

J-4640-m1

Table S1. Assigned Parameters for 2

x, y, z and $U_{eq}^a \times 10^4$					
Atom	x	y	z	U_{eq}	or B
C21	5008	829	487	12.0	*
C22	5543	530	399	12.0	*
C23	5536	-300	-88	12.0	*
C24	6124	-626	-184	12.0	*
H 6A	795	1908	1217	7.0	*
H 6B	994	603	1391	7.0	*
H 6C	1446	1514	1291	7.0	*
H 7A	433	3851	2382	7.0	*
H 7B	301	3049	1746	7.0	*
H 7C	779	4054	1891	7.0	*
H8A1	1641	4245	3715	7.0	*
H8A2	1464	3287	4136	7.0	*
H8A3	965	3881	3519	7.0	*
H8B1	1731	3655	4091	7.0	*
H8B2	1036	3414	3817	7.0	*
H8B3	1303	4345	3462	7.0	*
H 9A	2804	1953	4059	7.0	*
H 9B	2486	843	4208	7.0	*
H 9C	2339	2088	4419	7.0	*
H11A	1795	-1050	1586	7.0	*
H11B	2478	-1343	1971	7.0	*
H11C	2283	-66	1715	7.0	*
H12A	3148	-152	3360	7.0	*
H12B	2993	-1490	3294	7.0	*
H12C	2847	-728	3827	7.0	*
H14A	966	-2436	3571	7.0	*
H14B	705	-3335	2978	7.0	*
H14C	504	-2019	2871	7.0	*
H15A	2213	-2766	3078	7.0	*
H15B	1801	-3783	3153	7.0	*
H15C	2016	-2801	3705	7.0	*
H16A	753	-2889	1992	7.0	*
H16B	1405	-3378	2152	7.0	*
H16C	1246	-2096	1883	7.0	*
H17A	1394	1979	4900	7.0	*
H17B	1002	1269	5220	7.0	*
H17C	693	1916	4529	7.0	*
H18A	577	-778	4926	7.0	*
H18B	611	-1603	4352	7.0	*
H18C	154	-556	4174	7.0	*
H19A	2167	39	5006	7.0	*
H19B	1900	-1226	4840	7.0	*
H19C	1796	-496	5410	7.0	*

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

*Isotropic displacement parameter, B

J-4640-m2

Table S2. Anisotropic Displacement Parameters for 2

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

The form of the displacement factor is:

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

J-4640-m3

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

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

J-4640-m4

Table S3. (cont.)

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

Table S5. Assigned Parameters for 3

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

J 4640-m5

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

J-4640-m6

Table S6. Anisotropic Displacement Parameters for 3

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

The form of the displacement factor is:

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

Table S7. Distances and Angles not Involving Hydrogen for 3

J-4640-m7

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

Table S7. (con't.)

J-4640-m8

Angle(°)

