(29A)	109.5
C(26)-C(29)-H(29B)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29B)	109.5
C(26)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29B)-C(29)-H(29C)	109.5

Table 19. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Th(1)	27(1)	32(1)	37(1)	3(1)	-2(1)	-1(1)
Si(1)	70(2)	57(2)	59(2)	-10(2)	8(2)	-3(2)
Si(2)	44(2)	60(2)	63(2)	3(2)	14(1)	0(2)
Si(3)	58(2)	44(2)	58(2)	0(2)	-17(2)	-6(2)
Si(4)	46(2)	44(2)	58(2)	10(2)	-8(2)	-1(2)
Si(5)	41(2)	76(3)	66(3)	10(2)	5(2)	-18(2)
Si(6)	41(2)	71(2)	70(2)	-1(2)	-15(2)	-10(2)
N(1)	45(5)	49(5)	47(6)	1(4)	10(4)	2(4)
N(2)	39(4)	46(5)	35(5)	3(4)	-15(4)	-1(4)
N(3)	35(4)	55(5)	45(6)	1(4)	-4(4)	-6(4)
N(4)	41(5)	40(5)	37(5)	-3(4)	-5(4)	5(4)
N(5)	52(6)	50(6)	55(7)	3(5)	6(5)	17(4)
N(6)	49(6)	39(5)	60(7)	3(5)	-4(5)	11(5)
C(1)	96(12)	56(8)	183(17)	-9(10)	26(12)	15(9)
C(2)	78(10)	67(8)	85(10)	-21(7)	12(8)	-14(7)
C(3)	177(17)	107(12)	60(10)	-25(9)	7(11)	-43(12)
C(4)	51(8)	87(10)	125(13)	-8(9)	28(8)	1(7)
C(5)	96(9)	94(10)	74(9)	18(7)	10(9)	-1(9)
C(6)	79(9)	49(7)	80(10)	10(7)	14(7)	-27(6)
C(7)	76(9)	73(9)	106(12)	5(8)	-37(8)	-24(7)
C(8)	81(9)	36(7)	85(10)	-11(7)	-18(8)	-5(6)
C(9)	123(12)	82(10)	55(9)	-13(7)	-6(8)	4(9)
C(10)	51(8)	81(10)	98(11)	10(8)	-8(8)	16(7)
C(11)	77(10)	83(9)	74(10)	15(7)	-19(7)	-5(7)
C(12)	68(8)	46(7)	87(11)	4(7)	-2(8)	-7(6)
C(13)	79(10)	87(10)	60(11)	10(8)	3(8)	-31(8)
C(14)	65(8)	91(10)	60(9)	18(7)	5(6)	-19(7)
C(15)	61(9)	138(14)	96(12)	5(11)	24(8)	-12(9)
C(16)	74(10)	106(11)	92(11)	-6(9)	-20(8)	-31(8)
C(17)	61(8)	86(10)	105(11)	-13(8)	-31(7)	15(7)
C(18)	77(8)	77(10)	69(8)	8(8)	-13(7)	1(8)
C(19)	42(6)	48(7)	54(7)	-5(6)	-10(5)	5(5)
C(20)	74(8)	55(8)	86(11)	0(9)	9(9)	27(6)
C(21)	65(8)	53(8)	80(11)	0(7)	-12(7)	24(6)
C(22)	75(9)	53(7)	47(7)	8(6)	7(7)	17(6)
C(23)	65(10)	136(14)	112(14)	38(12)	9(10)	1(9)
C(24)	210(20)	64(9)	64(10)	-13(8)	26(11)	1(11)
C(25)	107(12)	90(11)	72(10)	31(9)	12(9)	27(8)
C(26)	50(9)	59(9)	89(13)	-7(8)	3(8)	1(6)
C(27)	82(10)	74(9)	58(10)	9(7)	20(8)	-6(8)
C(28)	113(12)	100(11)	57(9)	-23(8)	0(9)	-6(9)
C(29)	60(9)	123(13)	78(11)	1(10)	18(8)	9(8)

Table 20. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^4 \times 10^3$) for shelxl.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	3962	2392	9584	168
H(1B)	3131	1741	9592	168
H(1C)	3754	1955	8894	168
H(2A)	6287	2272	9458	115
H(2B)	6232	1807	8776	115
H(2C)	6950	1552	9424	115
H(3A)	5206	1851	10742	172
H(3B)	5809	1110	10735	172
H(3C)	4476	1157	10795	172
H(4A)	1854	189	9900	131
H(4B)	2174	632	9231	131
H(4C)	2500	911	9981	131
H(5A)	3437	-565	10697	131
H(5B)	4235	86	10837	131
H(5C)	4740	-609	10512	131
H(6A)	2908	-1002	9241	104
H(6B)	4198	-1001	9020	104
H(6C)	3311	-548	8597	104
H(7A)	2766	-1494	6642	127
H(7B)	2720	-667	6574	127
H(7C)	2482	-1028	7302	127
H(8A)	4428	-2202	7351	102
H(8B)	4254	-1761	8041	102
H(8C)	5475	-1835	7712	102
H(9A)	4948	-1539	6036	130
H(9B)	5998	-1134	6352	130
H(9C)	5034	-714	5961	130
H(10A)	2416	1038	7341	115
H(10B)	2674	594	8019	115
H(10C)	2274	213	7330	115
H(11A)	3867	1081	6180	117
H(11B)	3832	260	6064	117
H(11C)	5008	649	6134	117
H(12A)	4567	1697	7466	101
H(12B)	5713	1268	7486	101
H(12C)	4877	1244	8129	101
H(13A)	8349	2037	7173	113
H(13B)	8490	2020	7993	113
H(13C)	7270	1975	7657	113
H(14A)	7673	790	6386	108
H(14B)	6583	678	6851	108
H(14C)	7463	60	6755	108
H(15A)	9864	911	6939	148
H(15B)	9733	168	7298	148
H(15C)	10135	821	7742	148
H(16A)	9803	1165	9623	136
H(16B)	8800	1606	9298	136

H(16C)	9810	1351	8820	136
H(17A)	10057	-312	9381	126
H(17B)	10086	-221	8562	126
H(17C)	9205	-739	8908	126
H(18A)	8252	154	10207	111
H(18B)	7364	-250	9740	111
H(18C)	7192	557	9901	111
H(20)	8721	-2948	8325	86
H(21)	7832	-3166	9425	79
H(23A)	4519	-2312	9932	157
H(23B)	5060	-2739	9309	157
H(23C)	4917	-1916	9251	157
H(24A)	5787	-1578	10677	168
H(24B)	6109	-1155	9995	168
H(24C)	7072	-1493	10459	168
H(25A)	5947	-2801	10741	135
H(25B)	7237	-2784	10522	135
H(25C)	6367	-3247	10096	135
H(27A)	8155	-974	6944	107
H(27B)	8078	-734	7732	107
H(27C)	7024	-1093	7369	107
H(28A)	8100	-2170	6629	135
H(28B)	7022	-2322	7094	135
H(28C)	8136	-2770	7198	135
H(29A)	9781	-1614	7149	131
H(29B)	9822	-2234	7696	131
H(29C)	9805	-1446	7956	131

5. Crystallographic Data for Complex 7

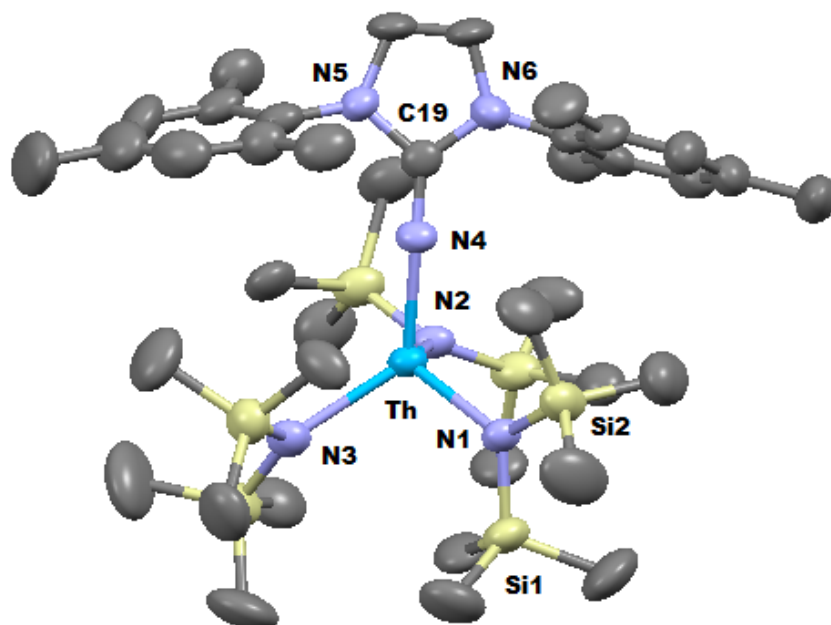


Figure 5: Molecular structure of $[(\text{Im}^{\text{Mes}}\text{N})\text{Th}(\text{N}\{\text{SiMe}_3\}_2)_3]$ (7). Color code: Th, green; N, blue; Si, yellow; C, grey. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

Table 21: Crystallographic Data and Structure Refinement for Complex 7.

