Supplementary Material

Compound **1a**

S2

Table 1. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1a. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Si	19(1)	18(1)	23(1)	-3(1)	5(1)	1(1)
F(1)	25(1)	34(1)	37(1)	-8(1)	7(1)	9(1)
F(2)	21(1)	26(1)	32(1)	-7(1)	2(1)	4(1)
F(3)	32(1)	41(1)	24(1)	-2(1)	8(1)	-2(1)
N	18(1)	17(1)	18(1)	-1(1)	3(1)	-1(1)
C(1)	25(1)	18(1)	29(1)	-3(1)	-1(1)	4(1)
C(2)	36(1)	24(1)	43(1)	-3(1)	13(1)	-5(1)
C(11)	23(1)	26(1)	18(1)	-1(1)	7(1)	-6(1)
C(12)	23(1)	30(1)	26(1)	-7(1)	11(1)	-2(1)
C(13)	29(1)	20(1)	33(1)	-7(1)	11(1)	-2(1)
C(14)	28(1)	20(1)	28(1)	3(1)	9(1)	-2(1)
C(15)	19(1)	24(1)	20(1)	-1(1)	7(1)	-3(1)
C(16)	35(1)	40(1)	28(1)	0(1)	11(1)	-17(1)
C(17)	35(1)	33(1)	19(1)	2(1)	2(1)	-6(1)
C(18)	30(1)	41(1)	21(1)	-3(1)	11(1)	-6(1)
C(19)	19(1)	36(1)	29(1)	-4(1)	7(1)	-3(1)

S3

Table 2. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1a.

	x	y	z	U(eq)
H	6622(15)	5318(12)	1039(12)	20(3)
H(1B)	9065(17)	4004(14)	1527(13)	32
H(1A)	8000(16)	3528(14)	2055(13)	32
H(2C)	6860(20)	768(19)	719(15)	52
H(2B)	5820(20)	1545(18)	1031(16)	52
H(2A)	5420(20)	1225(18)	-57(16)	52
H(12B)	6452(17)	6988(14)	3257(13)	31
H(12A)	5669(17)	6941(14)	2046(13)	31
H(13B)	8525(18)	7810(14)	2886(13)	32
H(13A)	7201(17)	8630(16)	2360(12)	32
H(14B)	8406(17)	8160(14)	1074(12)	30
H(14A)	6819(17)	7615(14)	694(12)	30
H(16C)	5500(20)	4858(18)	3179(16)	51
H(16B)	5090(20)	4718(17)	1924(16)	51
H(16A)	6150(20)	3800(19)	2601(16)	51
H(17C)	9206(19)	5864(17)	3714(14)	46
H(17B)	8848(19)	4431(18)	3555(14)	46
H(17A)	8048(19)	5258(17)	4173(15)	46
H(18C)	7280(20)	5981(17)	-416(14)	45
H(18B)	8732(19)	5201(17)	-81(15)	45
H(18A)	8790(20)	6647(17)	-245(15)	45
H(19C)	10205(19)	6482(16)	2597(15)	42
H(19B)	10503(19)	5446(16)	1832(14)	42
H(19A)	10522(19)	6818(16)	1511(15)	42

S4

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 1a.

Si-F(3)	1.6212(8)
Si-F(1)	1.6999(8)
Si-F(2)	1.7257(7)
Si-C(2)	1.8639(13)
Si-C(1)	1.9098(12)
N-H	0.881(14)
N-C(1)	1.5147(13)
N-C(15)	1.5547(13)
N-C(11)	1.5571(13)
C(1)-H(1B)	0.939(16)
C(1)-H(1A)	0.946(16)
C(2)-H(2B)	0.85(2)
C(2)-H(2C)	0.92(2)
C(2)-H(2A)	0.97(2)
C(11)-C(17)	1.5270(16)
C(11)-C(12)	1.5304(16)
C(11)-C(16)	1.5339(15)
C(12)-H(12A)	0.946(16)
C(12)-H(12B)	0.958(16)
C(12)-C(13)	1.5197(16)
C(13)-H(13B)	0.944(17)
C(13)-H(13A)	0.956(16)
C(13)-C(14)	1.5169(16)
C(14)-H(14B)	0.971(16)
C(14)-H(14A)	0.982(15)
C(14)-C(15)	1.5299(15)
C(15)-C(18)	1.5270(15)
C(15)-C(19)	1.5301(15)
C(16)-H(16B)	0.92(2)
C(16)-H(16A)	0.93(2)
C(16)-H(16C)	1.01(2)
C(17)-H(17B)	0.957(19)
C(17)-H(17A)	0.968(19)
C(17)-H(17C)	0.971(18)
C(18)-H(18C)	0.940(18)
C(18)-H(18A)	0.965(19)
C(18)-H(18B)	0.994(19)
C(19)-H(19A)	0.956(18)
C(19)-H(19B)	0.960(18)
C(19)-H(19C)	0.981(18)
F(3)-Si-F(1)	89.26(5)
F(3)-Si-F(2)	88.17(5)
F(1)-Si-F(2)	173.51(4)
F(3)-Si-C(2)	118.64(6)
F(1)-Si-C(2)	93.33(5)
F(2)-Si-C(2)	93.13(5)
F(3)-Si-C(1)	123.60(5)
F(1)-Si-C(1)	86.71(5)
F(2)-Si-C(1)	89.75(5)
C(2)-Si-C(1)	117.75(6)
H-N-C(1)	106.5(9)
H-N-C(15)	104.9(9)
C(1)-N-C(15)	111.33(8)
H-N-C(11)	102.1(9)
C(1)-N-C(11)	113.08(8)
C(15)-N-C(11)	117.52(8)
H(1B)-C(1)-H(1A)	104.8(13)
H(1B)-C(1)-N	109.5(9)
H(1A)-C(1)-N	106.7(9)
H(1B)-C(1)-Si	109.4(10)
H(1A)-C(1)-Si	104.3(9)