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

J-4640-m9

Table S4. Observed and Calculated Structure Factors for 2

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

S-4640-m10

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

-22 k 4	1 88 131 -13	2 372 377 -4	1 518 534 -16
	3 298 274 16	4 68 33 4	3 438 425 11
0 347 322 13	-21 k 10	-20 k 11	5 51 52 0
2 135 130 1			
-22 k 5	1 357 345 9	2 271 294 -15	-19 k 11
	3 248 226 12	4 692 663 27	
2 355 332 17	-21 k 11	-20 k 12	1 -92 6 -12
			3 195 183 6
-22 k 6	1 225 219 3	0 -77 25 -6	5 155 97 19
	3 547 487 53	2 138 147 -3	-19 k 12
0 -75 24 -6	-21 k 12	4 255 295 -25	
2 91 58 6			1 284 230 35
-22 k 7	1 148 102 15	-20 k 13	3 -23 39 -2
	3 102 41 11	2 189 226 -20	5 133 106 8
2 240 243 -1	-21 k 13	-20 k 14	-19 k 13
-22 k 8	1 -15 81 -9	0 223 211 4	1 -44 8 -2
		2 310 248 41	3 -13 28 -1
0 83 47 4	-21 k 14	-19 k 1	-19 k 14
2 287 255 20			
-22 k 9	1 296 242 34	1 -67 29 -7	1 376 401 -22
		3 -36 49 -5	3 191 179 6
2 10 111 -16	-20 k 1	5 364 349 12	-19 k 15
-22 k 10	2 179 136 17	-19 k 2	1 -55 32 -5
	4 370 360 8	1 406 456 -48	3 97 80 4
0 563 495 46	-20 k 2	3 547 518 28	-19 k 16
2 131 153 -8		5 159 143 6	
-22 k 12	0 465 423 26	-19 k 3	1 197 203 -2
	2 706 697 9		
0 513 497 11	4 387 358 23	1 -48 42 -6	-18 k 1
		3 256 227 18	
-21 k 1	-20 k 3	5 -95 15 -13	2 126 35 21
			4 63 102 -9
1 193 205 -6	2 75 32 6	-19 k 4	6 89 110 -5
	4 179 123 22		
-21 k 2	-20 k 4	1 138 179 -18	-18 k 2
		3 103 21 14	
1 583 587 -3	0 -35 59 -4	5 -78 18 -9	0 395 453 -42
3 182 187 -2	2 309 313 -2	-19 k 5	2 163 187 -12
	4 -23 4 0		4 101 98 0
-21 k 3	-20 k 5	1 55 127 -19	6 -84 23 -11
		3 339 366 -23	-18 k 3
1 75 125 -13	2 91 33 10	5 226 235 -6	2 136 57 22
3 335 293 31	4 189 176 6	-19 k 6	4 97 155 -21
			6 88 125 -11
-21 k 4	-20 k 6	1 108 30 15	-18 k 4
		3 228 242 -8	
1 281 197 50	0 295 291 1	5 202 255 -32	0 604 576 21
3 53 57 0	2 460 438 19	-19 k 7	2 532 447 82
	4 63 105 -9		4 154 82 24
-21 k 5	-20 k 7	1 24 56 -3	6 -71 29 -8
		3 367 312 44	-18 k 5
1 93 78 3	2 181 206 -12	5 284 243 26	2 157 118 15
3 206 138 31	4 423 465 -41	-19 k 8	4 97 20 13
			6 158 86 24
-21 k 6	-20 k 8	1 661 641 19	-18 k 6
		3 395 414 -17	
1 302 268 24	0 92 31 7	5 89 85 0	0 578 619 -34
3 82 34 7	2 -31 11 -1	-19 k 9	2 619 634 -16
	4 99 105 -1		4 218 167 27
-21 k 7	-20 k 9	1 44 24 1	6 138 108 10
		3 409 430 -19	
1 55 56 0	2 246 247 0	5 446 424 19	-18 k 7
3 -108 74 -24	4 747 718 27		
			2 85 4 10
-21 k 8	-20 k 10		
1 223 211 6	0 337 311 15		
3 -63 58 -10			
-21 k 9			