Complex	7
Empirical Formula	C ₃₉ H ₇₈ N ₆ Si ₆ Th
Formula weight/g mol ⁻¹	1031.65
T/K	200(2)
$\lambda/\text{\AA}$	0.71073
Crystal System	Monoclinic
Space group	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>
<i>a</i> / $\text{\AA}$	21.6750(8)
<i>b</i> / $\text{\AA}$	12.2840(11)
<i>c</i> / $\text{\AA}$	20.0070(14)
$\alpha/^\circ$	90
$\beta/^\circ$	99.745(4)
$\gamma/^\circ$	90
<i>V</i> / $\text{\AA}^3$	5250.1(6)
<i>Z</i>	4
$\rho/\text{g cm}^{-3}$	1.305
$\mu(\text{Mo-K}\alpha)/\text{mm}^{-1}$	3.008
Θ range for data collection/ $^\circ$	1.91 to 24.14
<i>F</i> (000)	2112
Limiting indices	-24 $\leq h \leq$ 24 -13 $\leq k \leq$ 0 0 $\leq l \leq$ 22
Reflections collected/unique (<i>R</i> _{int})	7788/7788 (0.0968)
Completeness to Θ	93.0%
GOF on <i>F</i> ²	1.142
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ [<i>I</i> >2 σ (<i>I</i>)]	0.0701, 0.0951
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (all data)	0.1047, 0.1029
Largest diff. peak and hole/ $\text{e}\text{\AA}^{-3}$	0.740 and -0.536

Table 22. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Th(1)	2470(1)	647(1)	4128(1)	37(1)
Si(1)	1377(2)	-1067(2)	3193(2)	60(1)
Si(2)	929(2)	1198(3)	3081(2)	61(1)
Si(3)	3340(2)	330(2)	5708(1)	59(1)
Si(4)	2073(2)	-679(3)	5644(1)	58(1)
Si(5)	3625(2)	-1393(3)	3634(2)	68(1)
Si(6)	3322(1)	609(3)	2842(1)	60(1)
N(1)	1502(3)	281(6)	3416(3)	43(2)
N(2)	2618(4)	-14(6)	5246(3)	46(2)
N(3)	3201(4)	-189(6)	3512(3)	50(2)
N(4)	2499(3)	2386(6)	4372(3)	41(2)
N(5)	3084(4)	4037(6)	4740(4)	46(2)
N(6)	2111(4)	3947(6)	4922(4)	51(2)
C(1)	1910(5)	-1947(8)	3789(5)	75(3)
C(2)	1529(6)	-1412(10)	2327(5)	96(5)
C(3)	575(5)	-1573(10)	3264(7)	102(5)
C(4)	562(6)	848(11)	2191(5)	104(5)
C(5)	1229(5)	2598(8)	3024(5)	80(4)
C(6)	298(6)	1260(10)	3601(7)	101(5)
C(7)	3754(6)	-814(10)	6225(5)	92(4)
C(8)	3318(6)	1484(9)	6313(5)	79(4)
C(9)	3854(5)	813(9)	5100(5)	68(3)
C(10)	2086(6)	-311(9)	6556(5)	85(4)
C(11)	2191(6)	-2195(7)	5662(5)	76(4)
C(12)	1267(5)	-349(8)	5192(5)	69(3)
C(13)	3570(6)	-2060(9)	4463(5)	86(4)
C(14)	4475(6)	-1206(12)	3628(8)	132(6)
C(15)	3366(7)	-2442(10)	2971(6)	109(5)
C(16)	3236(6)	-91(11)	2003(5)	96(4)
C(17)	4097(6)	1296(10)	2979(7)	105(5)
C(18)	2717(5)	1697(8)	2738(5)	72(3)
C(19)	2555(5)	3358(8)	4643(4)	42(2)
C(20)	2943(6)	4994(8)	5067(5)	60(3)
C(21)	2364(6)	4938(8)	5172(5)	63(3)
C(22)	1453(5)	3734(7)	4864(5)	46(2)
C(23)	1028(5)	4300(8)	4383(4)	51(2)
C(24)	405(5)	4125(9)	4360(6)	64(3)
C(25)	177(6)	3453(9)	4801(6)	66(3)
C(26)	612(6)	2927(9)	5276(5)	66(3)
C(27)	1254(5)	3052(8)	5331(5)	54(3)
C(28)	1707(6)	2531(9)	5885(5)	81(4)
C(29)	1251(5)	5088(8)	3886(5)	75(4)
C(30)	-519(5)	3269(11)	4754(7)	102(5)
C(31)	3611(5)	3948(7)	4409(5)	54(3)
C(32)	4204(6)	3720(8)	4797(5)	59(3)
C(33)	4709(6)	3680(10)	4443(8)	86(4)

C(34)	4656(8)	3854(11)	3775(9)	93(4)
C(35)	4076(8)	4140(10)	3417(6)	87(4)
C(36)	3542(6)	4173(9)	3725(5)	65(3)
C(37)	2930(6)	4547(9)	3342(5)	80(4)
C(38)	4290(5)	3584(9)	5551(5)	80(4)
C(39)	5223(7)	3760(13)	3413(9)	150(7)

Table 23. Bond lengths [Å] and angles [deg] for shelxl.

Th(1)-N(4)	2.189(7)
Th(1)-N(2)	2.350(6)
Th(1)-N(1)	2.370(7)
Th(1)-N(3)	2.397(8)
Th(1)-Si(3)	3.418(3)
Th(1)-Si(1)	3.471(3)
Si(1)-N(1)	1.725(7)
Si(1)-C(1)	1.860(10)
Si(1)-C(2)	1.866(11)
Si(1)-C(3)	1.873(12)
Si(2)-N(1)	1.726(7)
Si(2)-C(5)	1.848(11)
Si(2)-C(6)	1.855(13)
Si(2)-C(4)	1.874(10)
Si(3)-N(2)	1.730(8)
Si(3)-C(8)	1.870(10)
Si(3)-C(9)	1.880(11)
Si(3)-C(7)	1.881(11)
Si(4)-N(2)	1.736(8)
Si(4)-C(12)	1.871(10)
Si(4)-C(10)	1.875(10)
Si(4)-C(11)	1.878(10)
Si(5)-N(3)	1.737(8)
Si(5)-C(14)	1.859(14)
Si(5)-C(15)	1.866(11)
Si(5)-C(13)	1.871(11)
Si(6)-N(3)	1.716(8)
Si(6)-C(17)	1.857(12)
Si(6)-C(18)	1.859(10)
Si(6)-C(16)	1.866(11)
N(4)-C(19)	1.308(10)
N(5)-C(20)	1.404(11)
N(5)-C(19)	1.404(11)
N(5)-C(31)	1.419(12)
N(6)-C(21)	1.394(11)
N(6)-C(19)	1.394(12)
N(6)-C(22)	1.436(12)
C(1)-H(1A)	0.9800
C(1)-H(1B)	0.9800
C(1)-H(1C)	0.9800
C(2)-H(2A)	0.9800
C(2)-H(2B)	0.9800
C(2)-H(2C)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9800
C(3)-H(3B)	0.9800
C(3)-H(3C)	0.9800
C(4)-H(4A)	0.9800
C(4)-H(4B)	0.9800
C(4)-H(4C)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9800

C(5)-H(5B)	0.9800
C(5)-H(5C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9800
C(6)-H(6B)	0.9800
C(6)-H(6C)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.9800
C(7)-H(7B)	0.9800
C(7)-H(7C)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9800
C(8)-H(8B)	0.9800
C(8)-H(8C)	0.9800
C(9)-H(9A)	0.9800
C(9)-H(9B)	0.9800
C(9)-H(9C)	0.9800
C(10)-H(10A)	0.9800
C(10)-H(10B)	0.9800
C(10)-H(10C)	0.9800
C(11)-H(11A)	0.9800
C(11)-H(11B)	0.9800
C(11)-H(11C)	0.9800
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-H(13A)	0.9800
C(13)-H(13B)	0.9800
C(13)-H(13C)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800
C(14)-H(14C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(15)-H(15C)	0.9800
C(16)-H(16A)	0.9800
C(16)-H(16B)	0.9800
C(16)-H(16C)	0.9800
C(17)-H(17A)	0.9800
C(17)-H(17B)	0.9800
C(17)-H(17C)	0.9800
C(18)-H(18A)	0.9800
C(18)-H(18B)	0.9800
C(18)-H(18C)	0.9800
C(20)-C(21)	1.310(14)
C(20)-H(20)	0.9500
C(21)-H(21)	0.9500
C(22)-C(27)	1.377(13)
C(22)-C(23)	1.398(12)
C(23)-C(24)	1.362(13)
C(23)-C(29)	1.524(13)
C(24)-C(25)	1.361(14)
C(24)-H(24)	0.9500
C(25)-C(26)	1.380(14)
C(25)-C(30)	1.514(15)