S5

N-C(1)-Si	120.90(7)
H(2B)-C(2)-H(2C)	110.3(17)
H(2B)-C(2)-H(2A)	100.5(16)
H(2C)-C(2)-H(2A)	107.0(16)
H(2B)-C(2)-Si	113.2(13)
H(2C)-C(2)-Si	114.9(12)
H(2A)-C(2)-Si	109.8(11)
C(17)-C(11)-C(12)	111.60(9)
C(17)-C(11)-C(16)	110.43(10)
C(12)-C(11)-C(16)	107.83(10)
C(17)-C(11)-N	112.34(9)
C(12)-C(11)-N	108.23(8)
C(16)-C(11)-N	106.16(9)
H(12A)-C(12)-H(12B)	107.2(13)
H(12A)-C(12)-C(13)	107.0(10)
H(12B)-C(12)-C(13)	111.2(9)
H(12A)-C(12)-C(11)	110.2(9)
H(12B)-C(12)-C(11)	106.8(9)
C(13)-C(12)-C(11)	114.17(9)
H(13B)-C(13)-H(13A)	106.6(13)
H(13B)-C(13)-C(14)	110.8(10)
H(13A)-C(13)-C(14)	110.6(9)
H(13B)-C(13)-C(12)	110.7(9)
H(13A)-C(13)-C(12)	109.3(9)
C(14)-C(13)-C(12)	108.76(9)
H(14B)-C(14)-H(14A)	106.3(13)
H(14B)-C(14)-C(13)	111.4(9)
H(14A)-C(14)-C(13)	110.2(9)
H(14B)-C(14)-C(15)	106.4(9)
H(14A)-C(14)-C(15)	108.7(9)
C(13)-C(14)-C(15)	113.47(9)
C(18)-C(15)-C(14)	108.66(9)
C(18)-C(15)-C(19)	109.88(9)
C(14)-C(15)-C(19)	110.47(9)
C(18)-C(15)-N	106.28(9)
C(14)-C(15)-N	108.12(8)
C(19)-C(15)-N	113.26(9)
H(16B)-C(16)-H(16A)	107.5(16)
H(16B)-C(16)-H(16C)	108.7(15)
H(16A)-C(16)-H(16C)	110.3(16)
H(16B)-C(16)-C(11)	112.0(12)
H(16A)-C(16)-C(11)	110.8(12)
H(16C)-C(16)-C(11)	107.5(11)
H(17B)-C(17)-H(17A)	108.1(15)
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.6(15)
H(17A)-C(17)-H(17C)	107.5(15)
H(17B)-C(17)-C(11)	112.2(11)
H(17A)-C(17)-C(11)	105.2(11)
H(17C)-C(17)-C(11)	113.8(11)
H(18C)-C(18)-H(18A)	111.0(16)
H(18C)-C(18)-H(18B)	108.5(15)
H(18A)-C(18)-H(18B)	106.5(14)
H(18C)-C(18)-C(15)	111.2(11)
H(18A)-C(18)-C(15)	108.1(11)
H(18B)-C(18)-C(15)	111.5(11)
H(19A)-C(19)-H(19B)	106.2(14)
H(19A)-C(19)-H(19C)	110.3(15)
H(19B)-C(19)-H(19C)	109.1(14)
H(19A)-C(19)-C(15)	105.4(11)
H(19B)-C(19)-C(15)	113.3(10)
H(19C)-C(19)-C(15)	112.3(10)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Supplementary Material

Compound **3a**

S8

Table 1. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 3a.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
-2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Si	32(1)	26(1)	27(1)	1(1)	11(1)	1(1)
F	43(1)	38(1)	29(1)	5(1)	9(1)	4(1)
O	30(1)	29(1)	33(1)	1(1)	15(1)	4(1)
N(1)	31(1)	22(1)	28(1)	1(1)	14(1)	2(1)
N(2)	39(1)	36(1)	29(1)	-1(1)	17(1)	-1(1)
N(3)	37(1)	29(1)	42(1)	-5(1)	20(1)	-4(1)
C(1)	32(1)	28(1)	27(1)	5(1)	10(1)	3(1)
C(2)	36(1)	32(1)	39(1)	0(1)	13(1)	-2(1)
C(3)	36(1)	30(1)	32(1)	3(1)	21(1)	3(1)
C(4)	47(1)	36(1)	30(1)	6(1)	20(1)	6(1)
C(5)	51(2)	37(1)	30(1)	-1(1)	16(1)	2(1)
C(6)	45(1)	37(2)	35(1)	-4(1)	14(1)	-7(1)
C(7)	42(1)	26(1)	33(1)	-2(1)	19(1)	-6(1)
C(8)	43(1)	32(1)	42(1)	7(1)	22(1)	-3(1)
C(9)	45(1)	48(2)	47(1)	2(1)	27(1)	12(1)
C(10)	52(2)	47(2)	40(1)	-2(1)	25(1)	-15(1)
C(11)	67(2)	26(1)	42(1)	2(1)	22(1)	1(1)
C(12)	29(1)	24(1)	38(1)	-7(1)	17(1)	-2(1)
C(13)	29(1)	24(1)	48(1)	-3(1)	15(1)	-2(1)
C(14)	35(1)	34(2)	49(1)	4(1)	16(1)	5(1)
C(15)	43(2)	50(2)	55(2)	14(1)	12(1)	7(1)
C(16)	38(2)	50(2)	85(2)	20(2)	18(2)	12(1)
C(17)	39(1)	45(2)	93(2)	11(2)	34(2)	12(1)
C(18)	38(1)	34(2)	66(2)	-1(1)	27(1)	2(1)

Table 2. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 3a.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	2239(15)	9960(30)	2250(17)	31
H(2)	2135(16)	9220(30)	-710(20)	41
H(1A)	1269	11762	824	36
H(1B)	707	10579	1154	36
H(2A)	404	7308	594	55
H(2B)	1116	6159	531	55
H(2C)	415	6908	-469	55
H(4A)	2067	10066	4554	44
H(4B)	2624	9290	4038	44
H(5A)	2502	12730	4366	48
H(5B)	3299	11610	4966	48
H(6A)	3512	11191	3511	47
H(6B)	3493	13118	3704	47
H(8A)	1036	8196	3271	56
H(8B)	1550	7911	2606	56
H(8C)	644	8712	2115	56
H(9A)	1142	12561	3352	66
H(9B)	567	11048	3362	66
H(9C)	496	11795	2319	66
H(10A)	2450	12619	1051	66
H(10B)	3091	11239	1696	66
H(10C)	3318	13140	1926	66
H(11A)	2331	14860	2341	68
H(11B)	1839	14049	2931	68
H(11C)	1479	13904	1738	68
H(14)	3400	7457	3234	48
H(15)	4583	6269	4457	62
H(16)	5586	5066	4016	72
H(17)	5390	5033	2346	68
H(18)	4239	6283	1122	53

S10

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 3a.