J 4640-m12

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

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

J-4640-m14

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

8	302	296	5								3	130	75	17	
	-10	k	3	2	952	1013	-63	1	299	337	-53	5	561	548	13
				4	657	675	-20	3	895	906	-12	7	128	133	-1
				6	360	369	-8	5	587	469	114				
2	334	369	-48	8	160	185	-11	7	78	77	0		-9	k	16
4	478	385	113					9	106	84	6				
6	112	107	1		-10	k	14					1	222	199	14
8	251	234	11						-9	k	6	3	408	402	5
				0	733	656	63					5	-61	2	-5
	-10	k	4	2	633	601	35	1	219	334	-151				
				4	332	320	10	3	276	210	64		-9	k	17
0	135	264	-96	6	201	216	-8	5	282	201	50				
2	410	332	99					7	208	198	6	1	325	315	8
4	283	161	102		-10	k	15	9	348	320	23	3	225	268	-28
6	297	274	20									5	524	516	7
8	102	57	11	2	425	384	40		-9	k	7				
				4	229	193	21						-9	k	18
	-10	k	5	6	110	111	0	1	500	502	-3				
								3	1467	1316	108	1	180	125	25
2	322	245	86		-10	k	16	5	491	525	-44	3	61	43	2
4	845	846	-1					7	285	291	-4	5	168	159	3
6	351	350	1	0	-66	23	-5	9	73	117	-11				
8	205	199	3	2	-33	69	-9						-9	k	19
				4	180	199	-10		-9	k	8				
	-10	k	6	6	-48	65	-9					1	310	329	-14
								1	1551	1331	147	3	200	158	21
0	172	31	48		-10	k	17	3	1364	1321	33				
2	821	918	-122					5	368	382	-16		-9	k	20
4	1214	1244	-26	2	171	105	27	7	100	65	9				
6	57	63	-1	4	202	164	19	9	364	337	23	1	75	61	2
8	269	302	-24												
					-10	k	18		-9	k	9		-8	k	1
	-10	k	7	0	393	379	8	1	120	43	28	2	485	443	61
				2	157	86	25	3	565	580	-20	4	360	350	13
2	995	969	26	4	112	138	-9	5	593	591	2	6	157	144	7
4	164	220	-41					7	180	145	17	8	454	452	3
6	715	714	0		-10	k	19	9	67	55	2	10	126	44	21
8	219	166	28												
				2	128	91	12		-9	k	10		-8	k	2
	-10	k	8					1	1229	1300	-63	0	105	11	21
0	25	112	-20		-10	k	20	3	181	196	-11	2	651	578	98
2	597	767	-259					5	148	194	-28	4	260	257	3
4	-85	52	-19	0	-69	86	-11	7	208	173	20	6	812	722	95
6	151	127	10					9	514	510	3	8	-12	25	-1
8	149	167	-8		-9	k	1					10	98	2	14
	-10	k	9	1	804	787	20		-9	k	11		-8	k	3
				3	527	487	54								
2	844	798	50	5	542	531	14	1	337	318	21				
4	947	970	-23	7	195	175	12	3	60	209	-76	2	925	904	23
6	952	958	-5	9	78	104	-7	5	108	85	7	4	399	381	25
8	291	295	-3					7	101	10	15	6	67	41	5
					-9	k	2					8	365	408	-42
	-10	k	10						-9	k	12	10	-74	11	-8
				1	545	530	22								
0	279	39	106	3	393	337	72	1	840	715	129		-8	k	4
2	921	853	70	5	105	133	-14	3	133	106	12				
4	192	189	1	7	383	429	-51	5	58	56	0	0	458	454	4
6	207	157	26	9	280	312	-25	7	100	92	2	2	1296	1247	41
8	242	217	15									4	99	81	7
					-9	k	3		-9	k	13	6	238	277	-34
	-10	k	11									8	326	301	20
				1	107	10	30	1	239	216	18	10	407	393	12
2	1115	1075	37	3	1025	884	134	3	206	164	25				
4	660	593	74	5	119	128	-4	5	114	14	20		-8	k	5
6	440	412	27	7	305	300	4	7	77	47	5				
8	225	201	13	9	-84	12	-11								
									-9	k	14				
	-10	k	12					1	766	792	-29				
				1	414	280	168	3	372	364	8	10	378	354	21
0	55	111	-12	3	250	243	8	5	388	369	17		-81	37	-10
2	-103	66	-27					7	159	114	18				
4	162	160	0	5	67	37	6						-8	k	6
6	173	201	-15	7	156	76	30								
8	296	291	3	9	81	42	7		-9	k	15	0	639	603	39
												2	1270	1186	70
	-10	k	13					1	100	102	0	4	19	4	0

