

Table Captions:

Table 1. Crystal data and structure refinement for complex 1.

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for complex 1.

Table 3. Bond lengths ($\text{\AA}$) and angles (deg) for complex 1.

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for complex 1.

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for complex 1.

Table 6. Crystal data and structure refinement for complex 2.

Table 7. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for complex 2.

Table 8. Bond lengths ($\text{\AA}$) and angles (deg) for complex 2.

Table 9. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for complex 2.

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

Table 11. Crystal data and structure refinement for compound 3.

Table 12. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for compound 3.

Table 13. Bond lengths ($\text{\AA}$) and angles (deg) for compound 3.

Table 14. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for compound 3.

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

Figure Captions:

Figure 1S. ^{13}C -NMR of the elastomeric polypropylene obtained in entry 4 of Table 5 in the manuscript.

Figure 2S. ^{13}C -NMR of the elastomeric polypropylene obtained in entry 2 of Table 5 in the manuscript.

Figure 3S. DSC thermogram showing the second run for the polypropylene obtained in entry 3 of Table 5 in the manuscript.

Figure 4S. ^{13}C -NMR of the polyethylene obtained in entry 1 of Table 6 in the manuscript.

Figure 5S. DSC thermogram showing the second run for the polyethylene obtained in entry 1 of Table 6 in the manuscript.

CIF file for both complexes 45 pages

Table 1. Crystal data and structure refinement for zrallyl. (Complex 1)

Identification code	zrallyl
Empirical formula	C ₃₆ H ₈₂ Cl ₂ Li N ₂ Si ₄ Zr
Formula weight	824.46
Temperature	230(2) K
Wavelength	0.71070 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P2 ₁ /n
Unit cell dimensions	a = 17.9150(7) Å alpha = 90 deg. b = 13.9800(6) Å beta = 98.168(2) deg. c = 20.3530(12) Å gamma = 90 deg.
Volume	5045.7(4) Å ³
Z, Calculated density	4, 1.085 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.442 mm ⁻¹
F(000)	1780
Crystal size	0.1 x 0.14 x 0.18 mm
Theta range for data collection	1.42 to 27.50 deg.
Limiting indices	0 ≤ h ≤ 22, 0 ≤ k ≤ 17, -26 ≤ l ≤ 26
Reflections collected / unique	10315 / 10315 [R(int) = 0.0000]
Completeness to theta = 27.50	89.0 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	10315 / 0 / 497
Goodness-of-fit on F ²	0.828
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R ₁ = 0.0465, wR ₂ = 0.1169
R indices (all data)	R ₁ = 0.1374, wR ₂ = 0.1337
Largest diff. peak and hole	0.304 and -0.487 e.Å ⁻³

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{Zrallyl}(\text{complex } 1)$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Zr	7292(1)	3126(1)	9446(1)	38(1)
Cl(1)	8006(1)	2397(1)	8570(1)	54(1)
Cl(2)	8620(1)	3628(1)	9965(1)	53(1)
Si(1)	5580(1)	2592(1)	8076(1)	45(1)
Si(2)	7248(1)	5595(1)	8910(1)	53(1)
Si(4)	6869(1)	3876(1)	11201(1)	56(1)
Si(3)	7279(1)	624(1)	9946(1)	58(1)
Li	9155(5)	2935(6)	9096(5)	60(2)
C(1)	4721(4)	2366(4)	6811(3)	78(2)
C(2)	4651(4)	3968(4)	7325(4)	84(2)
C(3)	5806(4)	3456(5)	6862(3)	87(2)
C(4)	5181(3)	3120(4)	7239(2)	51(1)
C(5)	4810(3)	2385(5)	8587(3)	68(2)
C(6)	6018(4)	1410(4)	7919(4)	86(2)
C(7)	6281(2)	3427(3)	8508(2)	37(1)
C(8)	6177(2)	4033(3)	9031(2)	42(1)
C(9)	6758(2)	4673(3)	9336(2)	38(1)
C(10)	7999(3)	6142(4)	9526(4)	84(2)
C(11)	7691(4)	5121(5)	8199(3)	90(2)
C(12)	6542(3)	6585(3)	8592(3)	59(2)
C(13)	6107(3)	6897(4)	9151(3)	74(2)
C(14)	6963(4)	7464(4)	8368(4)	87(2)
C(15)	5996(4)	6192(4)	8017(3)	84(2)
C(16)	6439(6)	131(5)	10967(4)	117(3)
C(17)	7167(4)	-1187(4)	10536(4)	99(2)
C(18)	6016(3)	-544(5)	9882(5)	100(3)
C(19)	6703(4)	-279(4)	10362(3)	74(2)
C(20)	8174(3)	879(5)	10523(4)	97(2)
C(21)	7550(4)	64(4)	9189(3)	79(2)
C(22)	6699(2)	1704(3)	9738(2)	46(1)
C(23)	6518(2)	2435(3)	10190(2)	45(1)
C(24)	7068(2)	2943(3)	10593(2)	42(1)
C(25)	5928(3)	4424(5)	10951(3)	80(2)
C(26)	7600(4)	4817(5)	11280(4)	97(2)
C(27)	6865(3)	3296(5)	12051(3)	77(2)
C(28)	6685(6)	4047(7)	12558(4)	113(3)
C(29)	7643(5)	2847(8)	12289(4)	145(4)
C(30)	6279(5)	2529(6)	12001(4)	113(3)
C(31)	9981(5)	4784(5)	8921(4)	100(2)
C(32)	9715(3)	3842(5)	7974(3)	82(2)
N(33)	9912(2)	3787(3)	8680(2)	51(1)
C(34)	10616(3)	3269(5)	8858(4)	82(2)
C(35)	10543(4)	2248(5)	8863(5)	93(2)
N(36)	9989(2)	1912(3)	9272(2)	54(1)
C(37)	9752(4)	934(4)	9058(5)	99(2)
C(38)	10296(4)	1886(5)	9958(3)	87(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for *zrallyl. (complex 1)*

Zr-C(9)	2.361(4)
Zr-C(22)	2.369(4)
Zr-C(23)	2.396(4)
Zr-C(8)	2.415(4)
Zr-C(24)	2.436(4)
Zr-C(7)	2.474(4)
Zr-Cl(1)	2.5515(13)
Zr-Cl(2)	2.5607(12)
Cl(1)-Li	2.306(9)
Cl(2)-Li	2.338(9)
Si(1)-C(7)	1.843(4)
Si(1)-C(5)	1.863(5)
Si(1)-C(6)	1.876(5)
Si(1)-C(4)	1.902(5)
Si(2)-C(9)	1.843(4)
Si(2)-C(10)	1.868(5)
Si(2)-C(11)	1.868(6)
Si(2)-C(12)	1.924(5)
Si(4)-C(26)	1.847(6)
Si(4)-C(25)	1.857(5)
Si(4)-C(24)	1.867(4)
Si(4)-C(27)	1.911(6)
Si(3)-C(22)	1.848(5)
Si(3)-C(21)	1.854(6)
Si(3)-C(20)	1.881(6)
Si(3)-C(19)	1.902(6)
Li-N(36)	2.062(9)
Li-N(33)	2.075(9)
C(1)-C(4)	1.530(6)
C(2)-C(4)	1.545(7)
C(3)-C(4)	1.518(7)
C(7)-C(8)	1.393(6)
C(8)-C(9)	1.444(6)
C(12)-C(15)	1.517(7)
C(12)-C(13)	1.531(7)
C(12)-C(14)	1.543(7)
C(16)-C(19)	1.495(8)
C(17)-C(19)	1.531(7)
C(18)-C(19)	1.506(8)
C(22)-C(23)	1.442(6)
C(23)-C(24)	1.385(6)
C(27)-C(30)	1.494(8)
C(27)-C(28)	1.537(8)
C(27)-C(29)	1.543(8)
C(31)-N(33)	1.477(6)
C(32)-N(33)	1.432(7)
N(33)-C(34)	1.454(6)
C(34)-C(35)	1.433(8)
C(35)-N(36)	1.460(6)
N(36)-C(38)	1.427(6)
N(36)-C(37)	1.479(7)

C(9)-Zr-C(22)	127.06(15)
C(9)-Zr-C(23)	99.61(15)
C(22)-Zr-C(8)	98.68(15)
C(23)-Zr-C(8)	84.79(15)
C(9)-Zr-C(24)	93.89(15)
C(22)-Zr-C(24)	62.06(15)
C(23)-Zr-C(24)	98.63(16)

C(22)-Zr-C(7)	91.78(15)
C(23)-Zr-C(7)	97.48(15)
C(24)-Zr-C(7)	123.71(15)
C(9)-Zr-Cl(1)	122.39(11)
C(22)-Zr-Cl(1)	97.29(12)
C(23)-Zr-Cl(1)	132.29(12)
C(8)-Zr-Cl(1)	115.91(12)
C(24)-Zr-Cl(1)	142.65(11)
C(7)-Zr-Cl(1)	85.01(11)
C(9)-Zr-Cl(2)	97.35(11)
C(22)-Zr-Cl(2)	123.38(12)
C(23)-Zr-Cl(2)	115.95(12)
C(8)-Zr-Cl(2)	132.39(12)
C(24)-Zr-Cl(2)	84.49(11)
C(7)-Zr-Cl(2)	143.82(10)
Cl(1)-Zr-Cl(2)	82.45(4)
C(9)-Zr-Li	115.63(17)
C(22)-Zr-Li	117.28(18)
C(23)-Zr-Li	138.37(17)
C(8)-Zr-Li	136.84(17)
C(24)-Zr-Li	118.42(19)
C(7)-Zr-Li	117.87(18)
Li-Cl(1)-Zr	92.8(2)
Li-Cl(2)-Zr	91.8(2)
C(7)-Si(1)-C(5)	109.9(2)
C(7)-Si(1)-C(6)	111.5(3)
C(5)-Si(1)-C(6)	108.6(3)
C(7)-Si(1)-C(4)	109.0(2)
C(5)-Si(1)-C(4)	110.2(3)
C(6)-Si(1)-C(4)	107.6(3)
C(9)-Si(2)-C(10)	108.4(3)
C(9)-Si(2)-C(11)	113.5(2)
C(10)-Si(2)-C(11)	108.6(4)
C(9)-Si(2)-C(12)	109.2(2)
C(10)-Si(2)-C(12)	108.0(3)
C(11)-Si(2)-C(12)	109.0(3)
C(26)-Si(4)-C(25)	109.6(4)
C(26)-Si(4)-C(24)	110.8(3)
C(25)-Si(4)-C(24)	111.0(3)
C(26)-Si(4)-C(27)	108.5(3)
C(25)-Si(4)-C(27)	107.6(3)
C(24)-Si(4)-C(27)	109.3(3)
C(22)-Si(3)-C(21)	111.0(2)
C(22)-Si(3)-C(20)	112.9(2)
C(21)-Si(3)-C(20)	107.3(4)
C(22)-Si(3)-C(19)	108.7(2)
C(21)-Si(3)-C(19)	108.2(3)
C(20)-Si(3)-C(19)	108.4(3)
N(36)-Li-N(33)	88.2(4)
N(36)-Li-Cl(1)	115.5(4)
N(33)-Li-Cl(1)	126.2(4)
N(36)-Li-Cl(2)	121.4(4)
N(33)-Li-Cl(2)	115.6(4)
Cl(1)-Li-Cl(2)	93.0(3)
C(3)-C(4)-C(1)	107.5(5)
C(3)-C(4)-C(2)	109.2(5)
C(1)-C(4)-C(2)	107.7(5)
C(3)-C(4)-Si(1)	111.2(4)
C(1)-C(4)-Si(1)	110.2(4)
C(2)-C(4)-Si(1)	110.8(4)
C(8)-C(7)-Si(1)	126.4(3)
Si(1)-C(7)-Zr	129.4(2)
C(7)-C(8)-C(9)	122.6(4)

Si(2)-C(9)-Zr	118.2(2)
C(15)-C(12)-C(13)	109.6(5)
C(15)-C(12)-C(14)	110.5(5)
C(13)-C(12)-C(14)	108.3(5)
C(15)-C(12)-Si(2)	108.7(4)
C(13)-C(12)-Si(2)	109.5(4)
C(14)-C(12)-Si(2)	110.3(4)
C(16)-C(19)-C(18)	107.7(7)
C(16)-C(19)-C(17)	110.6(6)
C(18)-C(19)-C(17)	108.2(6)
C(16)-C(19)-Si(3)	111.6(5)
C(18)-C(19)-Si(3)	108.6(5)
C(17)-C(19)-Si(3)	110.1(4)
C(23)-C(22)-Si(3)	127.1(4)
Si(3)-C(22)-Zr	119.1(2)
C(24)-C(23)-C(22)	122.4(4)
C(23)-C(24)-Si(4)	124.4(3)
Si(4)-C(24)-Zr	129.4(2)
C(30)-C(27)-C(28)	108.9(7)
C(30)-C(27)-C(29)	109.0(8)
C(28)-C(27)-C(29)	109.5(6)
C(30)-C(27)-Si(4)	109.6(5)
C(28)-C(27)-Si(4)	110.3(5)
C(29)-C(27)-Si(4)	109.7(5)
C(32)-N(33)-C(34)	111.0(5)
C(32)-N(33)-C(31)	106.3(5)
C(34)-N(33)-C(31)	111.1(5)
C(32)-N(33)-Li	110.9(4)
C(34)-N(33)-Li	101.9(4)
C(31)-N(33)-Li	115.8(4)
C(35)-C(34)-N(33)	114.9(5)
C(34)-C(35)-N(36)	113.2(6)
C(38)-N(36)-C(35)	111.5(5)
C(38)-N(36)-C(37)	108.6(5)
C(35)-N(36)-C(37)	108.6(6)
C(38)-N(36)-Li	110.9(4)
C(35)-N(36)-Li	102.3(4)
C(37)-N(36)-Li	114.8(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for zrally1. (complex 1)
 The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