Si-F	1.6868(14)
Si-N(2)	1.740(2)
Si-C(2)	1.869(2)
Si-O	1.8713(16)
Si-C(1)	1.927(2)
O-C(12)	1.347(3)
N(1)-H(1)	0.92(3)
N(1)-C(1)	1.518(3)
N(1)-C(7)	1.547(3)
N(1)-C(3)	1.552(3)
N(2)-H(2)	0.87(3)
N(2)-N(3)	1.404(3)
N(3)-C(12)	1.288(3)
C(3)-C(9)	1.525(3)
C(3)-C(8)	1.531(3)
C(3)-C(4)	1.533(3)
C(4)-C(5)	1.523(4)
C(5)-C(6)	1.514(4)
C(6)-C(7)	1.529(3)
C(7)-C(10)	1.525(3)
C(7)-C(11)	1.530(4)
C(12)-C(13)	1.466(3)
C(13)-C(14)	1.393(4)
C(13)-C(18)	1.401(4)
C(14)-C(15)	1.387(4)
C(15)-C(16)	1.386(5)
C(16)-C(17)	1.380(5)
C(17)-C(18)	1.379(4)
F-Si-N(2)	90.34(9)
F-Si-C(2)	95.56(9)
N(2)-Si-C(2)	120.82(11)
F-Si-O	169.83(8)
N(2)-Si-O	81.42(8)
C(2)-Si-O	93.79(9)
F-Si-C(1)	89.24(8)
N(2)-Si-C(1)	124.68(10)
C(2)-Si-C(1)	114.26(11)
O-Si-C(1)	90.56(8)
C(12)-O-Si	111.53(13)
H(1)-N(1)-C(1)	100.2(14)
H(1)-N(1)-C(7)	103.6(16)
C(1)-N(1)-C(7)	113.80(17)
H(1)-N(1)-C(3)	105.3(16)
C(1)-N(1)-C(3)	113.81(17)
C(7)-N(1)-C(3)	117.51(16)
H(2)-N(2)-N(3)	109.1(18)
H(2)-N(2)-Si	129.9(18)
N(3)-N(2)-Si	120.18(15)
C(12)-N(3)-N(2)	107.1(2)
N(1)-C(1)-Si	116.20(15)
C(9)-C(3)-C(8)	109.1(2)
C(9)-C(3)-C(4)	112.23(19)
C(8)-C(3)-C(4)	108.75(19)
C(9)-C(3)-N(1)	112.95(19)
C(8)-C(3)-N(1)	106.64(18)
C(4)-C(3)-N(1)	106.91(18)
C(5)-C(4)-C(3)	114.08(19)
C(6)-C(5)-C(4)	110.05(19)
C(5)-C(6)-C(7)	114.2(2)
C(10)-C(7)-C(6)	108.8(2)
C(10)-C(7)-C(11)	109.4(2)

C(6)-C(7)-C(11)	111.95(19)
C(10)-C(7)-N(1)	107.54(18)
C(6)-C(7)-N(1)	107.21(18)
C(11)-C(7)-N(1)	111.84(19)
N(3)-C(12)-O	118.9(2)
N(3)-C(12)-C(13)	122.2(2)
O-C(12)-C(13)	118.9(2)
C(14)-C(13)-C(18)	118.9(2)
C(14)-C(13)-C(12)	120.8(2)
C(18)-C(13)-C(12)	120.3(2)
C(15)-C(14)-C(13)	120.4(3)
C(16)-C(15)-C(14)	120.3(3)
C(17)-C(16)-C(15)	119.4(3)
C(18)-C(17)-C(16)	121.0(3)
C(17)-C(18)-C(13)	120.0(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

S12

Supplementary Material

Compound **8**

S13

Table 1. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 8.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
-2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Si	32(1)	32(1)	37(1)	2(1)	8(1)	4(1)
F(1)	43(1)	47(1)	41(1)	4(1)	4(1)	9(1)
F(2)	50(1)	32(1)	54(1)	2(1)	17(1)	6(1)
O	31(1)	40(1)	37(1)	-1(1)	11(1)	-5(1)
N(1)	30(1)	49(1)	40(1)	1(1)	0(1)	-1(1)
N(2)	33(1)	45(1)	46(1)	7(1)	10(1)	-2(1)
N(3)	31(1)	35(1)	35(1)	-2(1)	8(1)	1(1)
C(1)	38(1)	36(1)	32(1)	1(1)	6(1)	4(1)
C(2)	44(1)	33(2)	51(2)	1(1)	4(1)	4(1)
C(3)	50(2)	37(2)	63(2)	7(2)	3(2)	7(1)
C(4)	40(1)	57(2)	54(2)	3(2)	-3(1)	9(1)
C(5)	36(1)	49(2)	51(2)	-3(1)	2(1)	0(1)
C(6)	31(1)	39(2)	44(1)	-3(1)	11(1)	-2(1)
C(7)	49(2)	35(2)	70(2)	5(2)	1(2)	-2(1)
C(8)	59(2)	42(2)	58(2)	-13(2)	7(2)	15(2)
C(9)	36(1)	37(2)	48(2)	-5(1)	13(1)	-2(1)
C(10)	34(1)	48(2)	59(2)	-1(2)	20(1)	3(1)
C(11)	32(1)	35(1)	44(1)	0(1)	14(1)	-1(1)
C(12)	41(1)	42(2)	41(1)	0(1)	13(1)	1(1)
C(13)	46(3)	64(7)	52(3)	8(3)	20(2)	0(3)
C(14)	62(3)	82(7)	51(3)	18(3)	27(3)	1(4)
C(15)	85(2)	86(3)	41(2)	4(2)	17(2)	-2(2)
C(16)	76(4)	77(8)	45(3)	-1(3)	1(3)	-16(4)
C(17)	62(4)	58(6)	45(3)	2(3)	9(3)	-18(4)
C(23)	38(5)	49(10)	54(5)	7(6)	20(4)	6(5)
C(24)	63(5)	86(13)	50(6)	12(7)	26(5)	20(7)
C(26)	67(6)	79(14)	39(5)	1(7)	2(5)	-12(8)
C(27)	40(5)	74(14)	34(5)	-8(6)	13(4)	-10(6)

S14

Table 2. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 8.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	5418(18)	-240(30)	5530(10)	29(7)
H(3)	8186(17)	30(30)	6102(10)	37(7)
H(1A)	8004(18)	1200(40)	5303(10)	43
H(1B)	7633(17)	-420(40)	5233(10)	43
H(3A)	8910(20)	-2150(40)	6617(12)	62
H(3B)	9350(20)	-3430(40)	6338(12)	62
H(4A)	10490(20)	-1690(40)	6208(12)	62
H(4B)	10400(20)	-1670(40)	6742(13)	62
H(5A)	9520(20)	530(40)	6736(11)	56
H(5B)	10370(20)	1000(40)	6520(11)	56
H(7A)	7450(20)	-2430(40)	6129(12)	63
H(7B)	7300(20)	-2630(40)	5580(13)	63
H(7C)	7800(20)	-3930(40)	5934(12)	63
H(8A)	9660(20)	-2240(40)	5518(12)	64
H(8B)	8690(20)	-1930(40)	5151(13)	64
H(8C)	8890(20)	-3470(50)	5402(13)	64
H(9A)	8614(19)	3050(40)	5770(11)	47
H(9B)	9410(20)	3210(40)	6176(10)	47
H(9C)	8583(19)	2530(40)	6314(11)	47
H(10A)	9400(20)	1120(40)	5281(12)	55
H(10B)	10140(20)	20(40)	5579(11)	55
H(10C)	10230(20)	1770(40)	5672(11)	55
H(13)	5634	-1257	7026	63
H(14)	5972	-1447	7847	75
H(15)	7259	-373	8276	84
H(15)	7259	-399	8275	84
H(16)	8202	1036	7890	81
H(17)	7872	1249	7070	66
H(23)	5485	-430	7059	55
H(24)	5817	-559	7875	77
H(26)	8371	211	7866	75
H(27)	8042	493	7046	58

S15

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 8.