J-4640-m16

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

Page 7

				-5 k 2		9 152 173		-9 8 162 138 11
	-6 k 10							10 224 218 3
				1 1520 1568 -36		-5 k 12		
0	1345 1404 -40			3 1006 979 29		1 588 597 -11		-4 k 4
2	961 961 0			5 -15 51 -7		3 108 88 7		0 2153 1898 111
4	704 662 49			7 476 409 74		5 40 26 1		2 1507 1567 -46
6	154 138 7			9 72 133 -19		7 239 276 -25		4 147 16 56
8	247 227 12							6 92 73 7
				-5 k 3		-5 k 13		8 134 130 1
	-6 k 11			1 348 355 -12		1 187 169 11		10 140 202 -30
2	702 669 41			3 71 132 -35		3 368 378 -10		-4 k 5
4	220 222 -1			5 831 813 20		5 229 209 13		
6	158 171 -6			7 599 618 -23		7 444 463 -19		2 876 914 -46
8	104 121 -5			9 171 204 -18				4 803 863 -76
				-5 k 4		-5 k 14		6 339 342 -3
	-6 k 12			1 854 690 185		1 446 423 26		8 65 1 7
0	1067 1036 24			3 904 828 84		3 309 303 4		10 -39 7 -2
2	302 238 61			5 490 530 -57		5 323 336 -12		-4 k 6
4	99 32 16			7 230 246 -12		7 112 50 15		
6	216 158 33			9 -62 94 -19				0 650 586 71
8	496 494 2					-5 k 15		2 30 17 1
				-5 k 5		1 32 23 0		4 164 186 -19
	-6 k 13			1 667 736 -107		3 213 215 -1		6 219 155 45
2	328 311 17			3 405 268 176		5 156 185 -14		8 331 374 -42
4	144 143 0			5 740 686 64		7 215 239 -14		10 347 348 0
6	131 147 -6			7 622 629 -8				-4 k 7
8	-45 7 -2			9 335 324 9		-5 k 16		2 1297 1197 82
				-5 k 6		1 339 288 44		4 634 572 78
	-6 k 14			1 275 113 157		3 309 312 -3		6 866 861 4
0	1123 1125 -1			3 192 161 29		5 195 136 27		8 563 550 14
2	811 819 -9			5 59 21 7		-5 k 17		10 -71 30 -8
4	422 434 -12			7 194 267 -56		1 459 483 -24		-4 k 8
6	287 282 3			9 369 370 0		3 261 230 20		0 167 43 48
				-5 k 7		5 190 245 -31		2 600 631 -45
	-6 k 15			1 215 237 -24		-5 k 18		4 1327 1292 28
2	342 390 -49			3 769 866 -129		1 488 464 24		6 143 147 -2
4	244 249 -3			5 180 112 41		3 218 194 14		8 207 234 -17
6	192 171 10			7 -53 14 -5		-5 k 19		10 86 116 -8
				9 182 218 -19		1 212 250 -24		-4 k 9
	-6 k 16			1 1394 1420 -20		3 123 85 11		2 1089 1153 -65
0	369 355 9			3 1045 1018 27		-5 k 20		4 1259 1315 -49
2	280 270 8			5 850 824 29		1 255 203 31		6 1002 983 18
4	-84 17 -10			7 115 190 -37		-4 k 1		8 465 481 -16
6	79 138 -18			9 452 412 36		2 806 793 17		-4 k 10
				-5 k 8		4 727 777 -69		0 751 601 136
	-6 k 17			1 110 0 32		6 616 646 -39		2 415 403 15
2	268 267 0			3 854 826 32		8 430 404 27		4 138 119 9
4	216 182 19			5 760 752 8		10 195 164 16		6 268 301 -28
				7 384 378 5				8 407 424 -16
	-6 k 18			9 181 179 1		-4 k 2		-4 k 11
0	482 474 6			1 110 0 32		0 1723 1669 30		2 153 177 -17
2	95 37 12			3 854 826 32		2 3135 3019 41		4 256 240 13
4	7 81 -9			5 760 752 8		4 108 93 8		6 487 453 35
				7 384 378 5		6 423 434 -14		8 219 235 -9
	-6 k 19			9 181 179 1		8 -52 1 -4		-4 k 12
2	205 201 1			10 127 110 6		10 127 110 6		0 -50 3 -4
				-5 k 10				2 110 153 -23
	-6 k 20			1 292 263 32		-4 k 3		4 150 134 8
0	132 147 -4			3 312 352 -50		2 1332 1245 71		6 -93 30 -15
				5 284 330 -45		4 549 525 36		8 185 173 6
	-5 k 1			7 36 30 0		6 47 1 5		-4 k 13
				9 486 480 4				
				-5 k 11				
1	739 693 62			1 264 266 -1				
3	1462 1412 37			3 248 284 -36				
5	1305 1207 78			5 207 247 -30				
7	964 956 7			7 269 291 -16				
9	443 446 -3							