C(26)-C(27)	1.387(14)
C(26)-H(26)	0.9500
C(27)-C(28)	1.494(13)
C(28)-H(28A)	0.9800
C(28)-H(28B)	0.9800
C(28)-H(28C)	0.9800
C(29)-H(29A)	0.9800
C(29)-H(29B)	0.9800
C(29)-H(29C)	0.9800
C(30)-H(30A)	0.9800
C(30)-H(30B)	0.9800
C(30)-H(30C)	0.9800
C(31)-C(36)	1.379(13)
C(31)-C(32)	1.412(14)
C(32)-C(33)	1.402(16)
C(32)-C(38)	1.497(13)
C(33)-C(34)	1.339(17)
C(33)-H(33)	0.9500
C(34)-C(35)	1.383(17)
C(34)-C(39)	1.531(18)
C(35)-C(36)	1.402(16)
C(35)-H(35)	0.9500
C(36)-C(37)	1.488(14)
C(37)-H(37A)	0.9800
C(37)-H(37B)	0.9800
C(37)-H(37C)	0.9800
C(38)-H(38A)	0.9800
C(38)-H(38B)	0.9800
C(38)-H(38C)	0.9800
C(39)-H(39A)	0.9800
C(39)-H(39B)	0.9800
C(39)-H(39C)	0.9800
N(4)-Th(1)-N(2)	97.5(2)
N(4)-Th(1)-N(1)	108.0(2)
N(2)-Th(1)-N(1)	118.1(3)
N(4)-Th(1)-N(3)	122.4(3)
N(2)-Th(1)-N(3)	110.2(3)
N(1)-Th(1)-N(3)	101.8(2)
N(4)-Th(1)-Si(3)	85.08(17)
N(2)-Th(1)-Si(3)	27.78(19)
N(1)-Th(1)-Si(3)	145.84(18)
N(3)-Th(1)-Si(3)	96.75(17)
N(4)-Th(1)-Si(1)	134.69(19)
N(2)-Th(1)-Si(1)	105.92(18)
N(1)-Th(1)-Si(1)	26.77(18)
N(3)-Th(1)-Si(1)	85.02(18)
Si(3)-Th(1)-Si(1)	130.45(7)
N(1)-Si(1)-C(1)	109.8(4)
N(1)-Si(1)-C(2)	114.4(5)
C(1)-Si(1)-C(2)	106.0(5)
N(1)-Si(1)-C(3)	114.0(5)

C(1)-Si(1)-C(3)	104.0(5)
C(2)-Si(1)-C(3)	107.9(6)
N(1)-Si(1)-Th(1)	38.2(2)
C(1)-Si(1)-Th(1)	73.4(3)
C(2)-Si(1)-Th(1)	115.2(4)
C(3)-Si(1)-Th(1)	135.9(4)
N(1)-Si(2)-C(5)	113.2(4)
N(1)-Si(2)-C(6)	111.1(5)
C(5)-Si(2)-C(6)	107.3(6)
N(1)-Si(2)-C(4)	112.5(5)
C(5)-Si(2)-C(4)	104.6(6)
C(6)-Si(2)-C(4)	107.9(6)
N(2)-Si(3)-C(8)	114.3(5)
N(2)-Si(3)-C(9)	108.2(4)
C(8)-Si(3)-C(9)	105.2(5)
N(2)-Si(3)-C(7)	114.6(5)
C(8)-Si(3)-C(7)	105.8(5)
C(9)-Si(3)-C(7)	108.2(5)
N(2)-Si(3)-Th(1)	39.3(2)
C(8)-Si(3)-Th(1)	116.2(3)
C(9)-Si(3)-Th(1)	70.1(3)
C(7)-Si(3)-Th(1)	137.0(4)
N(2)-Si(4)-C(12)	109.2(4)
N(2)-Si(4)-C(10)	115.6(5)
C(12)-Si(4)-C(10)	106.0(5)
N(2)-Si(4)-C(11)	112.0(5)
C(12)-Si(4)-C(11)	109.7(5)
C(10)-Si(4)-C(11)	103.9(5)
N(3)-Si(5)-C(14)	113.2(5)
N(3)-Si(5)-C(15)	113.6(5)
C(14)-Si(5)-C(15)	105.1(7)
N(3)-Si(5)-C(13)	112.7(5)
C(14)-Si(5)-C(13)	105.8(6)
C(15)-Si(5)-C(13)	105.7(6)
N(3)-Si(6)-C(17)	113.5(5)
N(3)-Si(6)-C(18)	107.4(4)
C(17)-Si(6)-C(18)	107.0(6)
N(3)-Si(6)-C(16)	115.7(5)
C(17)-Si(6)-C(16)	107.0(6)
C(18)-Si(6)-C(16)	105.6(5)
Si(1)-N(1)-Si(2)	117.0(4)
Si(1)-N(1)-Th(1)	115.0(4)
Si(2)-N(1)-Th(1)	128.0(4)
Si(3)-N(2)-Si(4)	119.6(4)
Si(3)-N(2)-Th(1)	112.9(4)
Si(4)-N(2)-Th(1)	127.3(4)
Si(6)-N(3)-Si(5)	116.7(5)
Si(6)-N(3)-Th(1)	111.0(4)
Si(5)-N(3)-Th(1)	132.2(4)
C(19)-N(4)-Th(1)	168.5(6)
C(20)-N(5)-C(19)	109.0(9)
C(20)-N(5)-C(31)	122.5(8)

C(19)-N(5)-C(31)	126.4(8)
C(21)-N(6)-C(19)	110.0(9)
C(21)-N(6)-C(22)	120.9(9)
C(19)-N(6)-C(22)	128.1(8)
Si(1)-C(1)-H(1A)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1B)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2A)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2B)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3A)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4A)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4B)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5A)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5B)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6A)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6B)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7A)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8A)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8B)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5

Si(3)-C(9)-H(9A)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9B)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10A)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10B)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11A)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12A)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13A)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14A)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15A)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16A)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16B)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17A)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17C)	109.5

H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18A)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
N(4)-C(19)-N(6)	128.2(9)
N(4)-C(19)-N(5)	128.0(9)
N(6)-C(19)-N(5)	103.8(8)
C(21)-C(20)-N(5)	108.7(9)
C(21)-C(20)-H(20)	125.6
N(5)-C(20)-H(20)	125.6
C(20)-C(21)-N(6)	108.5(10)
C(20)-C(21)-H(21)	125.7
N(6)-C(21)-H(21)	125.7
C(27)-C(22)-C(23)	121.7(10)
C(27)-C(22)-N(6)	118.4(9)
C(23)-C(22)-N(6)	119.6(9)
C(24)-C(23)-C(22)	118.6(10)
C(24)-C(23)-C(29)	120.0(9)
C(22)-C(23)-C(29)	121.4(9)
C(25)-C(24)-C(23)	122.7(11)
C(25)-C(24)-H(24)	118.6
C(23)-C(24)-H(24)	118.6
C(24)-C(25)-C(26)	116.8(11)
C(24)-C(25)-C(30)	121.2(12)
C(26)-C(25)-C(30)	122.0(12)
C(25)-C(26)-C(27)	124.2(11)
C(25)-C(26)-H(26)	117.9
C(27)-C(26)-H(26)	117.9
C(22)-C(27)-C(26)	116.0(10)
C(22)-C(27)-C(28)	121.6(11)
C(26)-C(27)-C(28)	122.4(11)
C(27)-C(28)-H(28A)	109.5
C(27)-C(28)-H(28B)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(27)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(23)-C(29)-H(29A)	109.5
C(23)-C(29)-H(29B)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29B)	109.5
C(23)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29A)-C(29)-H(29C)	109.5
H(29B)-C(29)-H(29C)	109.5
C(25)-C(30)-H(30A)	109.5
C(25)-C(30)-H(30B)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30B)	109.5
C(25)-C(30)-H(30C)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30C)	109.5

H(30B)-C(30)-H(30C)	109.5
C(36)-C(31)-C(32)	121.4(11)
C(36)-C(31)-N(5)	119.1(10)
C(32)-C(31)-N(5)	119.3(9)
C(33)-C(32)-C(31)	116.4(10)
C(33)-C(32)-C(38)	122.0(11)
C(31)-C(32)-C(38)	121.5(11)
C(34)-C(33)-C(32)	123.8(13)
C(34)-C(33)-H(33)	118.1
C(32)-C(33)-H(33)	118.1
C(33)-C(34)-C(35)	118.3(14)
C(33)-C(34)-C(39)	121.3(17)
C(35)-C(34)-C(39)	120.4(15)
C(34)-C(35)-C(36)	121.7(12)
C(34)-C(35)-H(35)	119.1
C(36)-C(35)-H(35)	119.1
C(31)-C(36)-C(35)	118.2(11)
C(31)-C(36)-C(37)	120.7(11)
C(35)-C(36)-C(37)	120.9(11)
C(36)-C(37)-H(37A)	109.5
C(36)-C(37)-H(37B)	109.5
H(37A)-C(37)-H(37B)	109.5
C(36)-C(37)-H(37C)	109.5
H(37A)-C(37)-H(37C)	109.5
H(37B)-C(37)-H(37C)	109.5
C(32)-C(38)-H(38A)	109.5
C(32)-C(38)-H(38B)	109.5
H(38A)-C(38)-H(38B)	109.5
C(32)-C(38)-H(38C)	109.5
H(38A)-C(38)-H(38C)	109.5
H(38B)-C(38)-H(38C)	109.5
C(34)-C(39)-H(39A)	109.5
C(34)-C(39)-H(39B)	109.5
H(39A)-C(39)-H(39B)	109.5
C(34)-C(39)-H(39C)	109.5
H(39A)-C(39)-H(39C)	109.5
H(39B)-C(39)-H(39C)	109.5