Si-F(2)	1.6106(16)
Si-F(1)	1.6676(16)
Si-N(1)	1.722(2)
Si-O	1.8142(19)
Si-C(1)	1.906(2)
O-C(11)	1.352(3)
N(1)-N(2)	1.396(3)
N(2)-C(11)	1.276(3)
N(3)-C(1)	1.515(3)
N(3)-C(2)	1.539(3)
N(3)-C(6)	1.548(3)
C(2)-C(3)	1.527(4)
C(2)-C(7)	1.530(4)
C(2)-C(8)	1.531(4)
C(3)-C(4)	1.524(4)
C(4)-C(5)	1.517(4)
C(5)-C(6)	1.531(4)
C(6)-C(9)	1.528(4)
C(6)-C(10)	1.529(3)
C(11)-C(12)	1.469(4)
C(12)-C(17)	1.376(8)
C(12)-C(23)	1.383(12)
C(12)-C(27)	1.391(12)
C(12)-C(13)	1.403(8)
C(13)-C(14)	1.378(8)
C(14)-C(15)	1.367(8)
C(15)-C(24)	1.348(13)
C(15)-C(16)	1.381(8)
C(15)-C(26)	1.381(12)
C(16)-C(17)	1.380(8)
C(23)-C(24)	1.371(13)
C(26)-C(27)	1.381(13)
F(2)-Si-F(1)	92.95(9)
F(2)-Si-N(1)	121.31(10)
F(1)-Si-N(1)	91.31(11)
F(2)-Si-O	91.54(9)
F(1)-Si-O	174.05(8)
N(1)-Si-O	83.01(10)
F(2)-Si-C(1)	110.86(11)
F(1)-Si-C(1)	90.29(10)
N(1)-Si-C(1)	127.63(13)
O-Si-C(1)	91.76(10)
C(11)-O-Si	111.84(15)
N(2)-N(1)-Si	118.88(19)
C(11)-N(2)-N(1)	107.80(19)
C(1)-N(3)-C(2)	113.7(2)
C(1)-N(3)-C(6)	113.89(19)
C(2)-N(3)-C(6)	117.71(18)
N(3)-C(1)-Si	116.51(16)
C(3)-C(2)-C(7)	108.5(2)
C(3)-C(2)-C(8)	111.5(2)
C(7)-C(2)-C(8)	109.7(3)
C(3)-C(2)-N(3)	108.2(2)
C(7)-C(2)-N(3)	107.1(2)
C(8)-C(2)-N(3)	111.7(2)
C(4)-C(3)-C(2)	114.3(3)
C(5)-C(4)-C(3)	109.2(2)
C(4)-C(5)-C(6)	113.8(3)
C(9)-C(6)-C(10)	109.9(2)
C(9)-C(6)-C(5)	108.8(2)
C(10)-C(6)-C(5)	111.6(2)

C(9)-C(6)-N(3)	106.54(18)
C(10)-C(6)-N(3)	112.5(2)
C(5)-C(6)-N(3)	107.4(2)
N(2)-C(11)-O	118.1(2)
N(2)-C(11)-C(12)	123.4(2)
O-C(11)-C(12)	118.5(2)
C(17)-C(12)-C(23)	114.2(9)
C(17)-C(12)-C(27)	17.6(14)
C(23)-C(12)-C(27)	118.0(10)
C(17)-C(12)-C(13)	118.7(6)
C(23)-C(12)-C(13)	18.7(10)
C(27)-C(12)-C(13)	116.1(9)
C(17)-C(12)-C(11)	121.2(5)
C(23)-C(12)-C(11)	121.5(7)
C(27)-C(12)-C(11)	120.5(7)
C(13)-C(12)-C(11)	120.1(4)
C(14)-C(13)-C(12)	119.4(8)
C(15)-C(14)-C(13)	121.1(7)
C(24)-C(15)-C(14)	19.7(13)
C(24)-C(15)-C(16)	115.9(10)
C(14)-C(15)-C(16)	120.0(6)
C(24)-C(15)-C(26)	119.7(10)
C(14)-C(15)-C(26)	116.7(9)
C(16)-C(15)-C(26)	18.4(16)
C(17)-C(16)-C(15)	119.4(8)
C(12)-C(17)-C(16)	121.4(8)
C(24)-C(23)-C(12)	121.4(14)
C(15)-C(24)-C(23)	120.4(14)
C(15)-C(26)-C(27)	120.5(14)
C(26)-C(27)-C(12)	119.9(13)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Supplementary Material

Compound **9-I·CHCl$_3$**

S18

Table 1. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 9-I*CHCl3.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
-2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Si	25(1)	27(1)	25(1)	2(1)	1(1)	0(1)
O(1)	29(1)	32(1)	26(1)	2(1)	1(1)	5(1)
O(2)	26(1)	29(1)	27(1)	0(1)	1(1)	-4(1)
N(1)	30(1)	39(1)	24(1)	-2(1)	1(1)	4(1)
N(2)	29(1)	35(1)	28(1)	2(1)	-2(1)	4(1)
N(3)	30(1)	37(1)	26(1)	3(1)	3(1)	-3(1)
N(4)	27(1)	30(1)	32(1)	4(1)	-2(1)	-2(1)
N(5)	34(1)	24(1)	29(1)	2(1)	0(1)	-4(1)
C(1)	39(1)	33(1)	22(1)	4(1)	-1(1)	-2(1)
C(2)	25(1)	25(1)	30(1)	5(1)	1(1)	-2(1)
C(3)	25(1)	22(1)	32(1)	1(1)	-3(1)	-1(1)
C(4)	33(1)	26(1)	27(1)	5(1)	0(1)	-6(1)
C(5)	38(1)	38(1)	33(1)	1(1)	1(1)	3(1)
C(6)	54(1)	56(2)	32(1)	-5(1)	6(1)	3(1)
C(7)	53(1)	69(2)	29(1)	0(1)	-4(1)	-5(1)
C(8)	39(1)	62(2)	36(1)	8(1)	-8(1)	-2(1)
C(9)	35(1)	42(2)	34(1)	6(1)	1(1)	-1(1)
C(10)	33(1)	26(1)	34(1)	-1(1)	-5(1)	3(1)
C(15)	37(1)	45(2)	45(1)	-6(1)	-7(1)	-2(1)
C(14)	42(1)	65(2)	56(2)	-16(1)	-16(1)	-2(1)
C(13)	58(2)	68(2)	40(1)	-14(1)	-16(1)	11(1)
C(12)	52(1)	60(2)	36(1)	-4(1)	-1(1)	7(1)
C(11)	40(1)	42(2)	33(1)	-2(1)	-5(1)	0(1)
C(16)	42(1)	31(1)	49(1)	8(1)	-2(1)	7(1)
C(17)	68(2)	44(2)	54(2)	13(1)	-17(1)	4(1)
C(18)	95(2)	53(2)	39(1)	21(1)	-4(1)	-5(2)
C(19)	78(2)	48(2)	45(1)	9(1)	20(1)	-11(1)
C(20)	40(1)	38(2)	47(1)	8(1)	8(1)	-10(1)
C(21)	80(2)	35(2)	66(2)	2(1)	11(1)	16(1)
C(22)	36(1)	49(2)	94(2)	16(2)	4(1)	10(1)
C(23)	60(2)	44(2)	68(2)	8(1)	-9(1)	-24(1)
C(24)	38(1)	50(2)	80(2)	10(1)	20(1)	-3(1)
C(25)	44(1)	39(2)	70(2)	-8(1)	6(1)	-2(1)
Cl(1)	88(1)	47(1)	53(1)	-14(1)	-26(1)	18(1)
Cl(2)	43(1)	30(1)	78(1)	-4(1)	17(1)	-3(1)
Cl(3)	37(1)	40(1)	54(1)	-3(1)	-9(1)	-8(1)
Cl(1')	184(9)	106(6)	59(4)	-2(4)	-6(5)	22(6)
Cl(2')	204(5)	51(2)	113(4)	-36(2)	99(3)	-45(2)
Cl(3')	267(8)	59(3)	122(5)	-17(3)	-111(5)	16(5)