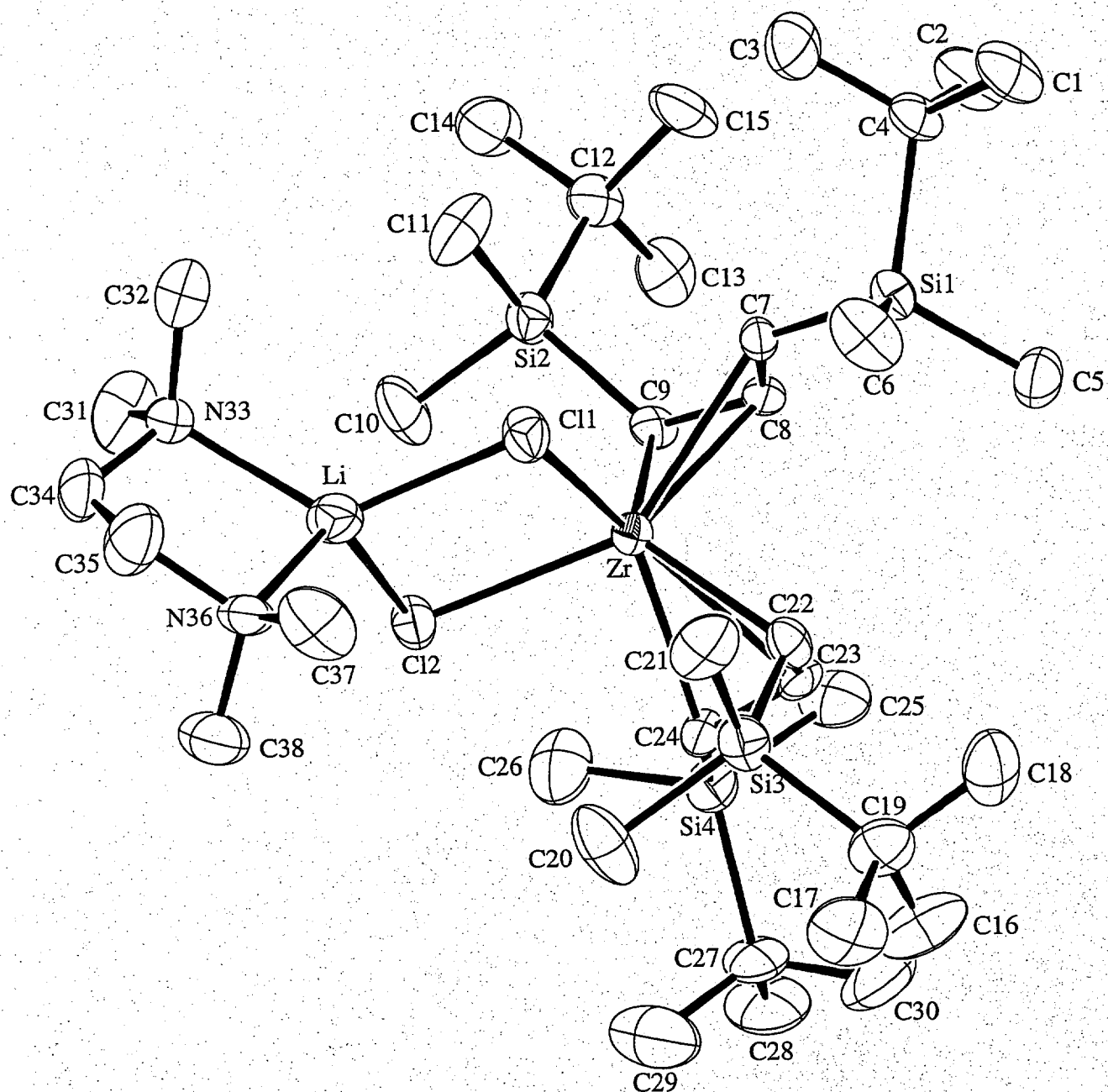
	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Zr	35(1)	43(1)	37(1)	1(1)	6(1)	0(1)
Cl(1)	42(1)	70(1)	51(1)	-11(1)	11(1)	1(1)
Cl(2)	39(1)	72(1)	49(1)	-9(1)	7(1)	-5(1)
Si(1)	39(1)	47(1)	45(1)	-6(1)	-1(1)	-2(1)
Si(2)	47(1)	49(1)	60(1)	6(1)	-1(1)	-9(1)
Si(4)	52(1)	72(1)	47(1)	-6(1)	16(1)	2(1)
Si(3)	52(1)	43(1)	75(1)	5(1)	1(1)	3(1)
Li	57(5)	68(6)	55(6)	11(5)	11(4)	12(4)
C(1)	86(5)	70(4)	66(5)	-22(4)	-29(4)	-13(4)
C(2)	87(5)	69(4)	85(6)	-5(4)	-23(4)	4(4)
C(3)	79(4)	111(6)	68(5)	-18(4)	3(4)	-40(5)
C(4)	55(3)	57(3)	38(3)	-9(3)	-11(2)	-5(3)
C(5)	58(3)	82(4)	65(5)	-5(4)	14(3)	-23(4)
C(6)	86(5)	65(4)	101(6)	-23(4)	-10(5)	18(4)
C(7)	28(2)	45(3)	37(3)	-2(2)	5(2)	-3(2)
C(8)	35(3)	45(3)	45(3)	19(3)	2(2)	6(2)
C(9)	48(3)	35(3)	27(3)	-11(2)	-2(2)	-6(2)
C(10)	62(4)	57(4)	120(6)	12(4)	-35(4)	-18(3)
C(11)	104(5)	78(4)	97(6)	0(4)	50(5)	-28(5)
C(12)	71(4)	43(3)	56(4)	-5(3)	-8(3)	-15(3)
C(13)	77(4)	47(3)	92(5)	-15(4)	-1(4)	-12(4)
C(14)	99(5)	65(4)	89(6)	19(4)	-13(5)	-22(4)
C(15)	85(4)	69(4)	83(6)	22(4)	-38(4)	1(4)
C(16)	180(9)	80(5)	104(7)	32(5)	58(8)	-1(7)
C(17)	134(6)	43(4)	115(7)	11(4)	3(6)	4(4)
C(18)	66(4)	65(4)	166(8)	42(5)	9(5)	-3(4)
C(19)	90(5)	53(4)	82(5)	15(3)	17(4)	8(3)
C(20)	68(4)	65(4)	146(8)	-13(5)	-32(4)	18(4)
C(21)	93(4)	41(3)	108(6)	19(4)	37(4)	21(3)
C(22)	41(3)	43(3)	50(3)	-7(3)	-4(2)	-7(2)
C(23)	43(3)	46(3)	48(3)	23(3)	14(2)	-2(2)
C(24)	45(3)	47(3)	34(3)	-11(2)	12(2)	-14(2)
C(25)	92(5)	101(5)	52(5)	-6(4)	26(3)	28(4)
C(26)	94(6)	121(6)	82(6)	-33(5)	34(4)	-25(5)
C(27)	81(4)	123(6)	31(3)	8(4)	21(3)	11(4)
C(28)	136(7)	165(7)	42(5)	-11(5)	32(4)	23(7)
C(29)	110(7)	251(11)	79(7)	33(8)	31(5)	91(9)
C(30)	132(8)	139(7)	80(6)	25(6)	56(5)	-16(6)
C(31)	123(6)	94(5)	85(6)	-57(4)	25(5)	-64(5)
C(32)	69(5)	85(5)	95(6)	2(4)	24(4)	-14(4)
N(33)	44(3)	67(3)	43(3)	5(2)	5(2)	-1(2)
C(34)	40(3)	103(6)	105(6)	34(4)	16(4)	-1(3)
C(35)	67(4)	95(5)	124(7)	27(5)	38(4)	14(4)
N(36)	57(3)	65(3)	38(3)	11(2)	2(2)	12(2)
C(37)	104(6)	59(5)	126(8)	-2(4)	-13(6)	27(4)
C(38)	85(5)	116(6)	58(5)	7(5)	1(4)	18(5)

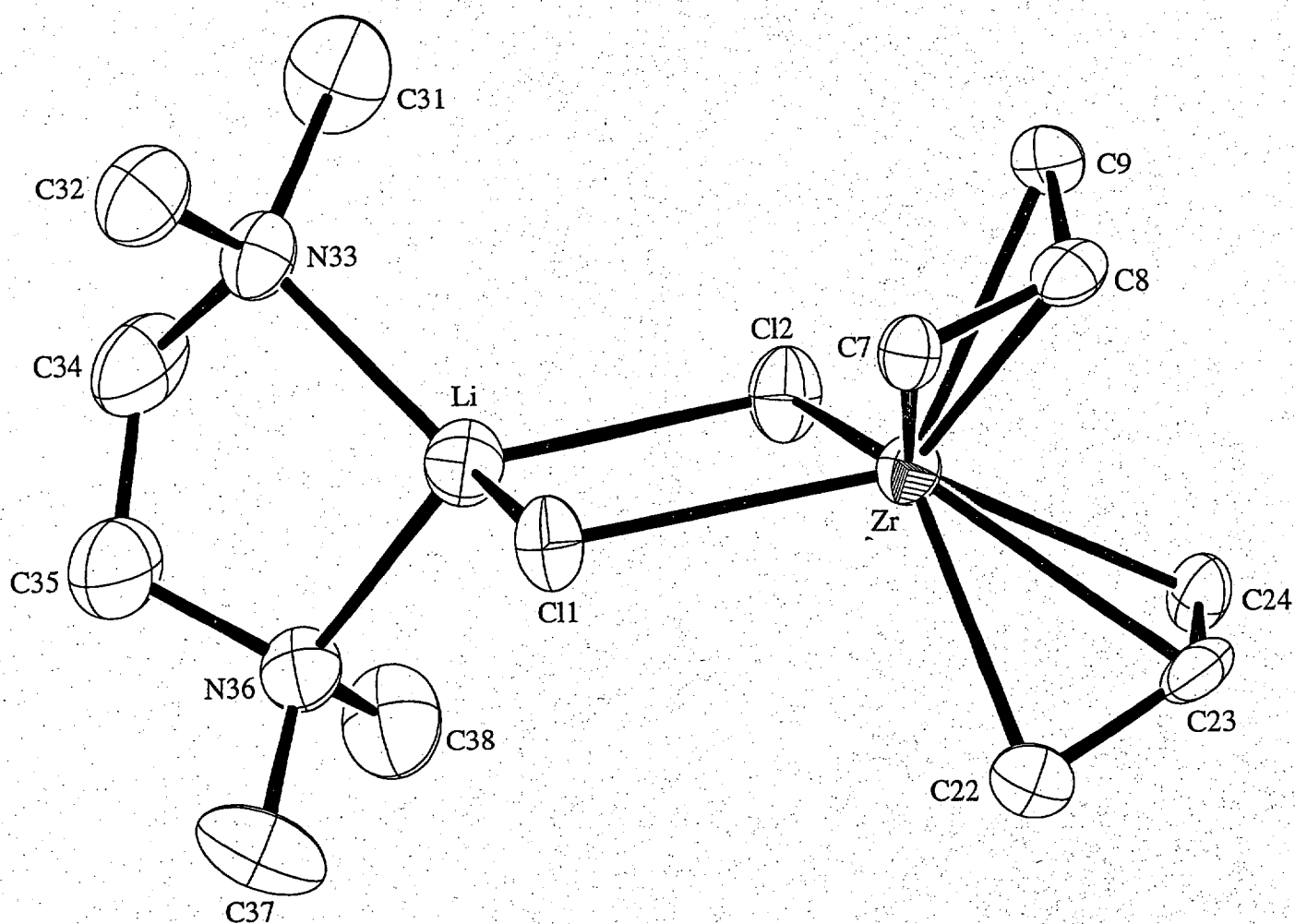
Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for *zrallyl*.

(complex 1)

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	4333	2121	7045	120(30)
H(1B)	5047	1853	6719	110(30)
H(1C)	4496	2651	6402	140(30)
H(2A)	4925	4454	7591	85(19)
H(2B)	4238	3750	7539	80(20)
H(2C)	4459	4228	6897	180(40)
H(3A)	6105	3930	7119	44(13)
H(3B)	5588	3727	6445	210(50)
H(3C)	6118	2922	6784	45(15)
H(5A)	4447	1949	8359	210(40)
H(5B)	4568	2982	8656	90(20)
H(5C)	5018	2117	9007	110(20)
H(6A)	5639	992	7695	220(50)
H(6B)	6230	1129	8335	160(40)
H(6C)	6408	1504	7648	120(30)
H(7)	6742	3552	8281	32(11)
H(8)	5742	3830	9366	47(12)
H(9)	6646	4927	9782	5(8)
H(10A)	8263	6620	9311	110(20)
H(10B)	8348	5655	9706	62(16)
H(10C)	7774	6430	9878	130(30)
H(11A)	7937	5634	8001	130(20)
H(11B)	7309	4847	7875	90(20)
H(11C)	8055	4640	8357	210(50)
H(13A)	6452	7153	9512	30(12)
H(13B)	5850	6355	9303	60(15)
H(13C)	5745	7378	8988	140(30)
H(14A)	7245	7279	8022	51(17)
H(14B)	7300	7709	8739	120(30)
H(14C)	6604	7949	8206	170(40)
H(15A)	6271	5986	7671	130(30)
H(15B)	5644	6683	7850	60(15)
H(15C)	5727	5659	8167	100(20)
H(16A)	6133	684	10846	120(30)
H(16B)	6867	310	11282	100(30)
H(16C)	6147	-339	11162	110(20)
H(17A)	7320	-1450	10141	70(20)
H(17B)	6865	-1647	10730	72(18)
H(17C)	7605	-1034	10847	130(30)
H(18A)	6170	-814	9489	160(40)
H(18B)	5717	17	9766	34(11)
H(18C)	5723	-1004	10084	140(30)
H(20A)	8453	296	10614	110(20)
H(20B)	8052	1142	10930	130(30)
H(20C)	8474	1329	10318	120(30)
H(21A)	7857	-488	9311	50(13)
H(21B)	7829	516	8965	90(19)
H(21C)	7104	-125	8899	300(60)
H(22)	6283	1477	9437	6(8)
H(23)	5898	2760	10009	72(15)
H(24)	7730	2796	10774	130(20)
H(25A)	5549	3934	10910	210(50)
H(25B)	5920	4743	10532	110(20)
			11281	100(20)