Table 24. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

U11	U22	U33	U23	U13	U12	
Th(1)	46(1)	31(1)	34(1)	-2(1)	1(1)	-4(1)
Si(1)	58(2)	49(2)	69(2)	-12(2)	1(2)	-12(2)
Si(2)	54(2)	61(2)	61(2)	-12(2)	-8(2)	7(2)
Si(3)	74(2)	52(2)	44(2)	2(1)	-7(2)	-7(2)
Si(4)	81(2)	43(2)	49(2)	4(2)	11(1)	-11(2)
Si(5)	67(2)	56(2)	81(2)	-3(2)	13(2)	15(2)
Si(6)	64(2)	67(2)	51(2)	1(2)	16(1)	-4(2)
N(1)	41(5)	42(5)	43(4)	-6(3)	-3(4)	-3(4)
N(2)	63(6)	40(5)	33(4)	-3(3)	2(4)	-8(4)
N(3)	58(6)	49(5)	40(4)	-6(4)	4(4)	-3(4)
N(4)	54(5)	30(4)	40(4)	0(3)	5(4)	-1(4)
N(5)	47(6)	38(5)	53(5)	-2(4)	6(4)	-7(4)
N(6)	54(6)	41(5)	60(5)	-10(4)	14(4)	0(4)
C(1)	86(9)	37(6)	101(9)	4(6)	14(7)	-14(6)
C(2)	131(13)	85(9)	67(8)	-30(7)	3(8)	13(9)
C(3)	77(10)	80(10)	143(12)	-1(9)	0(9)	-39(8)
C(4)	112(11)	113(11)	70(8)	-7(8)	-38(7)	37(9)
C(5)	84(10)	60(8)	87(8)	4(6)	-8(7)	28(7)
C(6)	68(10)	93(10)	139(12)	-19(9)	13(9)	12(8)
C(7)	99(10)	93(10)	72(7)	15(7)	-21(7)	-6(8)
C(8)	102(10)	85(9)	48(6)	-5(6)	5(6)	-25(8)
C(9)	61(7)	64(8)	70(7)	-14(6)	-13(6)	-15(6)
C(10)	138(12)	62(8)	55(6)	4(6)	17(7)	-9(8)
C(11)	104(10)	39(6)	85(8)	12(6)	17(7)	-11(6)
C(12)	83(9)	52(7)	75(7)	2(6)	21(6)	-10(6)
C(13)	100(11)	67(8)	86(8)	7(7)	2(7)	26(8)
C(14)	81(11)	129(13)	192(16)	45(12)	37(11)	51(10)
C(15)	165(15)	69(9)	96(9)	-35(8)	26(10)	21(9)
C(16)	99(11)	130(12)	67(8)	-14(8)	36(7)	3(9)
C(17)	83(11)	95(10)	139(12)	32(9)	22(9)	-28(8)
C(18)	107(10)	62(7)	54(6)	16(6)	31(6)	18(7)
C(19)	51(7)	44(6)	28(5)	7(4)	-2(4)	-1(5)
C(20)	74(9)	33(6)	71(7)	-20(5)	7(6)	-9(6)
C(21)	65(9)	34(6)	87(8)	-23(6)	3(7)	-10(6)
C(22)	53(7)	33(6)	55(6)	-9(5)	13(5)	-4(5)
C(23)	61(7)	34(5)	58(6)	4(5)	5(5)	-6(6)
C(24)	51(8)	60(8)	78(8)	-5(6)	6(6)	1(6)
C(25)	54(8)	59(8)	87(9)	-16(7)	19(7)	-1(6)
C(26)	86(10)	53(7)	65(7)	-8(6)	31(7)	-10(7)
C(27)	66(8)	46(6)	53(6)	-18(5)	16(6)	3(6)
C(28)	104(11)	73(8)	62(7)	10(6)	5(7)	4(8)
C(29)	84(9)	41(6)	95(8)	17(6)	1(7)	0(6)
C(30)	64(9)	108(11)	140(12)	-52(9)	38(8)	-27(8)
C(31)	67(8)	41(6)	51(6)	-4(5)	4(6)	-14(5)
C(32)	71(9)	44(6)	60(7)	0(5)	3(6)	-21(6)
C(33)	57(9)	73(9)	127(12)	7(9)	12(9)	-23(7)
C(34)	100(13)	73(9)	115(12)	0(9)	46(11)	-28(9)

C(35)	127(13)	72(10)	68(8)	3(7)	34(9)	-21(9)
C(36)	77(9)	62(8)	56(7)	3(6)	13(6)	-13(7)
C(37)	102(10)	62(8)	69(7)	14(6)	-6(7)	-5(7)
C(38)	74(9)	80(9)	79(8)	-1(7)	-10(7)	-1(7)
C(39)	107(14)	164(16)	205(18)	-55(14)	98(13)	-51(12)

Table 25. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	1836	-2712	3660	113
H(1B)	1829	-1836	4251	113
H(1C)	2345	-1757	3769	113
H(2A)	1259	-967	1990	144
H(2B)	1439	-2184	2234	144
H(2C)	1969	-1264	2301	144
H(3A)	261	-1153	2958	153
H(3B)	504	-1485	3732	153
H(3C)	540	-2344	3138	155
H(4A)	241	1390	2023	157
H(4B)	368	126	2184	157
H(4C)	883	846	1901	157
H(5A)	884	3079	2831	120
H(5B)	1550	2601	2734	120
H(5C)	1411	2854	3479	120
H(6A)	-21	1785	3400	151
H(6B)	474	1489	4063	151
H(6C)	106	539	3614	151
H(7A)	3951	-536	6669	139
H(7B)	4075	-1121	5990	139
H(7C)	3450	-1382	6287	139
H(8A)	3582	1310	6747	119
H(8B)	2886	1602	6383	119
H(8C)	3475	2147	6125	119
H(9A)	4285	891	5340	102
H(9B)	3702	1517	4909	102
H(9C)	3843	281	4732	102
H(10A)	1766	-731	6735	127
H(10B)	2000	469	6591	127
H(10C)	2499	-476	6818	127
H(11A)	1876	-2538	5892	113
H(11B)	2610	-2365	5907	113
H(11C)	2147	-2471	5197	113
H(12A)	958	-725	5414	103
H(12B)	1222	-588	4719	103
H(12C)	1198	438	5207	83
H(13A)	3819	-2730	4508	129
H(13B)	3132	-2236	4479	129
H(13C)	3731	-1563	4835	129
H(14A)	4689	-1910	3703	198
H(14B)	4650	-700	3989	198
H(14C)	4535	-910	3188	198
H(15A)	3623	-3098	3069	164
H(15B)	3414	-2155	2525	164
H(15C)	2926	-2623	2970	164
H(16A)	3586	110	1776	144
H(16B)	2841	130	1722	144

H(16C)	3235	-881	2072	144
H(17A)	4289	1219	2572	158
H(17B)	4369	961	3366	158
H(17C)	4042	2070	3072	158
H(18A)	2736	2106	2321	108
H(18B)	2795	2192	3128	108
H(18C)	2302	1368	2710	108
H(20)	3222	5584	5192	72
H(21)	2152	5482	5384	76
H(24)	117	4489	4023	77
H(26)	461	2449	5585	79
H(28A)	1479	2068	6159	121
H(28B)	1933	3097	6173	121
H(28C)	2006	2087	5687	121
H(29A)	1709	5115	3970	112
H(29B)	1084	5816	3948	112
H(29C)	1102	4842	3421	112
H(30A)	-593	2758	5108	152
H(30B)	-691	2966	4308	152
H(30C)	-725	3963	4815	152
H(33)	5113	3520	4691	103
H(35)	4039	4319	2950	104
H(37A)	2965	4652	2865	120
H(37B)	2813	5236	3533	120
H(37C)	2609	3998	3377	120
H(38A)	4731	3428	5728	120
H(38B)	4030	2980	5661	120
H(38C)	4166	4256	5757	120
H(39A)	5092	3906	2929	226
H(39B)	5397	3024	3475	226
H(39C)	5542	4291	3606	226