J-4640-m17

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

2	111	76	12	9	233	267	-23	-3	k	16	8	580	592	-13		
4	388	391	-3								10	129	141	-4		
6	580	580	0		-3	k	6	1	629	598	33					
8	295	282	9					3	760	725	35		-2	k	8	
				1	2105	2119	-7	5	269	265	3					
	-4	k	14	3	251	261	-12					0	216	224	-6	
				5	20	16	0		-3	k	17	2	710	649	78	
0	125	93	8	7	233	277	-36					4	58	59	0	
2	32	18	1	9	380	408	-26	1	52	11	3	6	388	376	13	
4	192	144	25					3	325	299	20	8	16	32	-1	
6	245	252	-4		-3	k	7	5	462	444	16	10	-71	26	-8	
				1	222	214	8		-3	k	18			-2	k	9
				3	886	941	-65									
2	139	146	-3	5	1737	1833	-63	1	24	34	0	2	162	102	38	
4	268	294	-20	7	1070	1096	-24	3	130	160	-12	4	73	6	12	
6	133	105	10	9	409	432	-22					6	406	375	32	
									-3	k	19	8	69	34	5	
	-4	k	16					1	66	105	-9			-2	k	10
0	875	912	-30	1	714	720	-7	3	228	245	-10					
2	719	677	43	3	299	278	26					0	111	159	-24	
4	617	645	-30	5	-26	54	-7		-2	k	1	2	65	46	5	
6	159	121	14	7	189	193	-2					4	724	726	-2	
				9	62	86	-5	2	668	592	111	6	436	452	-17	
	-4	k	17					4	2393	2284	51	8	-32	7	-1	
								6	1213	1212	1					
2	304	316	-10	1	485	550	-103	8	570	552	20			-2	k	11
4	324	348	-19	3	342	255	97	10	122	141	-7					
				5	792	745	51					2	987	1008	-22	
	-4	k	18	7	488	456	33		-2	k	2	4	373	402	-33	
0	327	348	-13	9	159	138	9	0	1085	1097	-11	6	398	419	-22	
2	317	277	30					2	696	646	73	8	93	134	-13	
4	167	135	13		-3	k	10	4	1063	1085	-22			-2	k	12
				1	420	458	-55	6	-49	39	-9					
	-4	k	19	3	635	649	-19	8	-82	62	-18	0	498	563	-68	
2	106	58	11	5	484	412	81	10	271	273	-1	2	354	290	65	
				7	406	395	11					4	240	243	-2	
	-3	k	1	9	-77	13	-9		-2	k	3	6	97	43	12	
								2	267	347	-152	8	376	385	-8	
1	699	616	121					4	1708	1669	25			-2	k	13
3	351	355	-8		-3	k	11	6	1240	1274	-29					
5	1092	1002	84	1	516	544	-39	8	456	412	45	2	547	565	-21	
7	280	244	33	3	81	78	0	10	130	129	0	4	441	451	-10	
9	123	111	4	5	138	125	6					6	577	555	23	
				7	313	349	-31		-2	k	4	8	283	276	4	
	-3	k	2	9	125	97	9	0	1658	1601	33			-2	k	14
								2	695	684	16					
1	814	796	24		-3	k	12	4	338	294	61	0	719	636	69	
3	2049	1979	38	1	193	92	59	6	903	927	-25	2	557	502	60	
5	701	624	95	3	105	84	7	8	398	456	-62	4	283	286	-2	
7	205	176	20	5	-45	2	-3	10	374	375	-1	6	165	104	23	
9	135	144	-4	7	-48	76	-12							-2	k	15
									-2	k	5					
	-3	k	3					2	1097	1078	18	2	320	284	30	
								4	781	834	-68	4	800	788	11	
1	370	339	63	1	494	492	2	6	731	743	-15	6	743	735	7	
3	1871	1838	19	3	155	158	-1	8	669	658	12					
5	1732	1776	-36	5	48	62	-2	10	121	15	21			-2	k	16
7	671	705	-42	7	65	48	2					0	204	227	-10	
9	187	192	-2						-2	k	6	2	410	427	-16	
								0	2918	2888	10	4	53	116	-15	
	-3	k	4					2	1654	1556	64	6	123	60	17	
1	2066	2086	-11	1	574	619	-54	4	680	661	24					
3	360	382	-33	3	416	406	11	6	604	573	37			-2	k	17
5	60	98	-14	5	-17	55	-5	8	225	188	23					
7	553	535	21	7	166	164	1	10	91	114	-6	2	66	70	0	
9	306	291	12									4	349	362	-11	
	-3	k	5						-2	k	7					
1	537	545	-13	1	294	307	-11									
3	775	674	122	3	363	379	-15	2	143	230	-88			-2	k	18
5	897	823	79	5	652	635	17	4	590	516	96	0	269	315	-24	
7	798	789	10	7	279	265	9	6	329	316	13	2	45	40	0	