H(26B)	7610	5113	10856	100(30)
H(26C)	8084	4537	11431	80(20)
H(28A)	7067	4534	12603	150(40)
H(28B)	6673	3745	12980	290(60)
H(28C)	6203	4331	12408	530(130)
H(29A)	8022	3338	12332	170(40)
H(29B)	7757	2381	11972	90(20)
H(29C)	7636	2544	12711	170(40)
H(30A)	6386	2057	11685	170(40)
H(30B)	5791	2804	11858	120(30)
H(30C)	6281	2234	12427	200(40)
H(31A)	9508	5108	8805	280(60)
H(31B)	10364	5107	8721	130(30)
H(31C)	10115	4786	9395	73(18)
H(32A)	9245	4177	7869	100(20)
H(32B)	9664	3208	7792	77(19)
H(32C)	10102	4178	7787	31(11)
H(34A)	10956	3440	8546	110(20)
H(34B)	10845	3476	9295	290(70)
H(35A)	11029	1969	9028	90(20)
H(35B)	10398	2025	8412	260(60)
H(37A)	9551	939	8595	180(40)
H(37B)	9372	714	9311	180(40)
H(37C)	10179	513	9129	83(18)
H(38A)	9919	1661	10212	90(20)
H(38B)	10453	2518	10103	140(30)
H(38C)	10722	1463	10020	150(30)





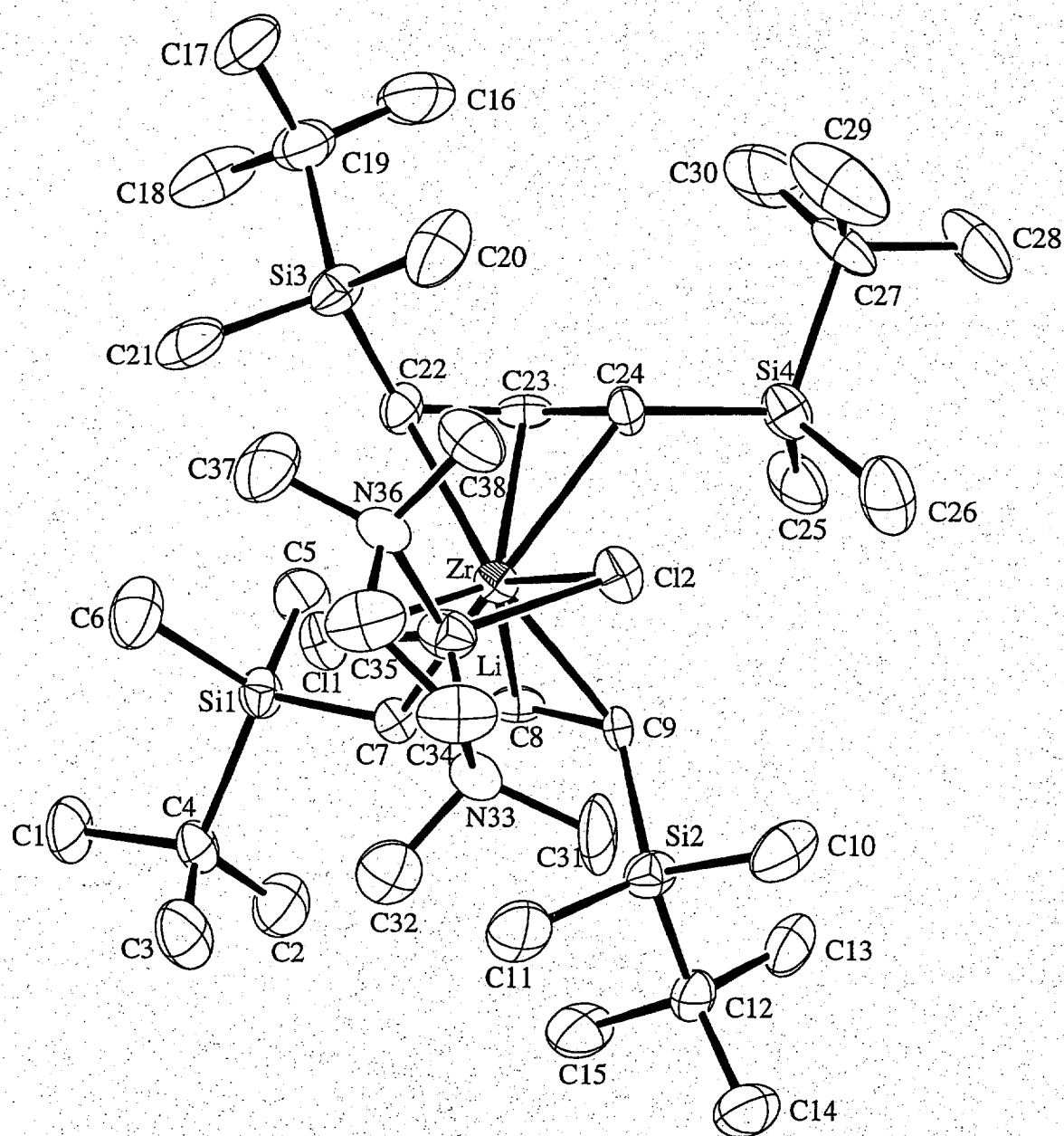


Table 6. Crystal data and structure refinement for titallyl. (Empirical formula)

Identification code	titallyl
Empirical formula	C ₇₈ H ₁₇₀ Cl ₁₄ Li ₂ N ₄ Si ₈ Ti ₂
Formula weight	1640.38
Temperature	230.0(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Triclinic, P-1
Unit cell dimensions	a = 13.1156(10) Å alpha = 71.457(5) deg. b = 19.413(2) Å beta = 79.978(7) deg. c = 23.503(3) Å gamma = 72.761(7) deg.
Volume	5397.5(10) Å ³
Z, Calculated density	2, 1.009 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.370 mm ⁻¹
F(000)	1792
Crystal size	0.08 x 0.12 x 0.15 mm
Theta range for data collection	1.25 to 24.00 deg.
Limiting indices	0 ≤ h ≤ 15, -20 ≤ k ≤ 22, -25 ≤ l ≤ 25
Reflections collected / unique	11303 / 11303 [R(int) = 0.0000]
Completeness to theta = 24.00	66.8 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	11303 / 0 / 833
Goodness-of-fit on F ²	0.727
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0746, wR2 = 0.1677
R indices (all data)	R1 = 0.3104, wR2 = 0.2032
Largest diff. peak and hole	0.528 and -0.415 e.Å ⁻³

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

	x	y	z	U(eq)
TiA	6645(2)	7654(2)	4081(1)	50(1)
Cl(1A)	7251(2)	8582(2)	3224(2)	62(1)
Cl(2A)	5341(2)	8721(2)	4345(2)	67(2)
Si(1A)	5244(3)	7509(3)	2967(2)	70(2)
Si(2A)	4837(3)	6623(3)	5349(2)	54(2)
Si(3A)	9272(3)	6342(3)	3527(2)	64(2)
Si(4A)	8086(3)	7830(3)	5174(2)	61(2)
LiA	5992(18)	9503(17)	3549(13)	75(10)
C(1A)	5804(10)	6327(9)	2444(8)	114(9)
C(2A)	4464(13)	6205(11)	3313(8)	108(9)
C(3A)	3961(12)	7150(10)	2318(8)	98(7)
C(4A)	4811(11)	6772(12)	2755(9)	68(7)
C(5A)	5877(11)	8099(11)	2235(7)	122(9)
C(6A)	3992(9)	8154(9)	3207(8)	117(9)
C(7A)	6226(10)	7019(9)	3547(7)	44(5)
C(8A)	5981(9)	6659(9)	4153(8)	54(6)
C(9A)	5241(8)	7008(8)	4539(6)	43(5)
C(10A)	5900(9)	5743(8)	5700(7)	69(6)
C(11A)	4619(9)	7381(8)	5748(7)	89(7)
C(12A)	3621(10)	5772(9)	5145(8)	103(8)
C(13A)	2633(10)	7107(12)	5104(10)	130(10)
C(14A)	3073(11)	6102(11)	6088(8)	103(9)
C(15A)	3460(12)	6420(12)	5400(10)	80(8)
C(16A)	10964(12)	5617(15)	4230(11)	135(12)
C(17A)	11430(9)	5634(10)	3192(8)	122(9)
C(18A)	11132(10)	6784(10)	3552(10)	129(10)
C(19A)	10755(11)	6065(15)	3615(10)	89(8)
C(20A)	9059(10)	6901(9)	2725(7)	86(6)
C(21A)	8756(8)	5502(8)	3702(7)	71(6)
C(22A)	8530(9)	6927(7)	4029(6)	42(4)
C(23A)	8016(8)	6702(8)	4602(7)	44(5)
C(24A)	7483(8)	7214(8)	4945(7)	64(7)
C(25A)	8907(10)	8339(9)	4582(8)	113(9)
C(26A)	7034(8)	8492(9)	5519(8)	127(10)
C(27A)	9824(11)	6628(9)	5555(9)	108(8)
C(28A)	9533(11)	7685(10)	6009(8)	131(10)
C(29A)	8331(15)	6849(14)	6336(10)	164(11)
C(30A)	8973(13)	7223(12)	5797(8)	77(7)
C(31A)	4895(13)	10314(13)	2382(9)	182(13)
C(32A)	3745(12)	10301(11)	3266(9)	145(10)
N(33A)	4848(11)	10311(9)	3011(8)	88(5)
C(34A)	4910(20)	11110(20)	2866(16)	267(15)
C(35A)	5710(20)	11053(19)	3238(15)	229(13)
N(36A)	6535(12)	10420(9)	3651(9)	99(6)
C(37A)	7599(12)	10435(10)	3383(9)	134(10)
C(38A)	6382(14)	10435(12)	4268(11)	175(14)
TiB	8292(2)	12290(2)	868(1)	51(1)
Cl(1B)	8033(2)	11256(2)	1730(2)	70(2)
Cl(2B)	9227(2)	11337(2)	366(2)	70(2)
Si(1B)	10565(3)	12148(3)	1573(3)	74(2)
Si(2B)	9284(3)	13671(3)	-626(2)	57(2)
Si(3B)	6413(3)	13543(3)	1881(2)	57(2)

LiB	9029(16)	10327(17)	1235(14)	82(13)
C(1B)	10623(12)	13230(11)	2140(9)	158(12)
C(2B)	12333(11)	12279(11)	2024(10)	143(10)
C(3B)	11551(13)	13330(12)	1154(10)	112(9)
C(4B)	11296(13)	12762(12)	1716(10)	77(7)
C(5B)	10274(11)	11423(11)	2353(9)	142(9)
C(6B)	11487(9)	11612(10)	1076(8)	127(10)
C(7B)	9311(11)	12710(10)	1286(8)	63(6)
C(8B)	9172(10)	13211(10)	711(8)	55(6)
C(9B)	9498(8)	13046(8)	152(7)	52(5)
C(10B)	8156(8)	14557(8)	-590(8)	90(7)
C(11B)	8926(9)	13173(8)	-1107(7)	82(7)
C(12B)	10917(9)	14345(10)	-617(8)	115(9)
C(13B)	11433(8)	13243(10)	-1054(8)	106(8)
C(14B)	10387(11)	14549(11)	-1652(8)	91(7)
C(15B)	10585(10)	13955(11)	-1004(8)	62(6)
C(16B)	4716(9)	14331(9)	2533(7)	96(8)
C(17B)	4456(8)	13211(9)	2389(8)	82(7)
C(18B)	4314(9)	14359(12)	1542(9)	119(10)
C(19B)	4957(10)	13902(10)	2074(8)	55(6)
C(20B)	6996(9)	14349(8)	1583(7)	72(6)
C(21B)	7102(9)	12909(8)	2561(6)	63(5)
C(22B)	6597(9)	13006(9)	1324(7)	53(6)
C(23B)	6745(8)	13300(10)	707(8)	55(6)
C(24B)	6921(7)	12888(8)	289(7)	54(6)
C(25B)	5453(12)	11823(10)	903(7)	117(7)
C(26B)	6750(9)	11757(9)	-328(8)	121(10)
C(27B)	4285(9)	13620(10)	181(8)	120(9)
C(28B)	4083(10)	12681(10)	-302(9)	130(9)
C(29B)	5166(15)	13529(14)	-799(12)	153(11)
C(30B)	4828(12)	13070(12)	-183(10)	75(7)
C(31B)	11355(13)	9519(12)	1403(12)	208(16)
C(32B)	10287(16)	9377(16)	2336(11)	240(20)
N(33B)	10252(12)	9467(9)	1708(10)	120(8)
C(34B)	10026(17)	8848(16)	1624(13)	211(11)
C(35B)	9106(18)	8883(15)	1414(13)	165(9)
N(36B)	8353(11)	9555(9)	1088(9)	91(6)
C(37B)	7274(11)	9588(10)	1386(9)	142(11)
C(38B)	8437(13)	9576(11)	483(9)	135(11)
C(39S)	4770(15)	10474(12)	-375(10)	141(7)
C(40S)	5760(13)	10111(14)	-809(11)	131(7)
C(41S)	5875(13)	9499(13)	-137(12)	128(7)
C(42S)	207(18)	10212(17)	4339(13)	184(9)
C(43S)	1332(18)	9574(18)	4424(15)	235(11)
C(44S)	-635(14)	10423(15)	4825(13)	165(8)

Table 2. Bond lengths [Å] and angles [deg] for titallyl. (complex 2)