6. Crystallographic Data for Complex **8**

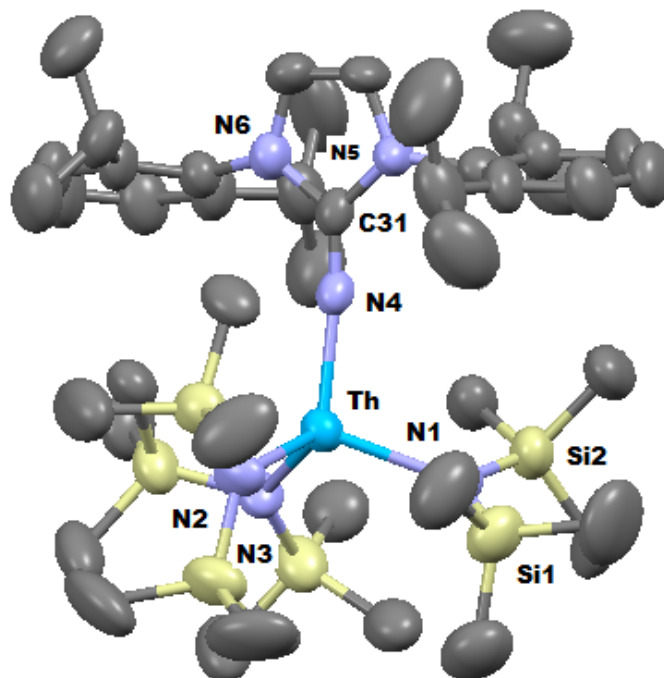


Figure 6: Molecular structure of $[(\text{Im}^{\text{Dipp}}\text{N})\text{Th}(\text{N}(\text{SiMe}_3)_2)_3]$ (**8**). Color code: Th, green; N, blue; Si, yellow; C, grey. Hydrogen atoms and distorted solvent molecules are omitted for clarity.

Table 26: Crystallographic Data and Structure Refinement for Complex **8**.

Complex	8 · 3 C₇H₈
Empirical	C ₄₅ H ₉₀ N ₆ Si ₆ Th·
Formula	3C ₇ H ₈
Formula weight/g mol ⁻¹	1392.20
T/K	200(2)
λ/Å	0.71073
Crystal System	Triclinic
Space group	<i>P</i> -1
a/Å	12.0820(4)
b/Å	14.0920(4)
c/Å	23.2090(10)
α/°	95.8390(11)
β/°	92.6290(11)
γ/°	102.239(2)
V/Å ³	3832,5(2)
Z	2
ρ/g cm ⁻³	1.185
μ(Mo-K _α)/mm ⁻¹	2.077
Θ range for data collection/°	0.88 to 25.05
F(000)	1404
Limiting indices	0 ≤ h ≤ 14 -16 ≤ k ≤ 16 -27 ≤ l ≤ 27
Reflections collected/unique (R _{int})	12969/12969 (0.0902)
Completeness to Θ	99.5%
GOF on F ²	1.060
R ₁ , wR ₂ [I > 2σ(I)]	0.0849, 0.1730
R ₁ , wR ₂ (all data)	0.1691, 0.2208
Largest peak and hole/eÅ ⁻³	0.985 and -1.428

Table 27. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Th(1)	7501(1)	4554(1)	2532(1)	50(1)
Si(1)	6869(4)	3184(3)	1065(2)	86(1)
Si(2)	6265(4)	5109(3)	1277(2)	74(1)
Si(3)	9675(3)	3202(3)	2870(2)	69(1)
Si(4)	7275(4)	2105(3)	2817(2)	87(1)
Si(5)	4580(3)	4579(3)	3037(2)	78(1)
Si(6)	6504(3)	4770(3)	3896(2)	74(1)
N(1)	6788(8)	4190(7)	1549(4)	63(3)
N(2)	8247(8)	3175(6)	2747(4)	61(3)
N(3)	5997(7)	4653(7)	3174(4)	58(2)
N(4)	8807(7)	5910(7)	2563(4)	49(2)
N(5)	10377(8)	7044(7)	2193(4)	54(2)
N(6)	10241(8)	7174(7)	3125(4)	58(2)
C(1)	6821(18)	3402(15)	278(7)	145(8)
C(2)	8266(14)	2838(14)	1193(8)	130(7)
C(3)	5685(15)	2114(12)	1114(8)	123(6)
C(4)	7171(14)	5761(11)	741(6)	105(5)
C(5)	6223(13)	6037(9)	1908(6)	84(4)
C(6)	4790(13)	4683(12)	904(6)	102(5)
C(7)	10232(14)	2336(13)	2365(8)	134(8)
C(8)	10499(10)	4428(10)	2805(6)	82(4)
C(9)	10048(14)	2903(13)	3603(8)	121(6)
C(10)	5805(11)	2306(10)	2679(8)	101(5)
C(11)	7407(14)	1031(10)	2308(9)	133(7)
C(12)	7352(15)	1691(13)	3553(9)	137(8)
C(13)	4037(12)	3912(11)	2298(7)	95(5)
C(14)	3649(12)	3867(13)	3557(7)	108(6)
C(15)	4194(12)	5815(11)	3087(7)	99(5)
C(16)	6003(12)	3673(13)	4280(7)	107(6)
C(17)	8071(10)	4954(9)	3920(6)	74(4)
C(18)	6134(13)	5803(12)	4361(6)	102(5)
C(19)	12553(18)	6192(16)	1519(9)	154(9)
C(20)	11292(15)	5662(11)	1457(6)	92(5)
C(21)	11197(18)	4693(13)	1110(9)	143(8)
C(22)	10596(11)	6305(10)	1212(5)	72(4)
C(23)	10129(10)	6977(9)	1576(5)	61(3)
C(24)	9591(11)	7651(9)	1355(5)	68(3)
C(25)	9510(12)	7652(11)	747(6)	80(4)
C(26)	9930(14)	7002(13)	385(7)	98(5)
C(27)	10463(13)	6334(11)	609(6)	88(4)
C(28)	9922(16)	9411(12)	1757(9)	139(7)
C(29)	9174(14)	8402(10)	1748(6)	83(4)
C(30)	7963(14)	8471(12)	1572(8)	114(6)
C(31)	9685(10)	6624(9)	2610(5)	49(3)
C(32)	11189(11)	7852(9)	3005(6)	70(4)
C(33)	11259(10)	7758(9)	2443(6)	67(3)
C(34)	11406(14)	5553(10)	4333(6)	97(5)

C(35)	11491(12)	6510(10)	4062(6)	77(4)
C(36)	12575(12)	7253(12)	4301(7)	104(5)
C(37)	10430(11)	6915(9)	4149(5)	61(3)
C(38)	9816(10)	7207(8)	3698(5)	59(3)
C(39)	8886(11)	7643(9)	3797(5)	69(4)
C(40)	8604(13)	7747(10)	4366(6)	85(4)
C(41)	9163(15)	7454(12)	4809(6)	98(5)
C(42)	10096(13)	7062(10)	4706(6)	83(4)
C(43)	7022(14)	7803(14)	3316(7)	121(6)
C(44)	8324(13)	8065(10)	3323(6)	81(4)
C(45)	8771(19)	9161(12)	3371(8)	137(8)
C(46)	3667(12)	1020(13)	4891(9)	188(10)
C(47)	3206(17)	230(15)	5183(6)	165(9)
C(48)	2128(18)	-329(10)	5008(8)	183(10)
C(49)	1511(12)	-97(13)	4542(9)	173(9)
C(50)	1972(17)	693(15)	4251(6)	204(11)
C(51)	3050(18)	1252(10)	4426(8)	154(8)
C(52)	4600(40)	1270(30)	5232(18)	303(19)
C(53)	4181(19)	9165(18)	1769(8)	249(15)
C(54)	3561(18)	9885(17)	1868(9)	178(9)
C(55)	3333(16)	10186(13)	2431(13)	233(15)
C(56)	3725(19)	9767(17)	2895(7)	197(11)
C(57)	4345(17)	9047(16)	2796(10)	203(11)
C(58)	4572(16)	8746(13)	2233(13)	234(14)
C(59)	2770(50)	10780(50)	2530(20)	440(30)
C(60)	3127(19)	863(19)	-12(9)	350(20)
C(61)	2260(30)	88(13)	85(12)	360(20)
C(62)	1380(20)	260(20)	420(13)	350(20)
C(63)	1370(20)	1200(30)	658(10)	360(20)
C(64)	2240(30)	1976(18)	560(10)	258(15)
C(65)	3120(20)	1808(15)	225(10)	204(11)
C(66)	3620(30)	480(40)	-559(13)	500(40)

Table 28. Bond lengths [Å] and angles [deg] for shelxl.