S19

Table 2. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 9-I*CHCl3.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	9022(17)	210(30)	9726(9)	37
H(3)	5805(17)	730(30)	10177(9)	37
H	7392(16)	3570(30)	9097(9)	35
H(1A)	7118	4246	10033	38
H(1B)	8380	3996	9984	38
H(5)	7536	2222	11554	44
H(6)	8089	2474	12440	56
H(7)	9813	1671	12760	61
H(8)	10983	623	12192	55
H(9)	10442	356	11308	45
H(15)	4492	-700	8628	51
H(14)	4103	-1467	7766	67
H(13)	5347	-1095	7148	68
H(12)	6971	183	7383	59
H(11)	7364	968	8243	46
H(17A)	6282	4925	8378	68
H(17B)	5873	6584	8516	68
H(18A)	7679	7460	8602	76
H(18B)	7388	6764	8030	76
H(19A)	9069	5806	8379	67
H(19B)	8213	4456	8289	67
H(21A)	5898	7351	9486	90
H(21B)	7165	7498	9414	90
H(21C)	6762	6506	9883	90
H(22A)	4883	5049	9175	90
H(22B)	5574	4190	9639	90
H(22C)	5539	3541	9056	90
H(23A)	9886	6335	9314	87
H(23B)	9135	5942	9775	87
H(23C)	8727	7129	9330	87
H(24A)	10019	3746	8932	83
H(24B)	8979	2664	8911	83
H(24C)	9534	3220	9463	83
H(25A)	8431	7094	6078	61
H(25B)	8524	7266	6125	61

Table 4. Bond lengths [A] and angles [deg] for 9-I*CHCl3.

Si-N(3)	1.7283(17)
Si-N(1)	1.7307(17)
Si-O(1)	1.7826(13)
Si-O(2)	1.8173(13)
Si-C(1)	1.910(2)
O(1)-C(2)	1.348(2)
O(2)-C(3)	1.363(2)
N(1)-H(1)	0.84(2)
N(1)-N(2)	1.408(2)
N(2)-C(2)	1.289(3)
N(3)-H(3)	0.86(2)
N(3)-N(4)	1.402(2)
N(4)-C(3)	1.284(3)
N(5)-H	0.85(2)
N(5)-C(1)	1.520(2)
N(5)-C(20)	1.551(3)
N(5)-C(16)	1.551(3)
C(2)-C(4)	1.467(3)
C(3)-C(10)	1.469(3)
C(4)-C(5)	1.383(3)
C(4)-C(9)	1.408(3)
C(5)-C(6)	1.389(3)
C(6)-C(7)	1.384(3)
C(7)-C(8)	1.380(3)
C(8)-C(9)	1.380(3)
C(10)-C(11)	1.384(3)
C(10)-C(15)	1.401(3)
C(15)-C(14)	1.383(3)
C(14)-C(13)	1.377(4)
C(13)-C(12)	1.385(4)
C(12)-C(11)	1.386(3)
C(16)-C(21)	1.525(4)
C(16)-C(22)	1.525(3)
C(16)-C(17)	1.532(3)
C(17)-C(18)	1.507(4)
C(18)-C(19)	1.512(4)
C(19)-C(20)	1.532(3)
C(20)-C(24)	1.526(3)
C(20)-C(23)	1.531(3)
C(25)-Cl(3')	1.533(7)
C(25)-Cl(1)	1.729(5)
C(25)-Cl(3)	1.747(3)
C(25)-Cl(1')	1.743(13)
C(25)-Cl(2)	1.778(3)
C(25)-Cl(2')	1.822(7)
N(3)-Si-N(1)	127.77(9)
N(3)-Si-O(1)	93.61(7)
N(1)-Si-O(1)	85.59(7)
N(3)-Si-O(2)	84.44(7)
N(1)-Si-O(2)	93.32(7)
O(1)-Si-O(2)	176.52(7)
N(3)-Si-C(1)	116.06(9)
N(1)-Si-C(1)	116.17(9)
O(1)-Si-C(1)	90.10(7)
O(2)-Si-C(1)	93.35(7)
C(2)-O(1)-Si	110.86(11)
C(3)-O(2)-Si	110.73(11)
H(1)-N(1)-N(2)	112.1(14)
H(1)-N(1)-Si	129.9(15)
N(2)-N(1)-Si	115.98(13)
C(2)-N(2)-N(1)	108.05(15)