TiA-C(7A)	2.242(11)✓
TiA-C(24A)	2.275(14)✓
TiA-C(8A)	2.292(13)✓
TiA-C(23A)	2.347(14)✓
TiA-Cl(1A)	2.433(5)
TiA-C(9A)	2.437(11)✓
TiA-Cl(2A)	2.438(4)✓
TiA-C(22A)	2.461(11)✓
Cl(1A)-LiA	2.28(2)✓
Cl(2A)-LiA	2.22(3)✓
Si(1A)-C(6A)	1.868(11)
Si(1A)-C(7A)	1.866(16)
Si(1A)-C(4A)	1.911(14)
Si(1A)-C(5A)	1.944(17)
Si(2A)-C(9A)	1.856(14)
Si(2A)-C(10A)	1.907(15)
Si(2A)-C(11A)	1.913(9)
Si(2A)-C(15A)	1.936(13)
Si(3A)-C(21A)	1.849(12)
Si(3A)-C(22A)	1.851(10)
Si(3A)-C(20A)	1.873(17)
Si(3A)-C(19A)	1.889(15)
Si(4A)-C(25A)	1.818(16)
Si(4A)-C(26A)	1.854(10)
Si(4A)-C(24A)	1.860(10)
Si(4A)-C(30A)	1.89(2)
LiA-N(33A)	2.08(3)✓
LiA-N(36A)	2.19(3)✓
C(1A)-C(4A)	1.542(15)
C(2A)-C(4A)	1.52(2)
C(3A)-C(4A)	1.51(2)
C(7A)-C(8A)	1.40(2)
C(8A)-C(9A)	1.385(12)
C(12A)-C(15A)	1.504(15)
C(13A)-C(15A)	1.50(3)
C(14A)-C(15A)	1.59(2)
C(16A)-C(19A)	1.45(3)
C(17A)-C(19A)	1.504(16)
C(18A)-C(19A)	1.57(2)
C(22A)-C(23A)	1.394(16)
C(23A)-C(24A)	1.423(12)
C(27A)-C(30A)	1.528(16)
C(28A)-C(30A)	1.547(15)
C(29A)-C(30A)	1.50(2)
C(31A)-N(33A)	1.47(2)
C(32A)-N(33A)	1.469(15)
N(33A)-C(34A)	1.49(3)✓
C(34A)-C(35A)	1.44(3)
C(35A)-N(36A)	1.56(3)
N(36A)-C(37A)	1.433(14)
N(36A)-C(38A)	1.44(2)
TiB-C(7B)	2.242(13)
TiB-C(24B)	2.246(13)
TiB-C(8B)	2.306(13)
TiB-C(23B)	2.354(15)
TiB-Cl(1B)	2.414(6)
TiB-Cl(2B)	2.421(3)
TiB-C(22B)	2.511(11)
TiB-C(9B)	2.525(13)

Cl(2B)-LiB	2.38(3)
Si(1B)-C(7B)	1.790(18)
Si(1B)-C(6B)	1.855(12)
Si(1B)-C(4B)	1.871(14)
Si(1B)-C(5B)	1.98(2)
Si(2B)-C(9B)	1.860(17)
Si(2B)-C(11B)	1.892(10)
Si(2B)-C(10B)	1.922(12)
Si(2B)-C(15B)	1.931(14)
Si(3B)-C(20B)	1.830(13)
Si(3B)-C(19B)	1.857(12)
Si(3B)-C(22B)	1.863(11)
Si(3B)-C(21B)	1.865(16)
Si(4B)-C(24B)	1.847(10)
Si(4B)-C(25B)	1.860(16)
Si(4B)-C(30B)	1.87(2)
Si(4B)-C(26B)	1.895(10)
LiB-N(36B)	2.09(2)
LiB-N(33B)	2.11(4)
LiB-C(35B)	2.67(4)
LiB-C(34B)	2.70(4)
C(1B)-C(4B)	1.546(17)
C(2B)-C(4B)	1.55(2)
C(3B)-C(4B)	1.49(3)
C(7B)-C(8B)	1.40(2)
C(8B)-C(9B)	1.416(15)
C(12B)-C(15B)	1.538(15)
C(13B)-C(15B)	1.520(18)
C(14B)-C(15B)	1.60(2)
C(16B)-C(19B)	1.500(13)
C(17B)-C(19B)	1.58(2)
C(18B)-C(19B)	1.51(2)
C(22B)-C(23B)	1.38(2)
C(23B)-C(24B)	1.403(13)
C(27B)-C(30B)	1.515(17)
C(28B)-C(30B)	1.507(16)
C(29B)-C(30B)	1.51(3)
C(31B)-N(33B)	1.514(18)
C(32B)-N(33B)	1.44(2)
N(33B)-C(34B)	1.40(2)
C(34B)-C(35B)	1.36(2)
C(35B)-N(36B)	1.46(3)
N(36B)-C(38B)	1.397(19)
N(36B)-C(37B)	1.458(14)
C(39S)-C(41S)#1	1.35(2)
C(39S)-C(40S)	1.64(2)
C(40S)-C(41S)	1.65(3)
C(42S)-C(44S)	1.51(2)
C(42S)-C(43S)	1.62(3)

C(7A)-TiA-C(24A)	129.6(6)
C(24A)-TiA-C(8A)	100.4(6)
C(7A)-TiA-C(23A)	99.4(5)
C(8A)-TiA-C(23A)	82.8(5)
C(7A)-TiA-Cl(1A)	96.5(4)
C(24A)-TiA-Cl(1A)	119.9(3)
C(8A)-TiA-Cl(1A)	132.5(4)
C(23A)-TiA-Cl(1A)	115.0(3)
C(24A)-TiA-C(9A)	92.7(5)
C(23A)-TiA-C(9A)	95.2(5)
Cl(1A)-TiA-C(9A)	146.7(4)
C(7A)-TiA-Cl(2A)	121.6(4)
C(24A)-TiA-Cl(2A)	96.2(3)
	115.2(3)

C(23A)-TiA-Cl(2A)	132.1(3)
Cl(1A)-TiA-Cl(2A)	86.02(16)
C(9A)-TiA-Cl(2A)	83.6(3)
C(7A)-TiA-C(22A)	90.6(4)
C(8A)-TiA-C(22A)	94.2(4)
Cl(1A)-TiA-C(22A)	84.1(4)
C(9A)-TiA-C(22A)	120.0(5)
Cl(2A)-TiA-C(22A)	147.3(3)
LiA-Cl(1A)-TiA	88.8(8)
LiA-Cl(2A)-TiA	90.0(6)
C(6A)-Si(1A)-C(7A)	115.3(6)
C(6A)-Si(1A)-C(4A)	106.7(6)
C(7A)-Si(1A)-C(4A)	108.9(8)
C(6A)-Si(1A)-C(5A)	106.8(9)
C(7A)-Si(1A)-C(5A)	111.6(7)
C(4A)-Si(1A)-C(5A)	107.2(7)
C(9A)-Si(2A)-C(10A)	110.2(6)
C(9A)-Si(2A)-C(11A)	108.9(7)
C(10A)-Si(2A)-C(11A)	111.3(6)
C(9A)-Si(2A)-C(15A)	107.3(8)
C(10A)-Si(2A)-C(15A)	112.2(8)
C(11A)-Si(2A)-C(15A)	106.8(5)
C(21A)-Si(3A)-C(22A)	109.4(6)
C(21A)-Si(3A)-C(20A)	108.8(6)
C(22A)-Si(3A)-C(20A)	109.2(7)
C(21A)-Si(3A)-C(19A)	110.9(9)
C(22A)-Si(3A)-C(19A)	110.2(6)
C(20A)-Si(3A)-C(19A)	108.2(9)
C(25A)-Si(4A)-C(26A)	110.2(8)
C(25A)-Si(4A)-C(24A)	115.3(6)
C(26A)-Si(4A)-C(24A)	110.5(5)
C(25A)-Si(4A)-C(30A)	107.1(7)
C(26A)-Si(4A)-C(30A)	104.9(8)
C(24A)-Si(4A)-C(30A)	108.2(8)
N(33A)-LiA-N(36A)	88.2(13)
N(33A)-LiA-Cl(2A)	114.9(11)
N(36A)-LiA-Cl(2A)	120.7(12)
N(33A)-LiA-Cl(1A)	123.1(12)
N(36A)-LiA-Cl(1A)	117.3(11)
Cl(2A)-LiA-Cl(1A)	95.2(12)
C(3A)-C(4A)-C(2A)	112.9(14)
C(3A)-C(4A)-C(1A)	108.8(13)
C(2A)-C(4A)-C(1A)	106.3(17)
C(3A)-C(4A)-Si(1A)	110.1(15)
C(2A)-C(4A)-Si(1A)	111.1(10)
C(1A)-C(4A)-Si(1A)	107.4(9)
C(8A)-C(7A)-Si(1A)	125.7(10)
C(8A)-C(7A)-TiA	74.0(7)
Si(1A)-C(7A)-TiA	120.6(8)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	123.9(16)
C(9A)-C(8A)-TiA	78.8(7)
C(7A)-C(8A)-TiA	70.1(8)
C(8A)-C(9A)-Si(2A)	129.5(12)
C(8A)-C(9A)-TiA	67.3(6)
Si(2A)-C(9A)-TiA	129.0(5)
C(13A)-C(15A)-C(12A)	113.3(16)
C(13A)-C(15A)-C(14A)	110.2(14)
C(12A)-C(15A)-C(14A)	103.6(16)
C(13A)-C(15A)-Si(2A)	112.2(14)
C(12A)-C(15A)-Si(2A)	108.2(9)
C(14A)-C(15A)-Si(2A)	108.9(12)
C(16A)-C(19A)-C(17A)	108.6(19)
C(16A)-C(19A)-C(18A)	102.8(16)

C(16A)-C(19A)-Si(3A)	110.3(14)
C(17A)-C(19A)-Si(3A)	113.9(11)
C(18A)-C(19A)-Si(3A)	109.5(14)
C(23A)-C(22A)-Si(3A)	128.4(11)
C(23A)-C(22A)-TiA	68.7(7)
Si(3A)-C(22A)-TiA	130.5(6)
C(22A)-C(23A)-C(24A)	122.6(14)
C(22A)-C(23A)-TiA	77.7(10)
C(24A)-C(23A)-TiA	69.3(7)
C(23A)-C(24A)-Si(4A)	126.5(8)
C(23A)-C(24A)-TiA	74.8(7)
Si(4A)-C(24A)-TiA	120.3(8)
C(29A)-C(30A)-C(27A)	109.9(19)
C(29A)-C(30A)-C(28A)	107.1(13)
C(27A)-C(30A)-C(28A)	109.1(12)
C(29A)-C(30A)-Si(4A)	110.8(13)
C(27A)-C(30A)-Si(4A)	107.8(11)
C(28A)-C(30A)-Si(4A)	112.1(13)
C(31A)-N(33A)-C(32A)	105.8(14)
C(31A)-N(33A)-C(34A)	95(2)
C(32A)-N(33A)-C(34A)	106.6(15)
C(31A)-N(33A)-LiA	118.3(13)
C(32A)-N(33A)-LiA	112.9(14)
C(34A)-N(33A)-LiA	115.9(17)
C(35A)-C(34A)-N(33A)	103(3)
C(34A)-C(35A)-N(36A)	138(3)
C(37A)-N(36A)-C(38A)	112.9(15)
C(37A)-N(36A)-C(35A)	109.2(19)
C(38A)-N(36A)-C(35A)	114.2(16)
C(37A)-N(36A)-LiA	113.6(11)
C(38A)-N(36A)-LiA	111.4(15)
C(35A)-N(36A)-LiA	94.2(14)
C(7B)-TiB-C(24B)	132.2(6)
C(24B)-TiB-C(8B)	102.5(6)
C(7B)-TiB-C(23B)	102.2(5)
C(8B)-TiB-C(23B)	84.6(5)
C(7B)-TiB-Cl(1B)	97.1(5)
C(24B)-TiB-Cl(1B)	117.0(4)
C(8B)-TiB-Cl(1B)	132.8(5)
C(23B)-TiB-Cl(1B)	112.7(4)
C(7B)-TiB-Cl(2B)	116.4(4)
C(24B)-TiB-Cl(2B)	99.5(3)
C(8B)-TiB-Cl(2B)	113.3(3)
C(23B)-TiB-Cl(2B)	134.8(4)
Cl(1B)-TiB-Cl(2B)	85.80(16)
C(7B)-TiB-C(22B)	92.0(4)
C(8B)-TiB-C(22B)	93.7(5)
Cl(1B)-TiB-C(22B)	83.5(4)
Cl(2B)-TiB-C(22B)	150.7(3)
C(24B)-TiB-C(9B)	92.0(5)
C(23B)-TiB-C(9B)	93.8(5)
Cl(1B)-TiB-C(9B)	150.6(4)
Cl(2B)-TiB-C(9B)	84.1(3)
C(22B)-TiB-C(9B)	117.2(5)
LiB-Cl(1B)-TiB	93.3(8)
LiB-Cl(2B)-TiB	93.5(5)
C(7B)-Si(1B)-C(6B)	115.5(7)
C(7B)-Si(1B)-C(4B)	109.5(8)
C(6B)-Si(1B)-C(4B)	107.1(7)
C(7B)-Si(1B)-C(5B)	108.5(7)
C(6B)-Si(1B)-C(5B)	108.2(8)
C(4B)-Si(1B)-C(5B)	107.7(9)
C(9B)-Si(2B)-C(11B)	111.1(7)

C(11B)-Si(2B)-C(10B)	109.9(6)
C(9B)-Si(2B)-C(15B)	109.8(7)
C(11B)-Si(2B)-C(15B)	107.3(6)
C(10B)-Si(2B)-C(15B)	109.5(7)
C(20B)-Si(3B)-C(19B)	108.1(7)
C(20B)-Si(3B)-C(22B)	112.0(7)
C(19B)-Si(3B)-C(22B)	109.0(5)
C(20B)-Si(3B)-C(21B)	107.8(6)
C(19B)-Si(3B)-C(21B)	111.3(7)
C(22B)-Si(3B)-C(21B)	108.7(7)
C(24B)-Si(4B)-C(25B)	112.9(6)
C(24B)-Si(4B)-C(30B)	108.6(7)
C(25B)-Si(4B)-C(30B)	104.1(8)
C(24B)-Si(4B)-C(26B)	110.1(5)
C(25B)-Si(4B)-C(26B)	111.8(8)
C(30B)-Si(4B)-C(26B)	109.0(7)
N(36B)-LiB-N(33B)	92.5(13)
N(36B)-LiB-Cl(2B)	114.2(13)
N(33B)-LiB-Cl(2B)	127.7(11)
N(36B)-LiB-Cl(1B)	122.6(9)
N(33B)-LiB-Cl(1B)	116.1(13)
Cl(2B)-LiB-Cl(1B)	87.3(10)
C(3B)-C(4B)-C(2B)	110.5(16)
C(3B)-C(4B)-C(1B)	104.6(17)
C(2B)-C(4B)-C(1B)	106.6(15)
C(3B)-C(4B)-Si(1B)	111.9(14)
C(2B)-C(4B)-Si(1B)	110.5(14)
C(1B)-C(4B)-Si(1B)	112.6(11)
C(8B)-C(7B)-Si(1B)	126.0(12)
C(8B)-C(7B)-TiB	74.6(9)
Si(1B)-C(7B)-TiB	123.3(8)
C(7B)-C(8B)-C(9B)	127.4(17)
C(7B)-C(8B)-TiB	69.7(10)
C(9B)-C(8B)-TiB	81.7(7)
C(8B)-C(9B)-Si(2B)	129.8(12)
C(8B)-C(9B)-TiB	64.6(7)
Si(2B)-C(9B)-TiB	128.7(5)
C(13B)-C(15B)-C(12B)	111.5(12)
C(13B)-C(15B)-C(14B)	111.3(13)
C(12B)-C(15B)-C(14B)	107.2(14)
C(13B)-C(15B)-Si(2B)	107.5(11)
C(12B)-C(15B)-Si(2B)	108.7(9)
C(14B)-C(15B)-Si(2B)	110.5(10)
C(16B)-C(19B)-C(18B)	109.3(13)
C(16B)-C(19B)-C(17B)	104.1(12)
C(18B)-C(19B)-C(17B)	105.1(13)
C(16B)-C(19B)-Si(3B)	113.5(9)
C(18B)-C(19B)-Si(3B)	115.0(11)
C(17B)-C(19B)-Si(3B)	109.0(11)
C(23B)-C(22B)-Si(3B)	124.8(14)
C(23B)-C(22B)-TiB	67.3(8)
Si(3B)-C(22B)-TiB	129.6(6)
C(22B)-C(23B)-C(24B)	124.7(16)
C(22B)-C(23B)-TiB	79.9(11)
C(24B)-C(23B)-TiB	68.1(7)
C(23B)-C(24B)-Si(4B)	127.1(8)
C(23B)-C(24B)-TiB	76.5(8)
Si(4B)-C(24B)-TiB	120.8(8)
C(28B)-C(30B)-C(29B)	104.4(15)
C(28B)-C(30B)-C(27B)	113.4(13)
C(29B)-C(30B)-C(27B)	106.7(19)
C(28B)-C(30B)-Si(4B)	111.1(13)
C(29B)-C(30B)-Si(4B)	110.2(14)