Th(1)-N(4)	2.197(10)
Th(1)-N(1)	2.369(10)
Th(1)-N(2)	2.395(8)
Th(1)-N(3)	2.418(8)
Th(1)-Si(6)	3.445(4)
Th(1)-Si(2)	3.448(4)
Si(1)-N(1)	1.738(10)
Si(1)-C(3)	1.863(17)
Si(1)-C(2)	1.873(16)
Si(1)-C(1)	1.884(18)
Si(2)-N(1)	1.718(10)
Si(2)-C(5)	1.871(13)
Si(2)-C(4)	1.877(14)
Si(2)-C(6)	1.894(14)
Si(3)-N(2)	1.728(10)
Si(3)-C(8)	1.827(13)
Si(3)-C(9)	1.851(15)
Si(3)-C(7)	1.856(14)
Si(4)-N(2)	1.731(10)
Si(4)-C(11)	1.862(16)
Si(4)-C(12)	1.866(17)
Si(4)-C(10)	1.875(14)
Si(5)-N(3)	1.706(9)
Si(5)-C(13)	1.888(16)
Si(5)-C(15)	1.891(14)
Si(5)-C(14)	1.902(14)
Si(6)-N(3)	1.737(10)
Si(6)-C(17)	1.853(13)
Si(6)-C(16)	1.866(15)
Si(6)-C(18)	1.866(15)
N(4)-C(31)	1.291(14)
N(5)-C(33)	1.362(14)
N(5)-C(31)	1.403(14)
N(5)-C(23)	1.439(14)
N(6)-C(32)	1.386(15)
N(6)-C(31)	1.414(14)
N(6)-C(38)	1.447(14)
C(1)-H(1A)	0.9800
C(1)-H(1B)	0.9800
C(1)-H(1C)	0.9800
C(2)-H(2A)	0.9800
C(2)-H(2B)	0.9800
C(2)-H(2C)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9800
C(3)-H(3B)	0.9800
C(3)-H(3C)	0.9800
C(4)-H(4A)	0.9800
C(4)-H(4B)	0.9800
C(4)-H(4C)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9800

C(5)-H(5B)	0.9800
C(5)-H(5C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9800
C(6)-H(6B)	0.9800
C(6)-H(6C)	0.9800
C(7)-H(7A)	0.9800
C(7)-H(7B)	0.9800
C(7)-H(7C)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9800
C(8)-H(8B)	0.9800
C(8)-H(8C)	0.9800
C(9)-H(9A)	0.9800
C(9)-H(9B)	0.9800
C(9)-H(9C)	0.9800
C(10)-H(10A)	0.9800
C(10)-H(10B)	0.9800
C(10)-H(10C)	0.9800
C(11)-H(11A)	0.9800
C(11)-H(11B)	0.9800
C(11)-H(11C)	0.9800
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800
C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-H(13A)	0.9800
C(13)-H(13B)	0.9800
C(13)-H(13C)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800
C(14)-H(14C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(15)-H(15C)	0.9800
C(16)-H(16A)	0.9800
C(16)-H(16B)	0.9800
C(16)-H(16C)	0.9800
C(17)-H(17A)	0.9800
C(17)-H(17B)	0.9800
C(17)-H(17C)	0.9800
C(18)-H(18A)	0.9800
C(18)-H(18B)	0.9800
C(18)-H(18C)	0.9800
C(19)-C(20)	1.54(2)
C(19)-H(19A)	0.9800
C(19)-H(19B)	0.9800
C(19)-H(19C)	0.9800
C(20)-C(21)	1.49(2)
C(20)-C(22)	1.494(18)
C(20)-H(20)	1.0000
C(21)-H(21A)	0.9800
C(21)-H(21B)	0.9800
C(21)-H(21C)	0.9800
C(22)-C(27)	1.406(17)

C(22)-C(23)	1.427(17)
C(23)-C(24)	1.384(16)
C(24)-C(25)	1.409(17)
C(24)-C(29)	1.510(17)
C(25)-C(26)	1.373(19)
C(25)-H(25)	0.9500
C(26)-C(27)	1.378(19)
C(26)-H(26)	0.9500
C(27)-H(27)	0.9500
C(28)-C(29)	1.51(2)
C(28)-H(28A)	0.9800
C(28)-H(28B)	0.9800
C(28)-H(28C)	0.9800
C(29)-C(30)	1.53(2)
C(29)-H(29)	1.0000
C(30)-H(30A)	0.9800
C(30)-H(30B)	0.9800
C(30)-H(30C)	0.9800
C(32)-C(33)	1.305(16)
C(32)-H(32)	0.9500
C(33)-H(33)	0.9500
C(34)-C(35)	1.532(18)
C(34)-H(34A)	0.9800
C(34)-H(34B)	0.9800
C(34)-H(34C)	0.9800
C(35)-C(37)	1.523(17)
C(35)-C(36)	1.535(19)
C(35)-H(35)	1.0000
C(36)-H(36A)	0.9800
C(36)-H(36B)	0.9800
C(36)-H(36C)	0.9800
C(37)-C(42)	1.379(16)
C(37)-C(38)	1.401(15)
C(38)-C(39)	1.408(16)
C(39)-C(40)	1.379(17)
C(39)-C(44)	1.504(17)
C(40)-C(41)	1.350(18)
C(40)-H(40)	0.9500
C(41)-C(42)	1.377(19)
C(41)-H(41)	0.9500
C(42)-H(42)	0.9500
C(43)-C(44)	1.54(2)
C(43)-H(43A)	0.9800
C(43)-H(43B)	0.9800
C(43)-H(43C)	0.9800
C(44)-C(45)	1.51(2)
C(44)-H(44)	1.0000
C(45)-H(45A)	0.9800
C(45)-H(45B)	0.9800
C(45)-H(45C)	0.9800
C(46)-C(52)	1.31(4)
C(46)-C(47)	1.3900

C(46)-C(51)	1.3900
C(47)-C(48)	1.3900
C(47)-C(52)	1.98(5)
C(48)-C(49)	1.3900
C(49)-C(50)	1.3900
C(50)-C(51)	1.3900
C(53)-C(54)	1.3900
C(53)-C(58)	1.3900
C(54)-C(55)	1.3900
C(55)-C(59)	1.19(6)
C(55)-C(56)	1.3900
C(56)-C(57)	1.3900
C(57)-C(58)	1.3900
C(60)-C(61)	1.3900
C(60)-C(65)	1.3900
C(60)-C(66)	1.5215
C(61)-C(62)	1.3900
C(62)-C(63)	1.3900
C(63)-C(64)	1.3900
C(64)-C(65)	1.3900

N(4)-Th(1)-N(1)	105.2(3)
N(4)-Th(1)-N(2)	113.4(3)
N(1)-Th(1)-N(2)	105.2(3)
N(4)-Th(1)-N(3)	114.4(3)
N(1)-Th(1)-N(3)	111.5(3)
N(2)-Th(1)-N(3)	106.8(3)
N(4)-Th(1)-Si(6)	101.8(2)
N(1)-Th(1)-Si(6)	139.3(2)
N(2)-Th(1)-Si(6)	91.0(3)
N(3)-Th(1)-Si(6)	28.1(2)
N(4)-Th(1)-Si(2)	89.6(2)
N(1)-Th(1)-Si(2)	27.0(2)
N(2)-Th(1)-Si(2)	132.2(3)
N(3)-Th(1)-Si(2)	99.6(2)
Si(6)-Th(1)-Si(2)	126.08(9)
N(1)-Si(1)-C(3)	112.6(7)
N(1)-Si(1)-C(2)	110.0(7)
C(3)-Si(1)-C(2)	109.9(9)
N(1)-Si(1)-C(1)	114.6(7)
C(3)-Si(1)-C(1)	105.1(9)
C(2)-Si(1)-C(1)	104.2(9)
N(1)-Si(2)-C(5)	106.7(6)
N(1)-Si(2)-C(4)	114.3(7)
C(5)-Si(2)-C(4)	106.8(7)
N(1)-Si(2)-C(6)	113.6(6)
C(5)-Si(2)-C(6)	109.0(7)
C(4)-Si(2)-C(6)	106.2(7)
N(1)-Si(2)-Th(1)	38.8(3)
C(5)-Si(2)-Th(1)	68.3(4)
C(4)-Si(2)-Th(1)	120.2(5)
C(6)-Si(2)-Th(1)	132.5(5)