Supplementary material,
page 17

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

4	90	153	-21	-1	k	10	10	127	132	-1	2	200	235	-30		
	-2	k	19	1	189	236	-47	0	k	2	4	603	571	37		
				3	203	238	-32				6	427	443	-16		
2	8	25	0	5	98	84	4	0	3731	4051	-86	8	189	157	16	
	-1	k	1	7	154	123	13	2	1715	1651	42		0	k	12	
				9	255	253	1	4	529	493	53		0	730	796	-64
1	1285	1284	1	-1	k	11		6	803	748	63	2	557	582	-31	
3	1158	1155	2					8	338	294	39	4	163	162	0	
5	213	250	-43	1	489	391	119	10	535	521	14	6	242	246	-2	
7	963	947	15	3	694	661	39		0	k	3	8	295	297	-1	
9	403	393	9	5	431	417	15	2	563	493	110		0	k	13	
	-1	k	2	7	612	615	-2	4	76	12	16	2	137	81	21	
				9	80	68	2	6	205	227	-19	4	518	493	27	
1	3248	3084	54	-1	k	12		8	67	29	6	6	485	470	15	
3	1853	1813	24					10	235	218	11		0	k	14	
5	-51	43	-12	1	121	22	29		0	k	4					
7	549	589	-51	3	191	198	-5									
9	571	586	-16	5	247	194	37	0	3354	3366	-3	0	1104	1064	28	
	-1	k	3	7	307	317	-7	2	1564	1480	59	2	859	849	9	
									4	743	699	4	79	70	2	
1	280	177	185	1	206	108	55	6	438	426	15	6	156	144	4	
3	1538	1515	16	3	890	884	5	8	196	147	27		0	k	15	
5	775	759	19	5	644	630	14	10	256	236	13					
7	343	303	40	7	711	723	-12		0	k	5	2	230	203	17	
9	-49	3	-3									4	118	125	-2	
	-1	k	4	-1	k	14		2	532	537	-7	6	70	23	6	
								4	408	411	-4		0	k	16	
1	1047	1006	43	1	716	774	-68	6	-102	25	-24					
3	460	479	-31	3	634	638	-4	8	56	82	-5					
5	575	483	118	5	164	174	-4	10	-116	16	-20	0	-134	48	-22	
7	473	456	19	7	130	159	-11					2	239	204	21	
9	439	431	7						0	k	6	4	400	436	-33	
	-1	k	5	-1	k	15		0	393	472	-106		0	k	17	
								2	327	321	9					
1	971	968	3	1	74	4	9	4	331	311	25	2	71	5	7	
3	808	800	10	3	627	666	-44	6	301	323	-23	4	344	338	5	
5	334	278	65	5	373	327	38	8	194	173	12					
7	49	52	0					10	65	60	0		0	k	18	
9	118	140	-8	-1	k	16			0	k	7	0	217	228	-5	
												2	131	107	8	
1	2646	2665	-8	1	-83	40	-13	2	361	415	-87					
3	1230	1170	52	3	197	200	-1	4	478	539	-92		1	k	0	