C(34B)-N(33B)-C(32B)	111(2)
C(34B)-N(33B)-C(31B)	108.7(15)
C(32B)-N(33B)-C(31B)	106.8(16)
C(34B)-N(33B)-LiB	98.9(15)
C(32B)-N(33B)-LiB	119.1(14)
C(31B)-N(33B)-LiB	111.8(16)
C(35B)-C(34B)-N(33B)	124(2)
C(34B)-C(35B)-N(36B)	127(2)
C(38B)-N(36B)-C(37B)	113.7(14)
C(38B)-N(36B)-C(35B)	109.9(15)
C(37B)-N(36B)-C(35B)	109.9(19)
C(38B)-N(36B)-LiB	113.4(15)
C(37B)-N(36B)-LiB	112.5(10)
C(35B)-N(36B)-LiB	96.0(14)
C(39S)#1-C(41S)-C(40S)	128.4(19)
C(44S)-C(42S)-C(43S)	128(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,-y+2,-z #2 -x,-y+2,-z+1

Table 9. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for titallyl. (complex 2)
 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
TiA	55(2)	44(2)	49(2)	-13(2)	-1(2)	-11(1)
Cl(1A)	76(2)	48(4)	51(4)	-4(3)	1(2)	-15(2)
Cl(2A)	75(2)	49(4)	69(4)	-15(4)	8(2)	-13(2)
Si(1A)	89(3)	68(5)	55(5)	-9(5)	-16(3)	-26(3)
Si(2A)	65(3)	52(4)	44(4)	-10(4)	0(3)	-19(3)
Si(3A)	66(3)	56(5)	68(5)	-29(5)	3(3)	-5(3)
Si(4A)	63(3)	58(4)	65(5)	-24(4)	-6(3)	-13(3)
LiA	104(19)	60(30)	40(20)	-20(20)	-6(17)	6(17)
C(1A)	137(13)	120(20)	120(20)	-90(20)	-26(13)	-19(13)
C(2A)	169(16)	120(20)	80(19)	-20(20)	1(15)	-111(16)
C(3A)	150(14)	80(20)	65(17)	8(17)	-44(13)	-49(13)
C(4A)	64(11)	100(20)	52(16)	-30(17)	-14(11)	-23(11)
C(5A)	160(15)	180(30)	53(17)	4(19)	-11(13)	-114(16)
C(6A)	110(12)	110(20)	110(20)	-50(20)	-43(12)	38(12)
C(7A)	50(9)	47(13)	26(12)	19(12)	-1(9)	-33(8)
C(8A)	57(10)	35(14)	66(16)	-18(15)	1(10)	-8(9)
C(9A)	53(8)	31(12)	39(13)	5(12)	-7(8)	-18(8)
C(10A)	95(10)	44(15)	61(15)	-4(14)	1(10)	-21(10)
C(11A)	120(11)	74(17)	94(17)	-55(17)	13(11)	-34(11)
C(12A)	117(12)	120(20)	110(20)	-50(20)	10(12)	-72(12)
C(13A)	38(10)	150(30)	170(30)	-10(20)	-42(12)	-1(12)
C(14A)	104(12)	160(30)	60(17)	-30(20)	27(13)	-80(14)
C(15A)	81(12)	100(20)	90(19)	-57(19)	28(13)	-57(13)
C(16A)	74(12)	200(30)	150(30)	-100(30)	-23(15)	-1(14)
C(17A)	81(11)	160(20)	100(20)	-70(20)	7(11)	28(11)
C(18A)	59(10)	100(20)	220(30)	-40(20)	29(13)	-36(12)
C(19A)	59(11)	130(20)	81(19)	-50(20)	-14(12)	3(12)
C(20A)	133(12)	64(17)	28(14)	3(15)	3(11)	0(11)
C(21A)	93(10)	38(14)	78(16)	-15(15)	-16(10)	-6(9)
C(22A)	74(9)	0(11)	32(12)	15(11)	2(9)	-5(8)
C(23A)	42(8)	31(13)	46(14)	1(13)	-6(8)	-1(8)
C(24A)	27(7)	99(16)	92(16)	-70(16)	5(8)	-13(8)
C(25A)	96(11)	120(20)	160(20)	-70(20)	13(13)	-76(13)
C(26A)	63(9)	170(20)	210(30)	-160(20)	-10(12)	-13(11)
C(27A)	118(13)	47(17)	140(20)	8(19)	-80(13)	11(11)
C(28A)	159(14)	180(30)	110(20)	-60(20)	-21(14)	-106(16)
C(29A)	200(20)	210(40)	90(20)	0(30)	-21(18)	-110(20)
C(30A)	81(12)	90(20)	51(16)	6(17)	-12(11)	-40(12)
C(31A)	210(20)	210(40)	70(20)	-60(30)	-32(16)	62(18)
C(32A)	95(13)	110(20)	140(30)	30(20)	19(15)	9(13)
N(33A)	112(11)	33(13)	74(15)	37(13)	-17(10)	-4(9)
N(36A)	122(12)	61(15)	114(18)	-23(16)	-10(13)	-27(11)
C(37A)	97(14)	120(20)	150(30)	-10(20)	35(15)	-40(14)
C(38A)	220(20)	150(30)	200(30)	-120(30)	100(20)	-97(19)
TiB	48(2)	50(3)	51(2)	-12(2)	-4(2)	-13(1)
Cl(1B)	79(2)	58(4)	63(4)	-12(4)	6(2)	-15(2)
Cl(2B)	83(2)	60(4)	69(4)	-29(4)	11(2)	-19(2)
Si(1B)	67(3)	58(5)	88(5)	-7(5)	-28(3)	-7(3)
Si(2B)	74(3)	48(4)	42(4)	0(4)	-10(3)	-15(3)
Si(3B)	55(3)	55(4)	63(4)	-23(4)	1(3)	-15(3)
Si(4B)	71(3)	76(5)	77(5)	-28(5)	-21(3)	-22(3)
LiB	67(16)	100(30)	100(30)	-70(30)	32(18)	-29(18)
C(1B)	145(15)	190(30)	200(30)	-120(30)	-30(16)	-59(17)

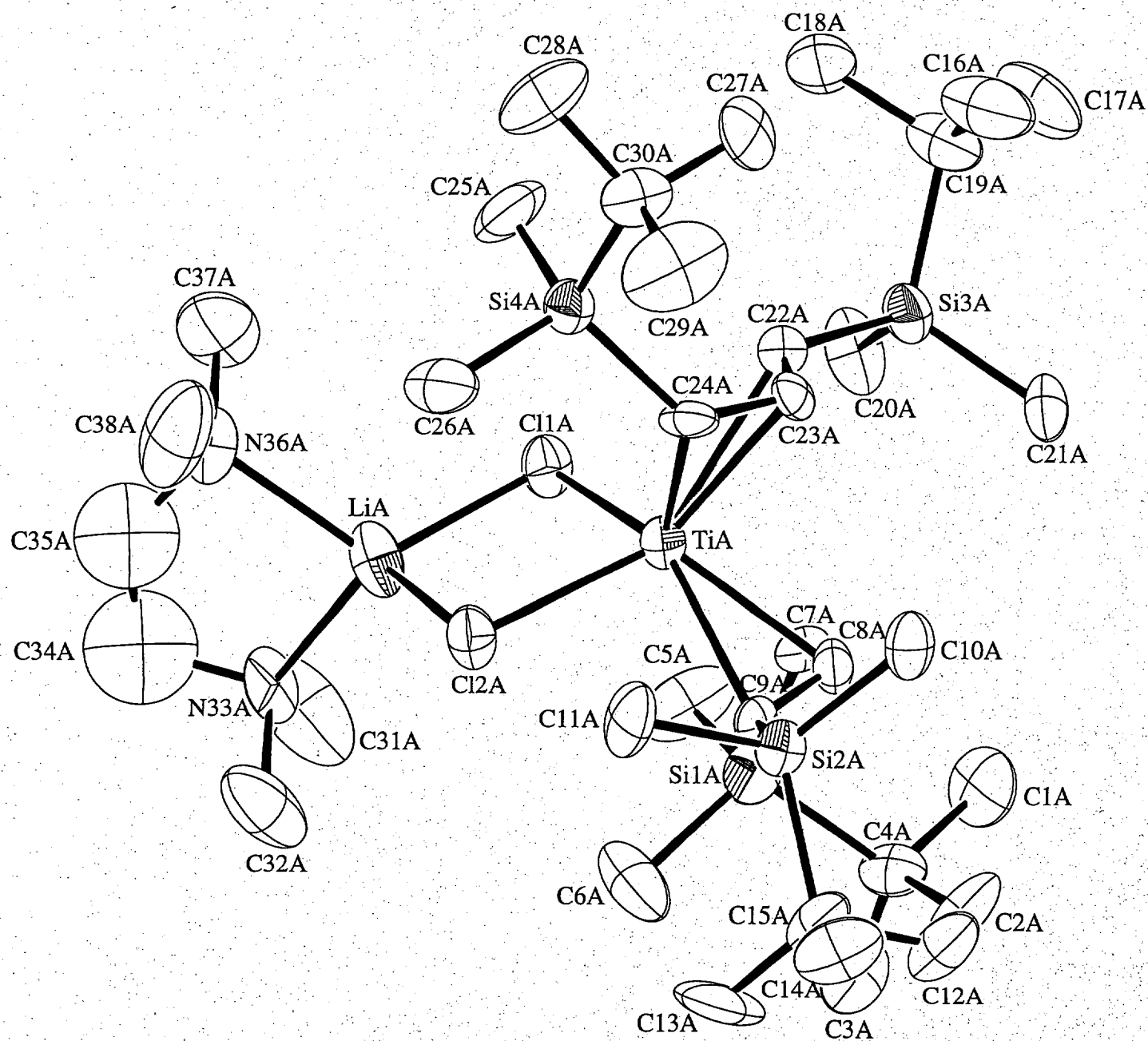
C(3B)	92(13)	90(20)	160(30)	-10(20)	-35(15)	-51(13)
C(4B)	67(12)	60(18)	110(20)	-15(19)	-32(12)	-20(11)
C(5B)	108(13)	130(30)	160(30)	30(20)	-57(14)	-42(14)
C(6B)	73(10)	120(20)	180(30)	-70(20)	-66(12)	40(11)
C(7B)	61(11)	82(19)	28(14)	12(15)	6(10)	-29(11)
C(8B)	55(9)	56(16)	75(16)	-37(16)	0(11)	-25(10)
C(9B)	59(9)	36(14)	57(15)	-14(13)	9(9)	-15(8)
C(10B)	71(9)	64(16)	130(20)	-35(17)	-32(10)	5(9)
C(11B)	109(11)	78(17)	60(15)	-20(16)	20(10)	-41(11)
C(12B)	92(11)	150(20)	150(20)	-60(20)	-1(12)	-76(12)
C(13B)	35(9)	160(20)	101(19)	-20(20)	21(10)	-22(11)
C(14B)	121(13)	90(20)	55(17)	10(18)	-16(12)	-44(13)
C(15B)	42(9)	60(17)	73(17)	-2(16)	-11(10)	-14(9)
C(16B)	98(11)	100(20)	99(19)	-62(19)	8(11)	-15(11)
C(17B)	30(8)	102(19)	102(18)	-31(18)	22(9)	-12(10)
C(18B)	42(10)	160(30)	130(20)	-50(20)	-42(12)	33(11)
C(19B)	60(10)	53(15)	52(15)	-27(15)	16(10)	-13(10)
C(20B)	96(10)	50(15)	86(17)	-23(15)	-9(10)	-36(10)
C(21B)	81(9)	59(15)	30(13)	10(13)	-2(9)	-16(9)
C(22B)	55(9)	44(15)	50(14)	-19(14)	-1(9)	5(8)
C(23B)	40(8)	63(16)	73(16)	-39(16)	-2(10)	-11(8)
C(24B)	21(7)	61(14)	83(15)	-29(14)	-4(8)	-8(7)
C(25B)	180(16)	110(20)	68(17)	70(16)	-61(13)	-128(15)
C(26B)	100(11)	160(20)	170(20)	-130(20)	-9(12)	-47(12)
C(27B)	81(11)	130(20)	140(20)	-80(20)	-36(11)	52(11)
C(28B)	94(12)	130(20)	170(30)	-30(20)	-87(13)	-17(12)
C(29B)	132(18)	120(30)	170(30)	-20(30)	-59(19)	24(15)
C(30B)	55(11)	90(20)	91(19)	-16(19)	-46(12)	-22(11)
C(31B)	99(15)	130(30)	340(50)	-40(30)	20(20)	7(15)
C(32B)	220(30)	350(50)	120(30)	-110(40)	-110(20)	70(20)
N(33B)	123(13)	56(16)	190(20)	-47(19)	-49(14)	-10(10)
N(36B)	87(10)	74(16)	101(17)	-23(16)	4(11)	-14(10)
C(37B)	93(12)	160(30)	180(30)	-80(20)	82(15)	-63(14)
C(38B)	220(20)	120(30)	80(20)	-50(20)	50(17)	-74(17)