H(3)-N(3)-N(4)	113.1(15)
H(3)-N(3)-Si	127.7(14)
N(4)-N(3)-Si	117.43(13)
C(3)-N(4)-N(3)	108.56(15)
H-N(5)-C(1)	100.9(15)
H-N(5)-C(20)	102.3(15)
C(1)-N(5)-C(20)	113.49(14)
H-N(5)-C(16)	106.2(14)
C(1)-N(5)-C(16)	113.79(16)
C(20)-N(5)-C(16)	117.63(17)
N(5)-C(1)-Si	117.13(14)
N(2)-C(2)-O(1)	119.14(16)
N(2)-C(2)-C(4)	122.36(16)
O(1)-C(2)-C(4)	118.49(17)
N(4)-C(3)-O(2)	118.46(16)
N(4)-C(3)-C(10)	123.60(16)
O(2)-C(3)-C(10)	117.93(17)
C(5)-C(4)-C(9)	118.70(18)
C(5)-C(4)-C(2)	121.15(17)
C(9)-C(4)-C(2)	120.15(18)
C(4)-C(5)-C(6)	120.71(19)
C(7)-C(6)-C(5)	120.1(2)
C(8)-C(7)-C(6)	119.8(2)
C(7)-C(8)-C(9)	120.6(2)
C(8)-C(9)-C(4)	120.2(2)
C(11)-C(10)-C(15)	118.39(19)
C(11)-C(10)-C(3)	121.00(17)
C(15)-C(10)-C(3)	120.58(19)
C(14)-C(15)-C(10)	119.9(2)
C(13)-C(14)-C(15)	121.0(2)
C(14)-C(13)-C(12)	119.6(2)
C(13)-C(12)-C(11)	119.5(2)
C(10)-C(11)-C(12)	121.5(2)
C(21)-C(16)-C(22)	110.5(2)
C(21)-C(16)-C(17)	112.0(2)
C(22)-C(16)-C(17)	108.71(19)
C(21)-C(16)-N(5)	112.06(18)
C(22)-C(16)-N(5)	106.21(18)
C(17)-C(16)-N(5)	107.17(19)
C(18)-C(17)-C(16)	114.65(19)
C(17)-C(18)-C(19)	108.7(2)
C(18)-C(19)-C(20)	114.0(2)
C(24)-C(20)-C(23)	110.70(19)
C(24)-C(20)-C(19)	108.3(2)
C(23)-C(20)-C(19)	111.0(2)
C(24)-C(20)-N(5)	106.27(18)
C(23)-C(20)-N(5)	112.29(19)
C(19)-C(20)-N(5)	108.02(17)
Cl(3')-C(25)-Cl(1)	121.9(4)
Cl(3')-C(25)-Cl(3)	13.0(4)
Cl(1)-C(25)-Cl(3)	111.5(2)
Cl(3')-C(25)-Cl(1')	117.6(6)
Cl(1)-C(25)-Cl(1')	5.8(5)
Cl(3)-C(25)-Cl(1')	106.7(4)
Cl(3')-C(25)-Cl(2)	108.6(3)
Cl(1)-C(25)-Cl(2)	112.67(19)
Cl(3)-C(25)-Cl(2)	109.16(15)
Cl(1')-C(25)-Cl(2)	112.4(4)
Cl(3')-C(25)-Cl(2')	114.6(4)
Cl(1)-C(25)-Cl(2')	99.5(3)
Cl(3)-C(25)-Cl(2')	112.0(3)
Cl(1')-C(25)-Cl(2')	98.8(5)
Cl(2)-C(25)-Cl(2')	14.0(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Supplementary Material

Compound **9-I·CH_3CN**

S24

Table 1. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 9-I*CH3CN.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
-2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Si	29(1)	29(1)	27(1)	-2(1)	-4(1)	-16(1)
O(1)	34(1)	37(1)	29(1)	4(1)	-5(1)	-23(1)
O(2)	27(1)	35(1)	27(1)	-8(1)	1(1)	-16(1)
N(1)	32(1)	35(2)	26(1)	5(1)	-8(1)	-19(1)
N(2)	35(1)	31(2)	33(1)	1(1)	-2(1)	-15(1)
N(3)	38(1)	43(2)	30(1)	-11(1)	2(1)	-27(1)
N(4)	34(1)	40(2)	32(1)	-7(1)	2(1)	-21(1)
N(5)	29(1)	25(2)	32(1)	-2(1)	-1(1)	-14(1)
C(1)	31(2)	27(2)	33(2)	2(2)	-4(1)	-17(1)
C(2)	31(2)	28(2)	28(2)	-5(2)	1(1)	-13(1)
C(3)	30(2)	28(2)	26(2)	-5(1)	1(1)	-9(1)
C(4)	34(2)	26(2)	32(2)	-4(2)	4(1)	-12(1)
C(5)	38(2)	36(2)	35(2)	-2(2)	-1(2)	-19(2)
C(6)	39(2)	52(2)	49(2)	-6(2)	2(2)	-27(2)
C(7)	47(2)	48(2)	55(2)	-8(2)	12(2)	-30(2)
C(8)	54(2)	44(2)	44(2)	0(2)	9(2)	-24(2)
C(9)	42(2)	39(2)	36(2)	-2(2)	5(2)	-19(2)
C(10)	25(1)	27(2)	30(2)	1(1)	-2(1)	-10(1)
C(11)	32(2)	39(2)	35(2)	-6(2)	0(1)	-15(2)
C(12)	37(2)	51(2)	41(2)	-6(2)	-3(2)	-24(2)
C(13)	31(2)	44(2)	44(2)	5(2)	-2(2)	-18(2)
C(14)	33(2)	41(2)	38(2)	-2(2)	6(2)	-12(2)
C(15)	33(2)	33(2)	35(2)	-5(2)	1(1)	-11(2)
C(16)	35(2)	30(2)	38(2)	7(2)	-4(1)	-13(2)
C(17)	41(2)	29(2)	61(2)	5(2)	4(2)	-17(2)
C(18)	44(2)	30(2)	77(3)	-12(2)	11(2)	-18(2)
C(19)	43(2)	40(2)	57(2)	-13(2)	1(2)	-21(2)
C(20)	29(2)	30(2)	35(2)	-11(2)	2(1)	-10(1)
C(21)	63(2)	49(3)	37(2)	5(2)	-4(2)	-25(2)
C(22)	35(2)	42(3)	64(2)	14(2)	-12(2)	-13(2)
C(23)	43(2)	42(2)	32(2)	-9(2)	-2(2)	-14(2)
C(24)	37(2)	43(2)	53(2)	-14(2)	12(2)	-11(2)
N(1A)	88(3)	62(3)	63(2)	-12(2)	12(2)	-8(2)
C(1A)	58(2)	58(3)	40(2)	-16(2)	4(2)	-17(2)
C(2A)	103(3)	55(3)	64(3)	-7(2)	-11(2)	-17(3)