N(2)-Si(3)-C(8)	109.4(5)
N(2)-Si(3)-C(9)	113.3(6)
C(8)-Si(3)-C(9)	107.1(7)
N(2)-Si(3)-C(7)	114.8(6)
C(8)-Si(3)-C(7)	107.2(8)
C(9)-Si(3)-C(7)	104.6(9)
N(2)-Si(4)-C(11)	114.9(7)
N(2)-Si(4)-C(12)	113.6(7)
C(11)-Si(4)-C(12)	104.8(9)
N(2)-Si(4)-C(10)	108.9(5)
C(11)-Si(4)-C(10)	107.0(8)
C(12)-Si(4)-C(10)	107.1(8)
N(3)-Si(5)-C(13)	112.2(6)
N(3)-Si(5)-C(15)	113.0(6)
C(13)-Si(5)-C(15)	107.9(7)
N(3)-Si(5)-C(14)	114.0(6)
C(13)-Si(5)-C(14)	104.0(7)
C(15)-Si(5)-C(14)	105.1(7)
N(3)-Si(6)-C(17)	108.1(5)
N(3)-Si(6)-C(16)	114.9(7)
C(17)-Si(6)-C(16)	105.6(6)
N(3)-Si(6)-C(18)	114.4(6)
C(17)-Si(6)-C(18)	108.5(7)
C(16)-Si(6)-C(18)	104.8(7)
N(3)-Si(6)-Th(1)	41.0(3)
C(17)-Si(6)-Th(1)	67.5(4)
C(16)-Si(6)-Th(1)	121.2(6)
C(18)-Si(6)-Th(1)	133.4(5)
Si(2)-N(1)-Si(1)	117.5(6)
Si(2)-N(1)-Th(1)	114.1(5)
Si(1)-N(1)-Th(1)	128.0(5)
Si(3)-N(2)-Si(4)	118.5(5)
Si(3)-N(2)-Th(1)	124.3(5)
Si(4)-N(2)-Th(1)	117.1(5)
Si(5)-N(3)-Si(6)	117.3(5)
Si(5)-N(3)-Th(1)	131.7(5)
Si(6)-N(3)-Th(1)	110.9(4)
C(31)-N(4)-Th(1)	170.7(7)
C(33)-N(5)-C(31)	111.5(10)
C(33)-N(5)-C(23)	118.4(10)
C(31)-N(5)-C(23)	128.4(10)
C(32)-N(6)-C(31)	111.0(10)
C(32)-N(6)-C(38)	120.8(10)
C(31)-N(6)-C(38)	127.1(10)
Si(1)-C(1)-H(1A)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1B)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5
Si(1)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1A)-C(1)-H(1C)	109.5
H(1B)-C(1)-H(1C)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2A)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2B)	109.5

H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
Si(1)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3A)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
Si(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4A)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4B)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
Si(2)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5A)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5B)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5B)	109.5
Si(2)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.5
H(5B)-C(5)-H(5C)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6A)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6B)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5
Si(2)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7A)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7B)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
Si(3)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8A)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8B)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
Si(3)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9A)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9B)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
Si(3)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10A)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10B)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
Si(4)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5

Si(4)-C(11)-H(11A)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11B)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
Si(4)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12A)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
Si(4)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13A)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
Si(5)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14A)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
Si(5)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15A)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
Si(5)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16A)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16B)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
Si(6)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17A)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
Si(6)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18A)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18B)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
Si(6)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
C(20)-C(19)-H(19A)	109.5
C(20)-C(19)-H(19B)	109.5
H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5
C(20)-C(19)-H(19C)	109.5

H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5
H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5
C(21)-C(20)-C(22)	115.0(15)
C(21)-C(20)-C(19)	108.1(14)
C(22)-C(20)-C(19)	109.6(14)
C(21)-C(20)-H(20)	108.0
C(22)-C(20)-H(20)	108.0
C(19)-C(20)-H(20)	108.0
C(20)-C(21)-H(21A)	109.5
C(20)-C(21)-H(21B)	109.5
H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
C(20)-C(21)-H(21C)	109.5
H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5
C(27)-C(22)-C(23)	117.0(12)
C(27)-C(22)-C(20)	120.9(12)
C(23)-C(22)-C(20)	121.9(11)
C(24)-C(23)-C(22)	122.4(11)
C(24)-C(23)-N(5)	119.2(11)
C(22)-C(23)-N(5)	117.8(11)
C(23)-C(24)-C(25)	117.5(12)
C(23)-C(24)-C(29)	121.5(12)
C(25)-C(24)-C(29)	120.8(12)
C(26)-C(25)-C(24)	121.5(13)
C(26)-C(25)-H(25)	119.2
C(24)-C(25)-H(25)	119.2
C(25)-C(26)-C(27)	120.5(14)
C(25)-C(26)-H(26)	119.8
C(27)-C(26)-H(26)	119.8
C(26)-C(27)-C(22)	121.1(13)
C(26)-C(27)-H(27)	119.5
C(22)-C(27)-H(27)	119.5
C(29)-C(28)-H(28A)	109.5
C(29)-C(28)-H(28B)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
C(29)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(24)-C(29)-C(28)	111.8(13)
C(24)-C(29)-C(30)	112.8(13)
C(28)-C(29)-C(30)	107.5(13)
C(24)-C(29)-H(29)	108.2
C(28)-C(29)-H(29)	108.2
C(30)-C(29)-H(29)	108.2
C(29)-C(30)-H(30A)	109.5
C(29)-C(30)-H(30B)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30B)	109.5
C(29)-C(30)-H(30C)	109.5
H(30A)-C(30)-H(30C)	109.5
H(30B)-C(30)-H(30C)	109.5
N(4)-C(31)-N(5)	131.5(10)
N(4)-C(31)-N(6)	127.6(10)

N(5)-C(31)-N(6)	100.8(10)
C(33)-C(32)-N(6)	107.4(11)
C(33)-C(32)-H(32)	126.3
N(6)-C(32)-H(32)	126.3
C(32)-C(33)-N(5)	109.3(11)
C(32)-C(33)-H(33)	125.4
N(5)-C(33)-H(33)	125.4
C(35)-C(34)-H(34A)	109.5
C(35)-C(34)-H(34B)	109.5
H(34A)-C(34)-H(34B)	109.5
C(35)-C(34)-H(34C)	109.5
H(34A)-C(34)-H(34C)	109.5
H(34B)-C(34)-H(34C)	109.5
C(37)-C(35)-C(34)	111.0(12)
C(37)-C(35)-C(36)	112.0(11)
C(34)-C(35)-C(36)	110.5(12)
C(37)-C(35)-H(35)	107.7
C(34)-C(35)-H(35)	107.7
C(36)-C(35)-H(35)	107.7
C(35)-C(36)-H(36A)	109.5
C(35)-C(36)-H(36B)	109.5
H(36A)-C(36)-H(36B)	109.5
C(35)-C(36)-H(36C)	109.5
H(36A)-C(36)-H(36C)	109.5
H(36B)-C(36)-H(36C)	109.5
C(42)-C(37)-C(38)	118.0(12)
C(42)-C(37)-C(35)	118.5(12)
C(38)-C(37)-C(35)	123.3(11)
C(37)-C(38)-C(39)	122.1(11)
C(37)-C(38)-N(6)	118.6(10)
C(39)-C(38)-N(6)	118.7(10)
C(40)-C(39)-C(38)	115.7(12)
C(40)-C(39)-C(44)	122.4(12)
C(38)-C(39)-C(44)	121.6(11)
C(41)-C(40)-C(39)	123.6(14)
C(41)-C(40)-H(40)	118.2
C(39)-C(40)-H(40)	118.2
C(40)-C(41)-C(42)	119.8(14)
C(40)-C(41)-H(41)	120.1
C(42)-C(41)-H(41)	120.1
C(41)-C(42)-C(37)	120.7(13)
C(41)-C(42)-H(42)	119.7
C(37)-C(42)-H(42)	119.7
C(44)-C(43)-H(43A)	109.5
C(44)-C(43)-H(43B)	109.5
H(43A)-C(43)-H(43B)	109.5
C(44)-C(43)-H(43C)	109.5
H(43A)-C(43)-H(43C)	109.5
H(43B)-C(43)-H(43C)	109.5
C(39)-C(44)-C(45)	110.1(13)
C(39)-C(44)-C(43)	112.6(12)
C(45)-C(44)-C(43)	111.3(14)

C(39)-C(44)-H(44)	107.5
C(45)-C(44)-H(44)	107.5
C(43)-C(44)-H(44)	107.5
C(44)-C(45)-H(45A)	109.5
C(44)-C(45)-H(45B)	109.5
H(45A)-C(45)-H(45B)	109.5
C(44)-C(45)-H(45C)	109.5
H(45A)-C(45)-H(45C)	109.5
H(45B)-C(45)-H(45C)	109.5
C(52)-C(46)-C(47)	94(2)
C(52)-C(46)-C(51)	146(2)
C(47)-C(46)-C(51)	120.0
C(46)-C(47)-C(48)	120.0
C(46)-C(47)-C(52)	41.4(15)
C(48)-C(47)-C(52)	161.3(15)
C(49)-C(48)-C(47)	120.0
C(48)-C(49)-C(50)	120.0
C(51)-C(50)-C(49)	120.0
C(50)-C(51)-C(46)	120.0
C(46)-C(52)-C(47)	44.5(15)
C(54)-C(53)-C(58)	120.0
C(55)-C(54)-C(53)	120.0
C(59)-C(55)-C(54)	121(4)
C(59)-C(55)-C(56)	118(4)
C(54)-C(55)-C(56)	120.0
C(57)-C(56)-C(55)	120.0
C(56)-C(57)-C(58)	120.0
C(57)-C(58)-C(53)	120.0
C(61)-C(60)-C(65)	120.0
C(61)-C(60)-C(66)	103.5
C(65)-C(60)-C(66)	131.8
C(60)-C(61)-C(62)	120.0
C(63)-C(62)-C(61)	120.0
C(62)-C(63)-C(64)	120.0
C(63)-C(64)-C(65)	120.0
C(64)-C(65)-C(60)	120.0