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

	x	y	z	U(eq)
H(1A1)	6068	6666	2094	171
H(1A2)	5610	5956	2327	171
H(1A3)	6351	6083	2719	171
H(2A1)	5027	5990	3579	162
H(2A2)	4318	5814	3198	162
H(2A3)	3829	6453	3515	162
H(3A1)	4222	7499	1974	147
H(3A2)	3330	7415	2511	147
H(3A3)	3789	6778	2190	147
H(5A1)	5352	8342	1946	183
H(5A2)	6477	7775	2070	183
H(5A3)	6113	8473	2326	183
H(6A1)	3533	8375	2884	176
H(6A2)	4172	8545	3306	176
H(6A3)	3629	7876	3553	176
H(7A)	6941	7013	3422	53
H(8A)	6335	6156	4305	64
H(9A)	4897	7509	4368	51
H(10A)	5684	5550	6119	104
H(10B)	6570	5867	5661	104
H(10C)	5982	5369	5497	104
H(11A)	4416	7184	6168	133
H(11B)	4061	7809	5573	133
H(11C)	5271	7530	5702	133
H(12A)	4187	5361	5334	155
H(12B)	3810	5927	4719	155
H(12C)	2970	5614	5221	155
H(13A)	2549	7495	5293	195
H(13B)	1961	6984	5146	195
H(13C)	2859	7281	4684	195
H(14A)	3607	5664	6272	155
H(14B)	2412	5971	6116	155
H(14C)	2965	6479	6291	155
H(16A)	10545	5890	4505	203
H(16B)	11711	5514	4278	203
H(16C)	10773	5152	4312	203
H(17A)	11318	5930	2783	183
H(17B)	11231	5173	3267	183
H(17C)	12173	5522	3254	183
H(18A)	11028	7121	3155	193
H(18B)	11878	6640	3618	193
H(18C)	10721	7031	3845	193
H(20A)	9318	7341	2630	129
H(20B)	8308	7048	2671	129
H(20C)	9441	6599	2463	129
H(21A)	9136	5200	3440	107
H(21B)	8006	5656	3645	107
H(21C)	8858	5213	4113	107
H(22A)	8496	7438	3879	50
H(23A)	8022	6198	4767	53
H(24A)	6762	7244	5066	77
H(25A)	9446	7991	4406	170
H(25B)	9244	8598	4750	170
H(25C)	8464	8697	4278	170

H(26B)	6598	8858	5215	190
H(26C)	7365	8743	5698	190
H(27A)	10228	6871	5207	162
H(27B)	9483	6321	5444	162
H(27C)	10298	6319	5860	162
H(28A)	9969	7922	5677	197
H(28B)	9975	7356	6324	197
H(28C)	9001	8062	6158	197
H(29A)	7961	6563	6219	246
H(29B)	7820	7224	6496	246
H(29C)	8802	6519	6637	246
H(31A)	4832	9839	2370	273
H(31B)	5567	10395	2175	273
H(31C)	4318	10709	2188	273
H(32A)	3657	10325	3674	217
H(32B)	3606	9845	3259	217
H(32C)	3252	10726	3031	217
H(34A)	5131	11298	2442	321
H(34B)	4228	11429	2966	321
H(35A)	5305	11351	3504	275
H(35B)	6154	11358	2962	275
H(37A)	7660	10415	2975	201
H(37B)	8105	10010	3608	201
H(37C)	7744	10890	3385	201
H(38A)	5666	10407	4430	262
H(38B)	6491	10894	4288	262
H(38C)	6886	10014	4499	262
H(1B1)	10426	12898	2517	237
H(1B2)	9988	13559	1957	237
H(1B3)	11039	13523	2210	237
H(2B1)	12156	11914	2385	215
H(2B2)	12668	12598	2124	215
H(2B3)	12817	12025	1754	215
H(3B1)	11971	13080	865	168
H(3B2)	11949	13621	1242	168
H(3B3)	10897	13657	991	168
H(5B1)	9813	11690	2621	213
H(5B2)	10937	11143	2528	213
H(5B3)	9932	11083	2289	213
H(6B1)	12139	11336	1264	190
H(6B2)	11647	11955	697	190
H(6B3)	11153	11269	1011	190
H(7B)	8695	12665	1544	75
H(8B)	8825	13709	694	66
H(9B)	9878	12552	177	62
H(10D)	8042	14882	-991	135
H(10E)	8354	14817	-358	135
H(10F)	7508	14416	-404	135
H(11D)	8816	13507	-1504	124
H(11E)	8281	13021	-930	124
H(11F)	9499	12737	-1129	124
H(12D)	10356	14782	-583	173
H(12E)	11562	14492	-802	173
H(12F)	11041	14004	-222	173
H(13D)	11200	13012	-1296	159
H(13E)	11542	12900	-659	159
H(13F)	12093	13366	-1238	159
H(14D)	9860	14996	-1606	136
H(14E)	10136	14334	-1899	136
H(14F)	11046	14672	-1839	136
H(16D)	5145	14050	2865	143
H(16E)	3971	14409	2675	143
H(16F)	4879	14809	2351	143

H(17E)	3700	13392	2481	123
H(17F)	4788	12919	2754	123
H(18D)	4465	14085	1249	179
H(18E)	4504	14828	1365	179
H(18F)	3563	14455	1675	179
H(20D)	7750	14176	1480	109
H(20E)	6886	14610	1882	109
H(20F)	6657	14684	1230	109
H(21D)	6815	12478	2724	94
H(21E)	6990	13174	2857	94
H(21F)	7856	12748	2450	94
H(22B)	6588	12502	1472	63
H(23B)	6727	13808	558	66
H(24B)	7556	12873	40	64
H(25D)	4982	11577	821	176
H(25E)	5059	12157	1138	176
H(25F)	6023	11453	1122	176
H(26D)	6273	11501	-391	181
H(26E)	7362	11394	-143	181
H(26F)	6981	12065	-709	181
H(27D)	4800	13844	245	180
H(27E)	3987	13358	563	180
H(27F)	3722	14005	-34	180
H(28D)	4470	12347	-537	195
H(28E)	3508	13050	-518	195
H(28F)	3795	12400	74	195
H(29D)	5641	13802	-761	230
H(29E)	4544	13877	-985	230
H(29F)	5528	13201	-1044	230
H(31D)	11374	9560	984	313
H(31E)	11881	9075	1589	313
H(31F)	11508	9954	1444	313
H(32D)	9612	9314	2550	363
H(32E)	10425	9814	2382	363
H(32F)	10847	8941	2496	363
H(34C)	10608	8655	1354	253
H(34D)	10077	8467	2010	253
H(35C)	8686	8644	1762	199
H(35D)	9315	8552	1157	199
H(37D)	7272	9567	1799	213
H(37E)	7047	9169	1367	213
H(37F)	6791	10048	1186	213
H(38D)	9170	9530	320	203
H(38E)	7997	10044	263	203
H(38F)	8202	9167	450	203



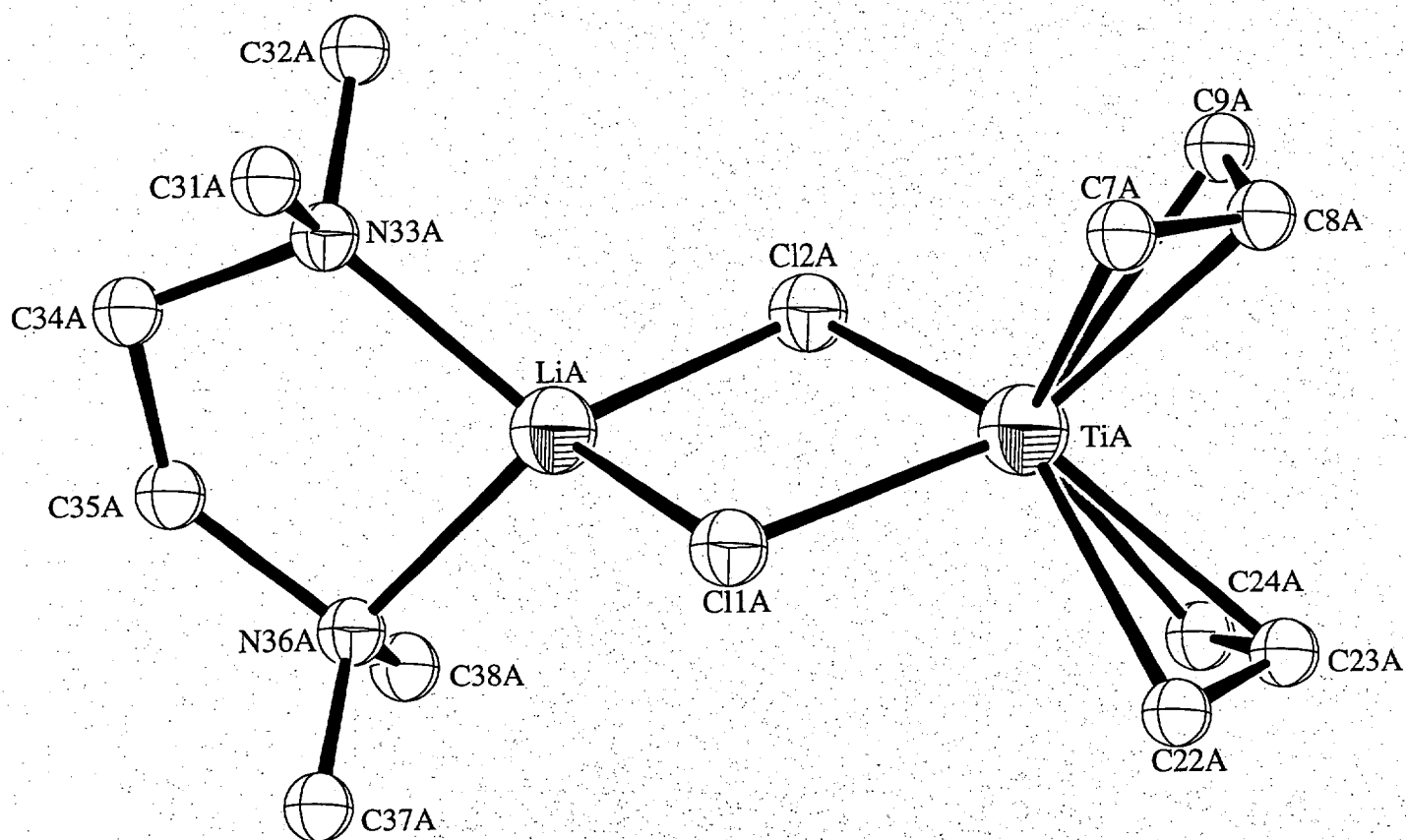


Table 1. Crystal data and structure refinement for allyl. (Compound 3)

Identification code	allyl
Empirical formula	C ₃₀ H ₆₆ Si ₄
Formula weight	539.19
Temperature	230(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, C2/c
Unit cell dimensions	a = 19.0594(10) Å alpha = 90 deg. b = 10.8590(5) Å beta = 104.922(3) deg c = 18.7038(10) Å gamma = 90 deg.
Volume	3740.5(3) Å ³
Z, Calculated density	4, 0.957 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.174 mm ⁻¹
F(000)	1208
Crystal size	0.12 x 0.16 x 0.20 mm
Theta range for data collection	2.18 to 25.50 deg.
Limiting indices	0 ≤ h ≤ 23, 0 ≤ k ≤ 13, -22 ≤ l ≤ 21
Reflections collected / unique	3481 / 3481 [R(int) = 0.0000]
Completeness to theta = 25.50	99.9 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3481 / 0 / 286
Goodness-of-fit on F ²	1.017
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0445, wR2 = 0.1188
R indices (all data)	R1 = 0.0711, wR2 = 0.1246
Largest diff. peak and hole	0.318 and -0.181 e.Å ⁻³

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

	x	y	z	U(eq)
C(1)	4111(1)	7717(2)	506(1)	53(1)
C(2)	4310(2)	8648(3)	-28(2)	76(1)
C(3)	3458(2)	8197(4)	750(2)	81(1)
C(4)	3901(2)	6516(3)	76(2)	80(1)
Si(5)	4922(1)	7505(1)	1338(1)	43(1)
C(6)	5308(2)	9059(3)	1638(2)	73(1)
C(7)	5640(2)	6549(4)	1092(2)	72(1)
C(8)	4668(1)	6732(2)	2149(1)	37(1)
C(9)	4356(1)	5475(2)	1927(1)	39(1)
C(10)	3683(1)	5096(2)	1867(1)	45(1)
Si(11)	3313(1)	3565(1)	1507(1)	48(1)
C(12)	2384(2)	3804(4)	888(2)	87(1)
C(13)	3913(2)	2853(3)	975(2)	72(1)
C(14)	3266(1)	2528(2)	2304(2)	54(1)
C(15)	2759(2)	3065(3)	2738(2)	81(1)
C(16)	2984(3)	1241(3)	2030(3)	87(1)
C(17)	4024(2)	2399(3)	2832(2)	76(1)

Table 13. Bond lengths [Å] and angles [deg] for allyl. (compound 3)