Table 2. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 9-I*CH3CN.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	5330(30)	5200(30)	9120(20)	35
H(3)	4100(30)	5440(30)	5780(30)	40
H	4150(30)	8330(30)	7510(20)	33
H(1A)	1810(30)	7990(30)	7080(20)	34
H(1B)	2140(30)	7700(30)	8420(20)	34
H(5)	410(30)	5000(30)	7350(30)	42
H(6)	-1430(30)	4190(30)	7730(30)	52
H(7)	-1330(40)	2960(30)	9440(30)	56
H(8)	560(30)	2510(30)	10740(30)	55
H(9)	2390(30)	3410(30)	10350(30)	46
H(11)	7190(30)	7770(30)	7470(20)	41
H(12)	9330(30)	8110(30)	7110(30)	48
H(13)	10820(30)	7430(30)	5510(20)	47
H(14)	10170(30)	6280(30)	4200(30)	46
H(15)	7970(30)	5920(30)	4600(20)	40
H(17A)	4490(40)	10150(30)	6530(30)	52
H(17B)	2970(30)	11320(30)	6010(30)	52
H(18A)	3690(30)	11820(30)	7630(30)	58
H(18B)	2190(40)	11690(30)	7880(30)	58
H(19A)	4870(40)	9790(30)	8520(30)	53
H(19B)	3750(30)	10530(30)	9380(30)	53
H(21A)	2820(40)	9720(30)	4920(30)	58
H(21B)	2540(40)	8510(30)	5460(30)	58
H(21C)	4150(40)	8640(30)	5540(30)	58
H(22A)	610(30)	10780(30)	5860(30)	58
H(22B)	470(40)	9820(30)	6830(30)	58
H(22C)	580(30)	11080(30)	7160(30)	58
H(23A)	5010(30)	7820(30)	9240(30)	47
H(23B)	4150(30)	8550(30)	10300(30)	47
H(23C)	3580(30)	7570(30)	9800(30)	47
H(24A)	1040(40)	9260(30)	9220(30)	54
H(24B)	1750(30)	9880(30)	10060(30)	54
H(24C)	1040(40)	10550(30)	8910(30)	54
H(2A1)	4109	6684	2426	92
H(2A2)	2940	6897	3414	92
H(2A3)	4456	7048	3605	92

S26

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 9-I*CH3CN.

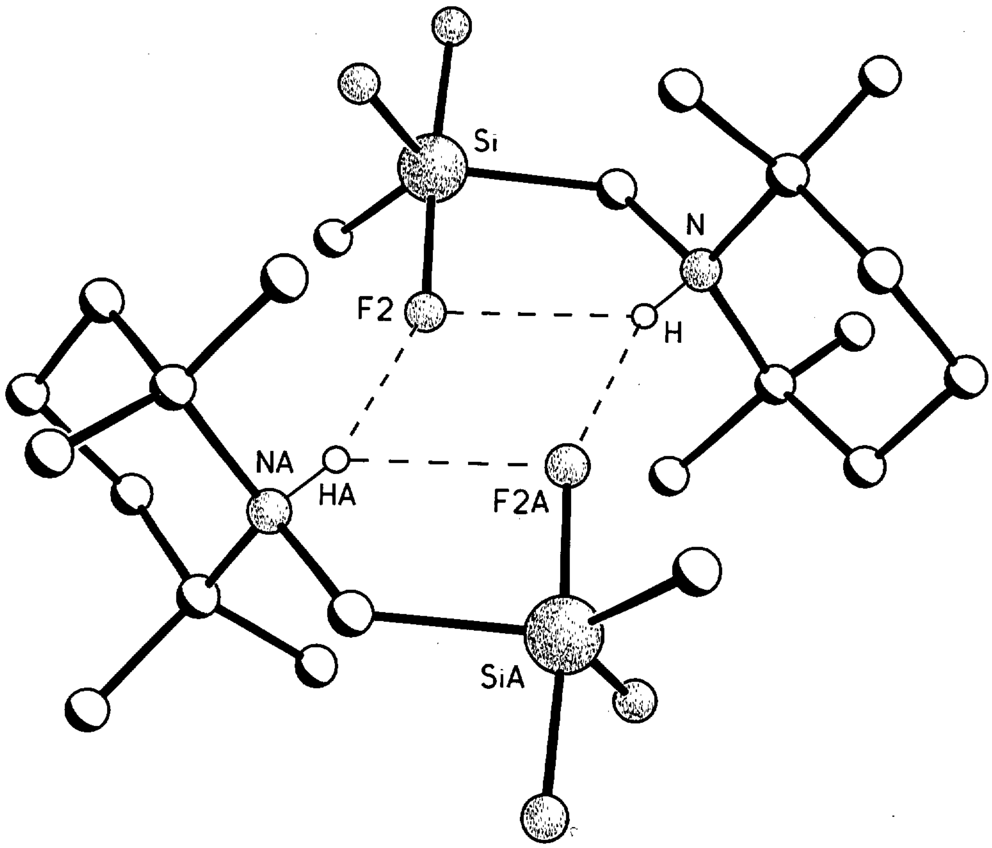
Si-N(1)	1.718(3)
Si-N(3)	1.728(2)
Si-O(1)	1.7609(18)
Si-O(2)	1.8098(18)
Si-C(1)	1.907(3)
O(1)-C(2)	1.345(3)
O(2)-C(3)	1.358(3)
N(1)-H(1)	0.89(3)
N(1)-N(2)	1.422(3)
N(2)-C(2)	1.297(4)
N(3)-H(3)	0.72(3)
N(3)-N(4)	1.403(3)
N(4)-C(3)	1.285(3)
N(5)-H	0.98(3)
N(5)-C(1)	1.530(3)
N(5)-C(16)	1.531(4)
N(5)-C(20)	1.557(3)
C(2)-C(4)	1.471(4)
C(3)-C(10)	1.464(4)
C(4)-C(5)	1.385(4)
C(4)-C(9)	1.391(4)
C(5)-C(6)	1.394(4)
C(6)-C(7)	1.379(5)
C(7)-C(8)	1.386(5)
C(8)-C(9)	1.382(4)
C(10)-C(15)	1.396(4)
C(10)-C(11)	1.397(4)
C(11)-C(12)	1.375(4)
C(12)-C(13)	1.382(4)
C(13)-C(14)	1.377(4)
C(14)-C(15)	1.390(4)
C(16)-C(22)	1.532(4)
C(16)-C(21)	1.533(4)
C(16)-C(17)	1.538(4)
C(17)-C(18)	1.519(5)
C(18)-C(19)	1.500(5)
C(19)-C(20)	1.535(4)
C(20)-C(23)	1.517(5)
C(20)-C(24)	1.534(4)
N(1A)-C(1A)	1.142(5)
C(1A)-C(2A)	1.438(6)
N(1)-Si-N(3)	126.61(13)
N(1)-Si-O(1)	86.09(11)
N(3)-Si-O(1)	92.73(10)
N(1)-Si-O(2)	93.47(11)
N(3)-Si-O(2)	84.03(10)
O(1)-Si-O(2)	175.63(10)
N(1)-Si-C(1)	115.49(13)
N(3)-Si-C(1)	117.90(14)
O(1)-Si-C(1)	91.35(11)
O(2)-Si-C(1)	92.76(11)
C(2)-O(1)-Si	111.19(16)
C(3)-O(2)-Si	110.89(15)
H(1)-N(1)-N(2)	107.0(19)
H(1)-N(1)-Si	135(2)
N(2)-N(1)-Si	115.91(17)
C(2)-N(2)-N(1)	106.9(2)
H(3)-N(3)-N(4)	111(3)
H(3)-N(3)-Si	127(3)
N(4)-N(3)-Si	117.75(16)
C(3)-N(4)-N(3)	107.6(2)