Table 29. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Th(1)	50(1)	53(1)	51(1)	10(1)	9(1)	14(1)
Si(1)	84(3)	96(3)	73(3)	-16(2)	1(2)	22(2)
Si(2)	84(3)	78(3)	59(2)	14(2)	-4(2)	13(2)
Si(3)	63(2)	66(2)	84(3)	12(2)	3(2)	26(2)
Si(4)	78(3)	58(2)	130(4)	27(2)	9(3)	16(2)
Si(5)	57(2)	101(3)	83(3)	23(2)	18(2)	28(2)
Si(6)	67(2)	98(3)	61(2)	22(2)	19(2)	22(2)
N(1)	68(7)	60(6)	58(7)	1(5)	8(5)	7(5)
N(2)	55(6)	42(5)	87(8)	12(5)	-2(5)	15(5)
N(3)	41(5)	80(7)	55(6)	12(5)	14(5)	12(5)
N(4)	43(5)	67(6)	37(5)	4(4)	3(4)	13(5)
N(5)	49(6)	67(6)	40(6)	6(5)	6(5)	1(5)
N(6)	62(6)	66(6)	45(6)	4(5)	6(5)	13(5)
C(1)	190(20)	175(19)	71(12)	-39(12)	4(12)	63(17)
C(2)	114(14)	173(19)	104(14)	-33(13)	-3(11)	57(14)
C(3)	126(15)	94(12)	133(16)	-21(11)	-14(12)	14(11)
C(4)	123(14)	106(12)	72(11)	24(9)	8(9)	-12(10)
C(5)	105(12)	73(9)	70(10)	8(7)	0(8)	14(8)
C(6)	103(12)	129(14)	80(11)	12(10)	-27(9)	43(11)
C(7)	97(13)	133(15)	174(19)	-57(13)	-13(12)	67(12)
C(8)	53(8)	95(10)	106(12)	32(9)	24(8)	19(8)
C(9)	93(12)	132(15)	146(17)	67(13)	-20(11)	19(11)
C(10)	65(9)	71(10)	162(17)	21(10)	4(10)	-2(8)
C(11)	102(13)	54(9)	230(20)	-15(12)	6(14)	13(9)
C(12)	112(14)	132(15)	190(20)	106(15)	39(13)	28(12)
C(13)	65(9)	108(12)	110(13)	27(10)	-2(9)	7(9)
C(14)	63(10)	170(17)	99(12)	44(12)	18(9)	31(10)
C(15)	75(10)	111(12)	118(14)	6(10)	11(9)	36(9)
C(16)	69(10)	168(16)	91(12)	65(11)	16(8)	18(10)
C(17)	76(9)	72(9)	74(10)	20(7)	13(7)	7(7)
C(18)	103(12)	140(14)	66(10)	5(9)	25(9)	37(11)
C(19)	141(19)	190(20)	146(19)	-16(16)	-26(15)	95(18)
C(20)	129(14)	98(11)	69(10)	18(9)	36(10)	57(11)
C(21)	200(20)	107(14)	139(18)	9(13)	61(16)	58(15)
C(22)	76(9)	97(10)	47(8)	19(7)	13(7)	22(8)
C(23)	59(8)	66(8)	52(8)	3(6)	15(6)	2(7)
C(24)	75(9)	68(8)	58(9)	10(7)	6(7)	12(7)
C(25)	88(10)	97(11)	59(10)	31(8)	-5(8)	22(9)
C(26)	111(13)	130(14)	52(10)	19(10)	9(9)	23(11)
C(27)	119(13)	93(11)	61(10)	10(8)	30(9)	37(10)
C(28)	128(16)	85(13)	200(20)	-3(13)	0(15)	15(12)
C(29)	113(13)	76(10)	64(9)	7(7)	15(8)	28(9)
C(30)	105(14)	101(13)	142(16)	14(11)	14(12)	36(11)
C(31)	49(7)	62(7)	41(7)	2(6)	2(6)	23(6)
C(32)	68(9)	63(8)	67(10)	0(7)	-3(7)	-7(7)
C(33)	56(8)	68(8)	64(10)	7(7)	8(7)	-14(7)
C(34)	124(13)	95(11)	85(11)	16(9)	-9(9)	52(10)

C(35)	82(10)	91(10)	57(9)	-3(7)	-13(7)	28(9)
C(36)	80(11)	125(14)	100(13)	-14(10)	-22(9)	27(10)
C(37)	73(9)	74(8)	37(7)	-1(6)	3(6)	17(7)
C(38)	64(8)	62(8)	52(8)	11(6)	2(6)	13(7)
C(39)	83(10)	77(9)	50(8)	-2(7)	0(7)	26(8)
C(40)	107(12)	94(11)	67(10)	6(8)	23(9)	50(9)
C(41)	129(14)	120(13)	50(9)	8(9)	3(9)	42(12)
C(42)	106(12)	98(11)	46(9)	2(7)	-4(8)	31(10)
C(43)	109(14)	162(18)	104(14)	13(12)	-7(11)	61(13)
C(44)	111(12)	77(10)	62(9)	5(7)	16(8)	36(9)
C(45)	230(20)	89(12)	112(15)	27(11)	-7(14)	73(14)

Table 30. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelxl.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	6872	2803	35	218
H(1B)	7460	3930	215	218
H(1C)	6106	3585	173	218
H(2A)	8304	2271	919	196
H(2B)	8339	2673	1592	196
H(2C)	8884	3388	1137	196
H(3A)	5769	1568	835	184
H(3B)	4958	2290	1025	184
H(3C)	5704	1921	1507	184
H(4A)	6820	6273	606	157
H(4B)	7240	5294	409	157
H(4C)	7927	6057	927	157
H(5A)	5932	6579	1771	126
H(5B)	6991	6284	2091	126
H(5C)	5725	5732	2190	126
H(6A)	4544	5239	758	154
H(6B)	4261	4405	1182	154
H(6C)	4800	4184	579	154
H(7A)	11044	2400	2464	202
H(7B)	10121	2486	1966	202
H(7C)	9826	1666	2398	202
H(8A)	11309	4444	2874	123
H(8B)	10275	4899	3092	123
H(8C)	10355	4599	2414	123
H(9A)	10865	2930	3647	182
H(9B)	9628	2244	3653	182
H(9C)	9848	3377	3897	182
H(10A)	5249	1702	2715	152
H(10B)	5720	2491	2286	152
H(10C)	5679	2829	2963	152
H(11A)	6830	460	2379	200
H(11B)	8164	897	2371	200
H(11C)	7297	1172	1907	200
H(12A)	6787	1082	3562	205
H(12B)	7196	2194	3843	205
H(12C)	8112	1581	3642	205
H(13A)	3223	3886	2238	143
H(13B)	4166	3246	2274	143
H(13C)	4442	4259	1998	143
H(14A)	2851	3858	3454	161
H(14B)	3856	4182	3955	161
H(14C)	3761	3196	3529	161
H(15A)	3373	5728	3006	149
H(15B)	4595	6202	2801	149
H(15C)	4414	6156	3478	149
H(16A)	6331	3799	4682	160
H(16B)	6243	3110	4082	160

H(16C)	5173	3534	4278	160
H(17A)	8374	5019	4324	111
H(17B)	8389	5548	3745	111
H(17C)	8277	4391	3702	111
H(18A)	6450	5821	4759	152
H(18B)	5306	5709	4358	152
H(18C)	6450	6420	4209	152
H(19A)	13008	5771	1682	231
H(19B)	12646	6802	1778	231
H(19C)	12808	6339	1137	231
H(20)	11044	5544	1853	111
H(21A)	11675	4321	1303	215
H(21B)	11449	4791	721	215
H(21C)	10405	4331	1080	215
H(25)	9156	8115	585	96
H(26)	9853	7012	-23	117
H(27)	10746	5887	353	106
H(28A)	9629	9877	2018	209
H(28B)	9923	9608	1364	209
H(28C)	10698	9401	1895	209
H(29)	9191	8211	2151	100
H(30A)	7732	8962	1843	171
H(30B)	7449	7835	1583	171
H(30C)	7930	8660	1178	171
H(32)	11694	8303	3281	84
H(33)	11834	8130	2241	80
H(34A)	10702	5092	4181	146
H(34B)	11404	5683	4756	146
H(34C)	12058	5271	4235	146
H(35)	11543	6362	3635	92
H(36A)	13238	6972	4227	156
H(36B)	12545	7413	4720	156
H(36C)	12635	7848	4109	156
H(40)	7983	8042	4451	102
H(41)	8912	7518	5190	117
H(42)	10514	6892	5021	100
H(43A)	6698	8098	3002	181
H(43B)	6782	8053	3689	181
H(43C)	6755	7091	3253	181
H(44)	8542	7778	2944	97
H(45A)	8410	9428	3057	205
H(45B)	9595	9303	3341	205
H(45C)	8597	9461	3746	205