C(1)-C(3)	1.525(4)
C(1)-C(4)	1.530(4)
C(1)-C(2)	1.537(3)
C(1)-Si(5)	1.903(3)
Si(5)-C(7)	1.866(3)
Si(5)-C(6)	1.869(3)
Si(5)-C(8)	1.903(2)
C(8)-C(9)	1.504(3)
C(8)-C(8)#1	1.571(4)
C(9)-C(10)	1.324(3)
C(10)-Si(11)	1.863(2)
Si(11)-C(13)	1.865(3)
Si(11)-C(12)	1.868(3)
Si(11)-C(14)	1.889(2)
C(14)-C(15)	1.529(4)
C(14)-C(17)	1.532(4)
C(14)-C(16)	1.538(4)
C(3)-C(1)-C(4)	109.0(3)
C(3)-C(1)-C(2)	109.1(3)
C(4)-C(1)-C(2)	107.1(3)
C(3)-C(1)-Si(5)	110.5(2)
C(4)-C(1)-Si(5)	112.0(2)
C(2)-C(1)-Si(5)	109.1(2)
C(7)-Si(5)-C(6)	108.62(19)
C(7)-Si(5)-C(8)	107.73(13)
C(6)-Si(5)-C(8)	108.63(13)
C(7)-Si(5)-C(1)	111.03(15)
C(6)-Si(5)-C(1)	108.09(15)
C(8)-Si(5)-C(1)	112.65(10)
C(9)-C(8)-C(8)#1	113.99(11)
C(9)-C(8)-Si(5)	110.11(14)
C(8)#1-C(8)-Si(5)	110.52(16)
C(10)-C(9)-C(8)	127.6(2)
C(9)-C(10)-Si(11)	125.12(18)
C(10)-Si(11)-C(13)	109.67(13)
C(10)-Si(11)-C(12)	108.02(15)
C(13)-Si(11)-C(12)	109.9(2)
C(10)-Si(11)-C(14)	109.72(11)
C(13)-Si(11)-C(14)	109.49(15)
C(12)-Si(11)-C(14)	109.97(15)
C(15)-C(14)-C(17)	108.3(3)
C(15)-C(14)-C(16)	108.0(3)
C(17)-C(14)-C(16)	108.9(3)
C(15)-C(14)-Si(11)	110.88(19)
C(17)-C(14)-Si(11)	109.53(17)
C(16)-C(14)-Si(11)	111.2(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,y,-z+1/2

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

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
C(1)	58(2)	55(1)	43(1)	10(1)	7(1)	-4(1)
C(2)	97(3)	75(2)	51(2)	18(2)	8(2)	-12(2)
C(3)	64(2)	96(3)	78(2)	23(2)	9(2)	17(2)
C(4)	104(3)	74(2)	51(2)	1(2)	-2(2)	-26(2)
Si(5)	47(1)	41(1)	42(1)	3(1)	12(1)	-7(1)
C(6)	93(3)	57(2)	63(2)	7(2)	11(2)	-35(2)
C(7)	62(2)	95(3)	67(2)	10(2)	32(2)	8(2)
C(8)	39(1)	30(1)	42(1)	-2(1)	12(1)	2(1)
C(9)	46(1)	32(1)	41(1)	3(1)	11(1)	0(1)
C(10)	46(1)	40(1)	49(1)	5(1)	12(1)	-3(1)
Si(11)	44(1)	42(1)	54(1)	-1(1)	4(1)	-9(1)
C(12)	69(2)	84(2)	88(3)	14(2)	-18(2)	-14(2)
C(13)	88(3)	66(2)	65(2)	-17(2)	26(2)	-16(2)
C(14)	52(2)	38(1)	76(2)	4(1)	25(1)	-3(1)
C(15)	93(3)	65(2)	102(3)	12(2)	55(2)	6(2)
C(16)	103(3)	48(2)	112(3)	-3(2)	34(3)	-20(2)
C(17)	73(2)	75(2)	77(2)	28(2)	12(2)	5(2)

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

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	4342(15)	9390(20)	180(16)	75(9)
H(2B)	3960(20)	8560(30)	-480(20)	120(14)
H(2C)	4780(20)	8250(30)	-220(20)	126(13)
H(3A)	3617(18)	9030(30)	1043(18)	112(12)
H(3B)	3072(19)	8380(30)	300(20)	104(11)
H(3C)	3290(18)	7590(30)	1044(19)	105(12)
H(4A)	3470(20)	6810(30)	-390(20)	126(12)
H(4B)	3727(18)	5980(30)	318(18)	98(12)
H(4C)	4327(19)	6390(30)	-130(20)	110(13)
H(6A)	4930(20)	9600(30)	1700(20)	116(14)
H(6B)	5504(16)	9380(30)	1309(17)	89(10)
H(6C)	5670(17)	9050(30)	2075(18)	82(10)
H(7A)	5802(19)	7070(30)	700(20)	133(13)
H(7B)	6001(19)	6400(30)	1500(20)	107(14)
H(7C)	5430(17)	5880(30)	910(18)	91(12)
H(8)	4306(11)	7146(18)	2283(11)	38(5)
H(9)	4684(12)	4895(18)	1788(11)	45(6)
H(10)	3344(12)	5665(19)	2013(12)	51(6)
H(12A)	2453(19)	4190(30)	480(20)	112(13)
H(12B)	2070(30)	4240(40)	1210(30)	180(20)
H(12C)	2120(20)	3010(40)	690(20)	154(15)
H(13A)	3930(20)	3340(30)	600(20)	137(16)
H(13B)	4390(20)	2650(30)	1260(20)	102(13)
H(13C)	3750(20)	1980(30)	780(20)	128(12)
H(15A)	2904(15)	3900(30)	2948(16)	84(9)
H(15B)	2260(20)	3130(30)	2340(20)	113(13)
H(15C)	2721(16)	2590(20)	3130(17)	81(9)
H(16A)	2588(17)	1270(20)	1612(18)	77(11)
H(16B)	2992(18)	750(30)	2513(19)	116(12)
H(16C)	3325(18)	910(30)	1744(18)	104(11)
H(17A)	4210(20)	3240(40)	3080(20)	148(16)
H(17B)	4301(17)	2000(30)	2527(19)	103(11)
H(17C)	4018(15)	1890(30)	3260(17)	79(8)

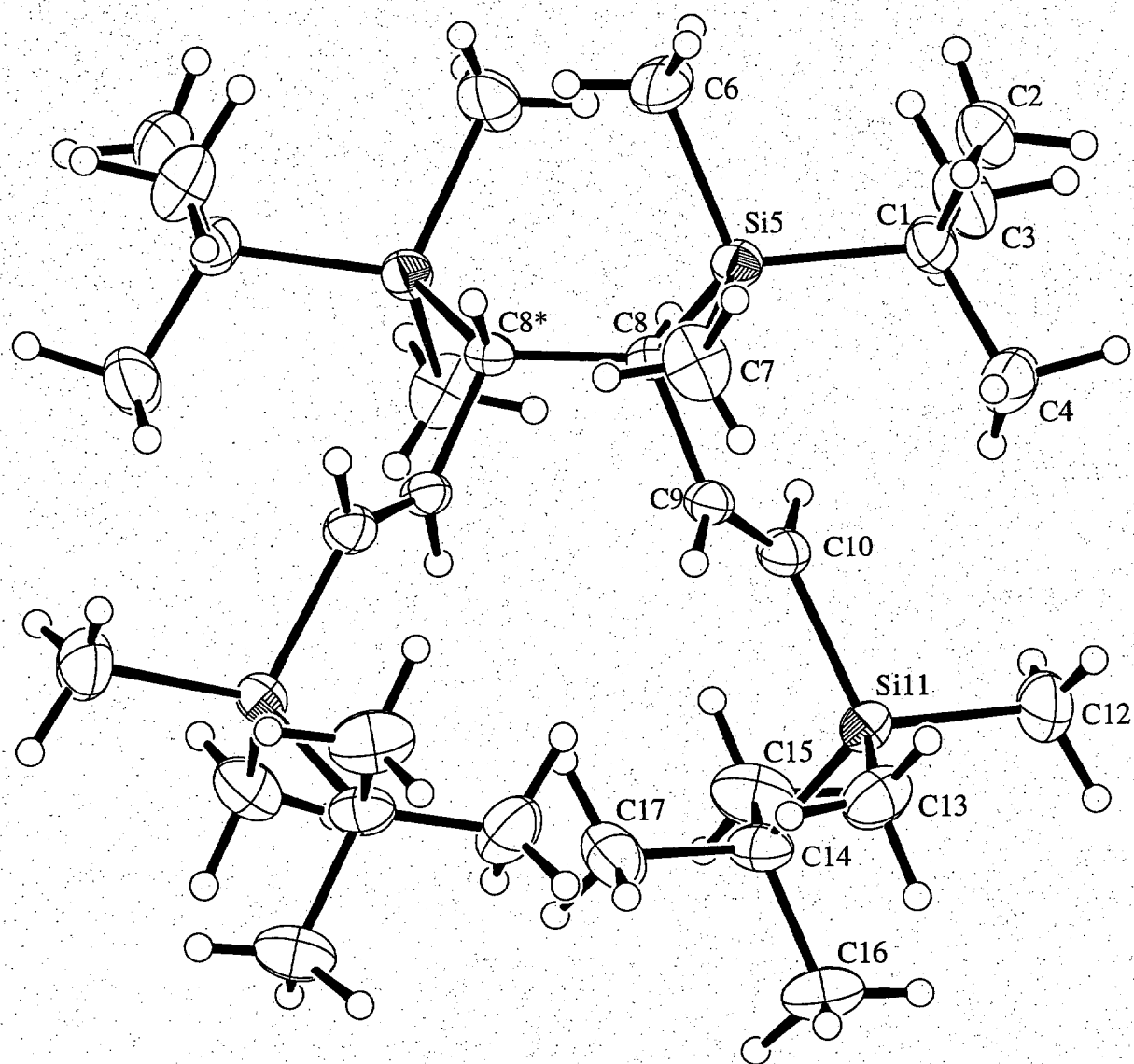


Figure 1S

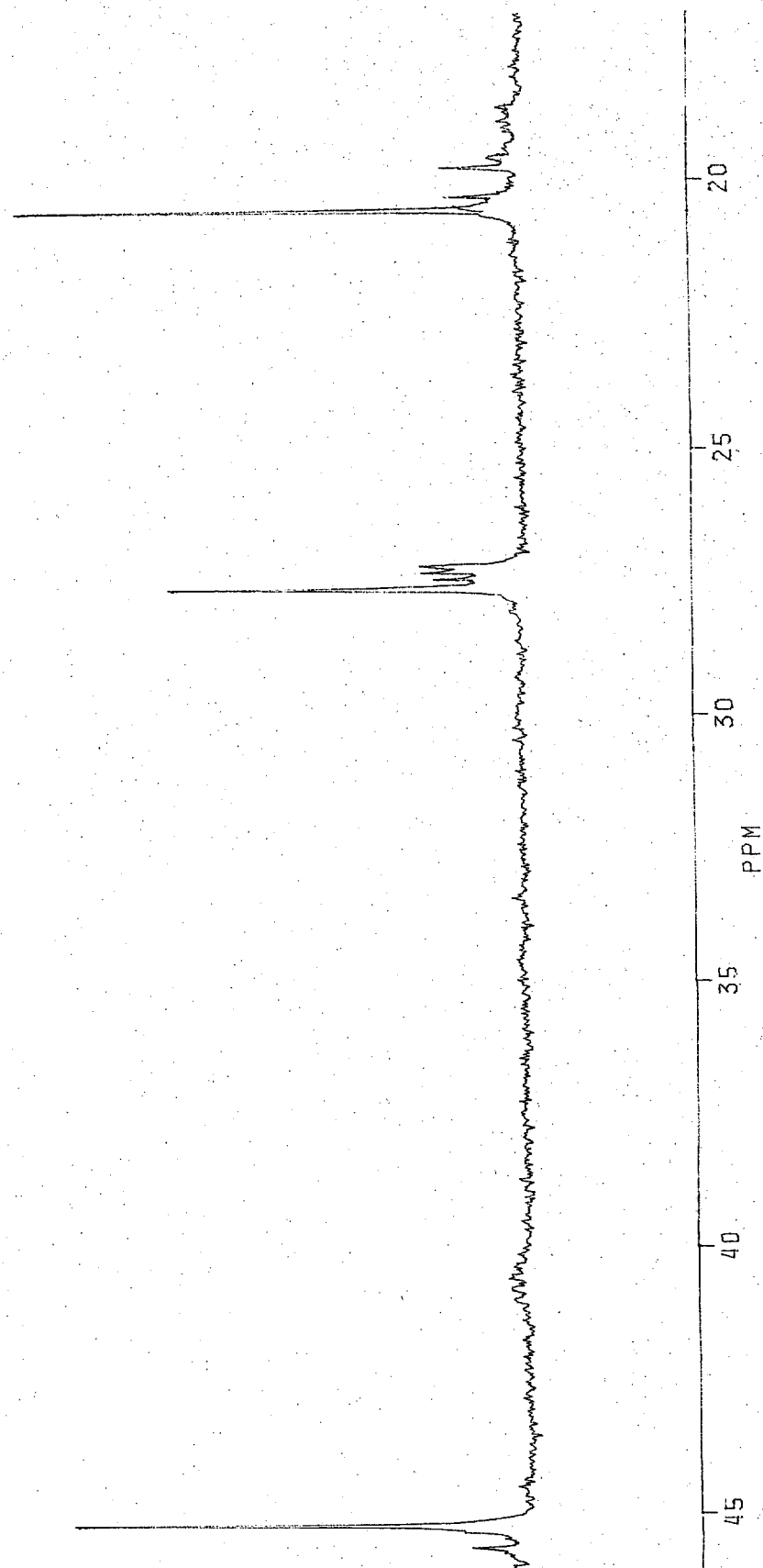
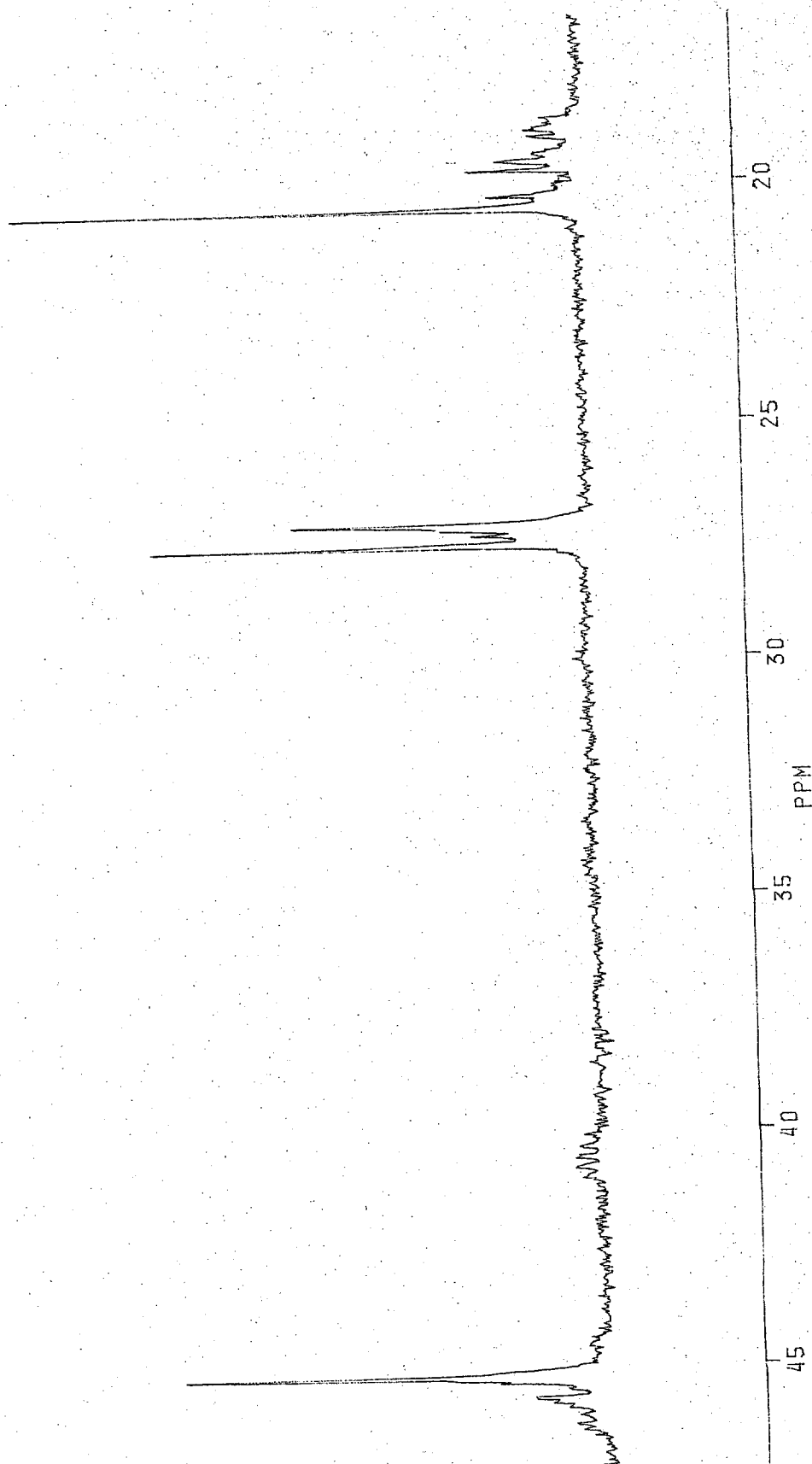