S27

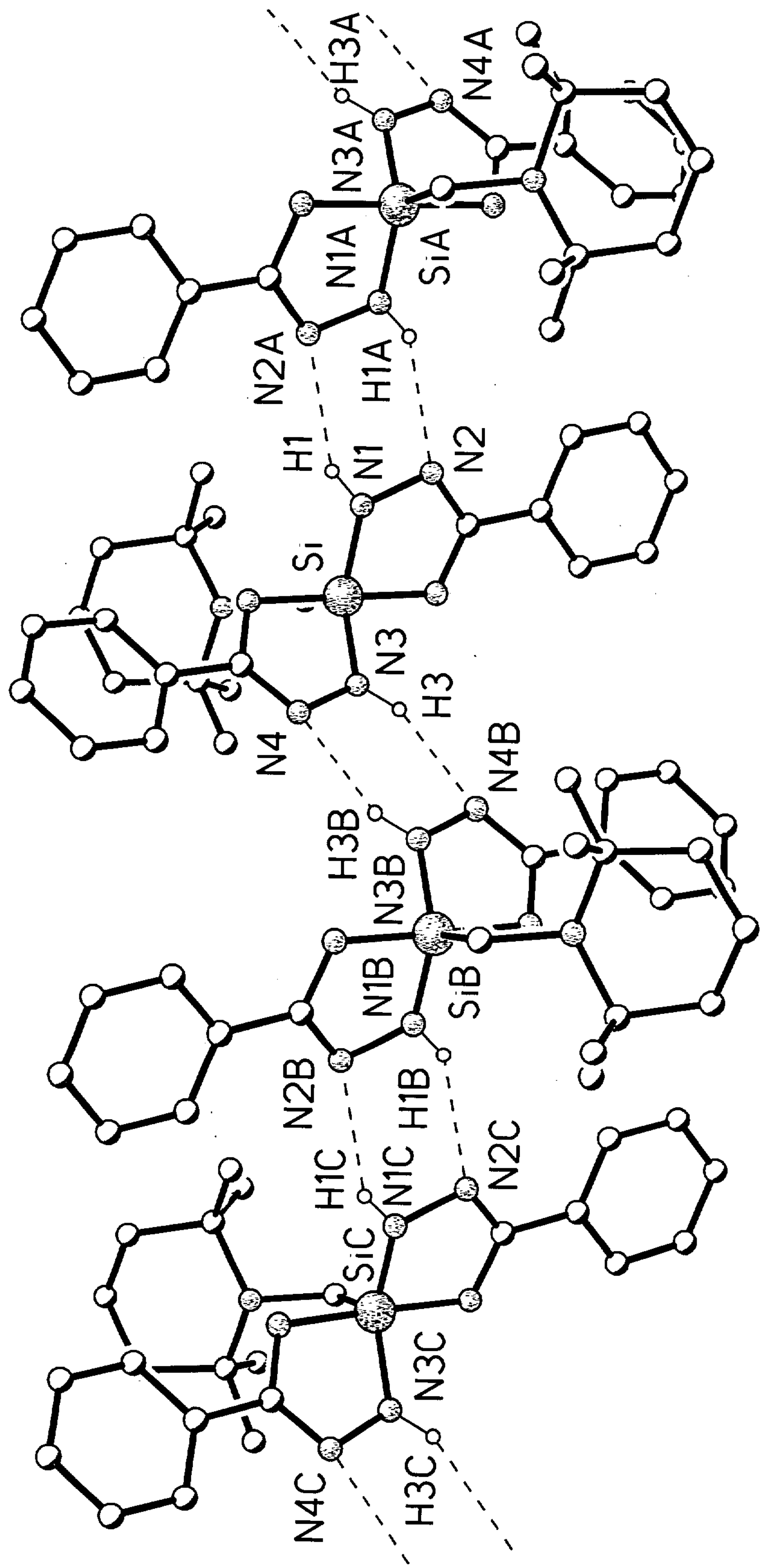
H-N(5)-C(1)	97.5(16)
H-N(5)-C(16)	108.5(17)
C(1)-N(5)-C(16)	113.6(2)
H-N(5)-C(20)	103.3(15)
C(1)-N(5)-C(20)	112.9(2)
C(16)-N(5)-C(20)	118.2(2)
N(5)-C(1)-Si	117.04(18)
N(2)-C(2)-O(1)	119.2(2)
N(2)-C(2)-C(4)	122.5(3)
O(1)-C(2)-C(4)	118.3(2)
N(4)-C(3)-O(2)	118.8(2)
N(4)-C(3)-C(10)	122.6(2)
O(2)-C(3)-C(10)	118.6(2)
C(5)-C(4)-C(9)	119.2(3)
C(5)-C(4)-C(2)	119.2(3)
C(9)-C(4)-C(2)	121.6(3)
C(4)-C(5)-C(6)	120.2(3)
C(7)-C(6)-C(5)	120.1(3)
C(6)-C(7)-C(8)	120.0(3)
C(9)-C(8)-C(7)	120.0(4)
C(8)-C(9)-C(4)	120.5(3)
C(15)-C(10)-C(11)	119.4(2)
C(15)-C(10)-C(3)	120.3(2)
C(11)-C(10)-C(3)	120.2(2)
C(12)-C(11)-C(10)	119.9(3)
C(11)-C(12)-C(13)	120.4(3)
C(14)-C(13)-C(12)	120.5(3)
C(13)-C(14)-C(15)	119.8(3)
C(14)-C(15)-C(10)	120.0(3)
N(5)-C(16)-C(22)	112.3(3)
N(5)-C(16)-C(21)	107.6(3)
C(22)-C(16)-C(21)	110.2(3)
N(5)-C(16)-C(17)	108.0(2)
C(22)-C(16)-C(17)	110.9(3)
C(21)-C(16)-C(17)	107.7(3)
C(18)-C(17)-C(16)	113.1(3)
C(19)-C(18)-C(17)	109.7(3)
C(18)-C(19)-C(20)	114.9(3)
C(23)-C(20)-C(24)	110.3(3)
C(23)-C(20)-C(19)	109.5(3)
C(24)-C(20)-C(19)	110.7(3)
C(23)-C(20)-N(5)	106.7(2)
C(24)-C(20)-N(5)	112.3(2)
C(19)-C(20)-N(5)	107.2(2)
N(1A)-C(1A)-C(2A)	178.3(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

S28



S29



H3A
N4A
N3A
N1A
SiA
N2A
H1A
H1
N1
N2
Si
N3
H3
N4
N4B
H3B
N3B
N1B
SiB
N2B
H1B
H1C
N1C
N2C
SiC
N3C
N4C
H3C