Figure 2S



DSC (PL)

SMPL ID p2
 RUN ID 1
 SIZE 4.400 mg
 OPERATOR biswajit
 DATE RUN Jan/17/2000
 GAS 1 N2
 GAS 2
 COMMENT

Rheometric Scientific

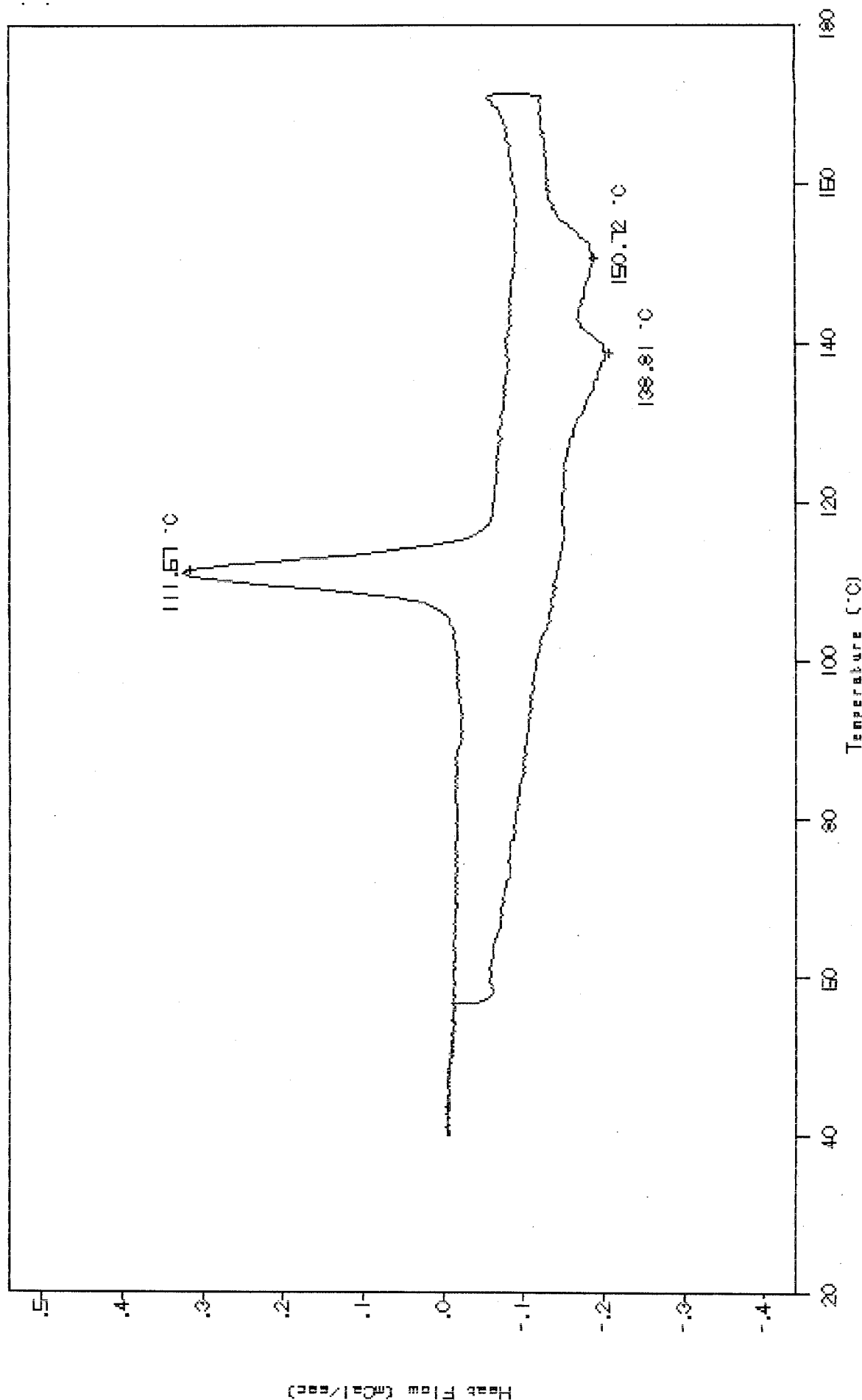
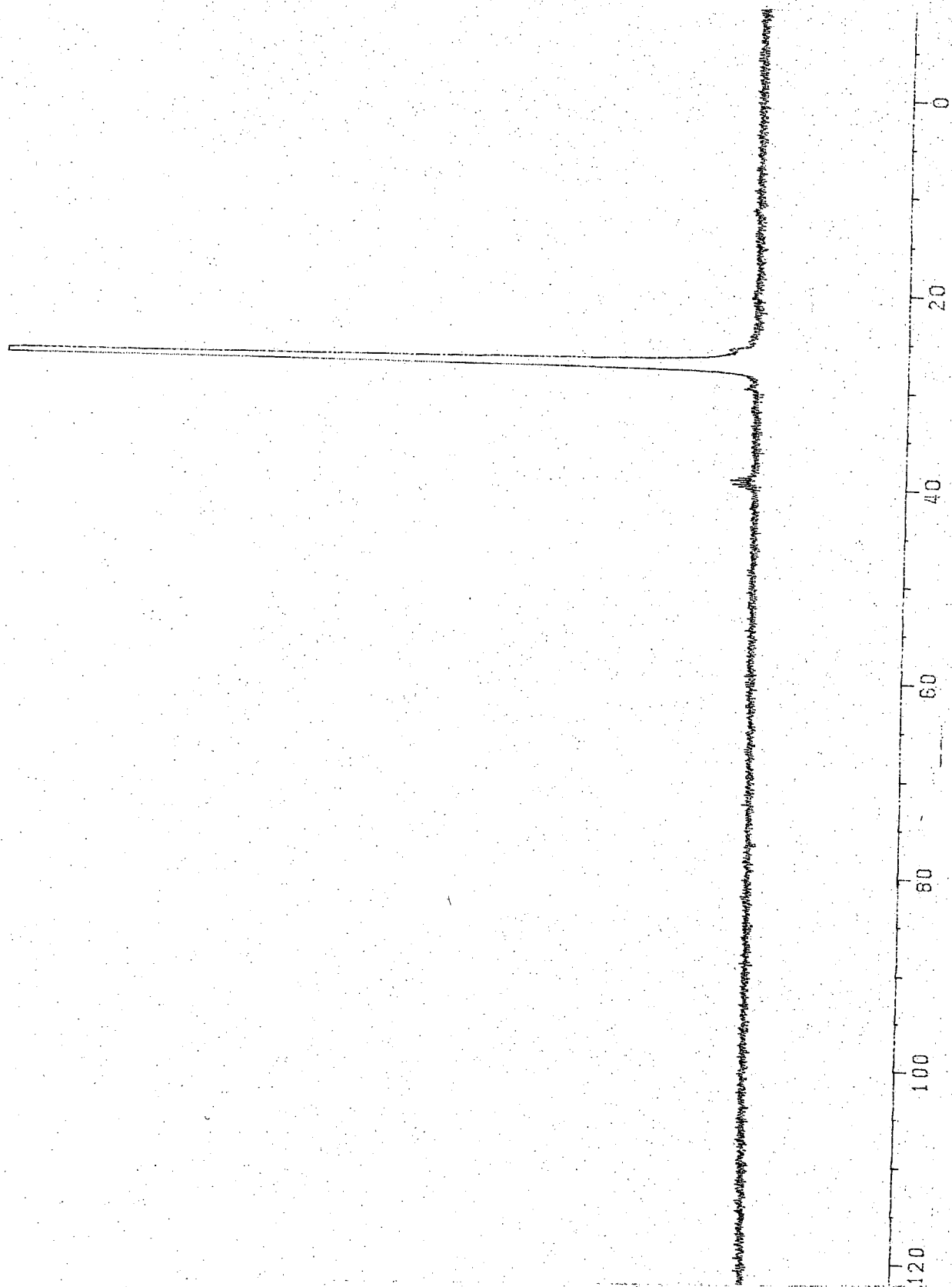


Figure 3S

39

Figure 4S



DSC (PL)

geometricScientific

SMPL ID e1
 RUN ID 1
 SIZE 5.900 mg
 OPERATOR biswasjit
 DATE RUN Mar/14/2000
 GAS 1 N2
 GAS 2
 COMMENT

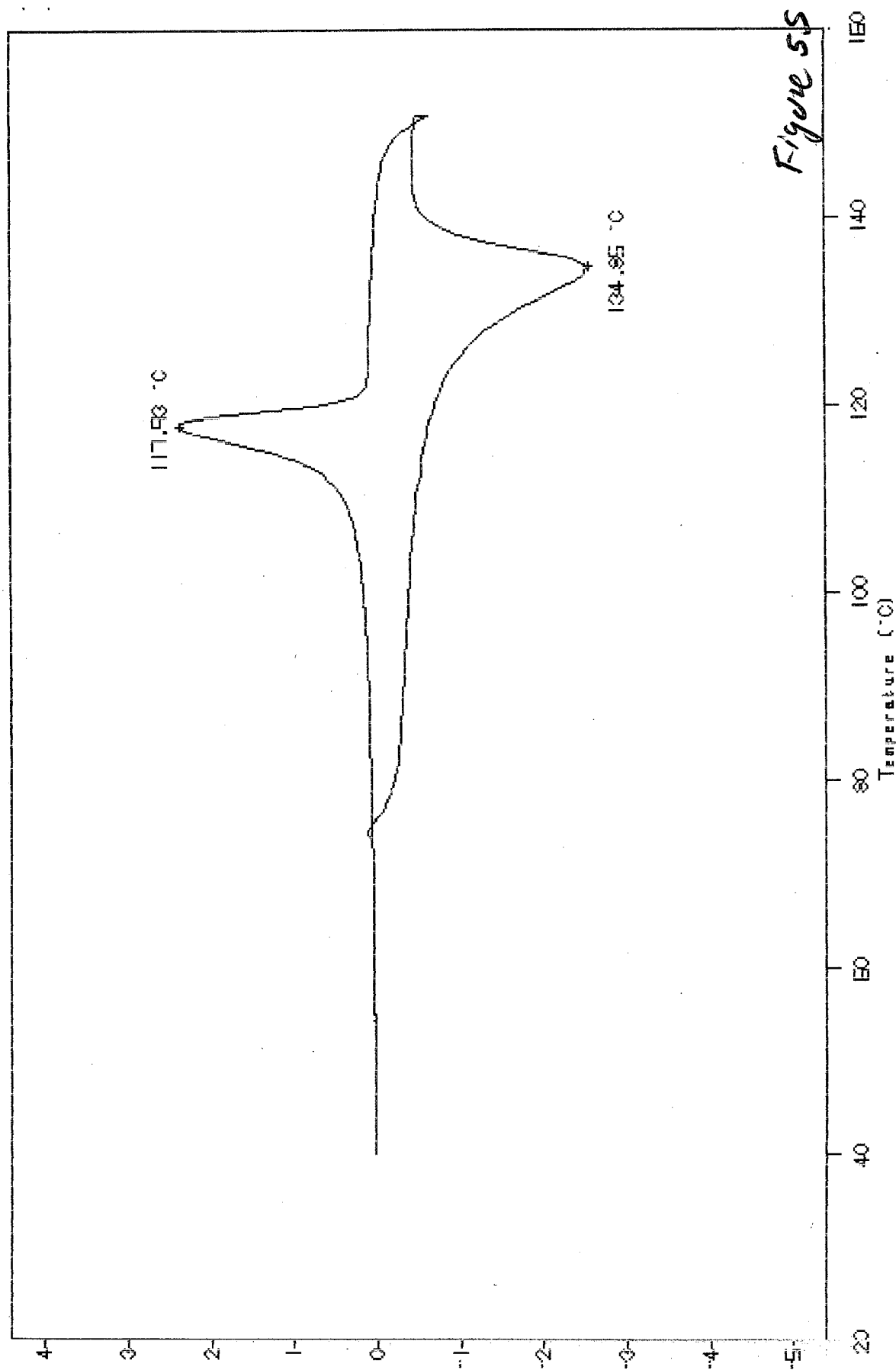


Figure S5