5	245	279	-38	5	68	77	-1	6	572	565	8					
7	83	23	11					8	423	413	10	1	2540	2728	-94	
9	106	17	17	1	26	78	-8	10	148	122	9	3	1064	1027	42	
	-1	k	7	3	100	136	-12		0	k	8	5	197	220	-35	
				5	50	32	2					7	129	107	14	
									0	1441	1521	-54	9	316	346	-36
1	251	290	-51	-1	k	18		2	883	848	39		1	k	1	
3	328	420	-145	1	-27	41	-3	4	684	658	32					
5	360	350	13	3	193	173	10	6	178	187	-5	1	330	292	90	
7	292	305	-11					8	211	212	0	3	1362	1446	-72	
9	-84	3	-10									5	292	307	-20	
	-1	k	8	-1	k	19			0	k	9	7	482	480	2	
												9	163	167	-2	
1	62	108	-22	1	89	80	2	2	162	158	3					
3	452	458	-8					4	785	714	79		1	k	2	
5	262	296	-36					6	642	627	17					
7	15	59	-5	2	2074	1911	87	8	383	391	-7	1	97	17	54	
9	59	139	-24	4	904	951	-56					3	360	325	54	
	-1	k	9	6	366	355	13		0	k	10	5	545	546	-2	
				8	282	313	-28					7	377	373	5	
				10	680	651	28		0	795	772	22	9	212	242	-19
								2	411	357	68					
1	57	50	2					4	100	77	8		1	k	3	
3	761	819	-75					6	239	248	-6					
5	1130	1149	-18	2	590	488	161	8	366	361	4	1	506	407	165	
7	859	842	17	4	323	335	-18					3	710	642	89	
9	140	142	0	6	490	541	-74		0	k	11	5	108	163	-37	
				8	491	493	-1					7	81	65	4	

J-4640-m19

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

9	81	33	9				10	171	163	3	2	407	437	-27			
	1	k	4		1	k	14				4	123	69	15			
								2	k	6							
1	363	387	-43	3	635	689	-62	0	2390	2361	11		2	k	17		
3	417	385	50	5	56	18	4	2	1467	1409	43	2	200	176	12		
5	164	176	-9	7	32	76	-7	4	617	614	4						
7	233	214	14		54	33	2	6	202	218	-12		2	k	18		
9	131	114	6		1	k	15	8	173	103	31						
								10	279	258	14	0	-93	96	-18		
	1	k	5		1	147	69	26									
					3	150	92	20					3	k	0		
1	-33	90	-30	5	475	495	-20		2	809	823	-17	1	3074	2862	85	
3	669	653	22						4	979	889	90	3	480	458	43	
5	287	235	54		1	k	16		6	169	86	38	5	-50	28	-12	
7	262	237	20		1	174	221	-26	8	409	401	7	7	183	188	-5	
9	100	126	-8		3	397	409	-10					9	176	138	25	
					5	137	109	10		2	k	8					
	1	k	6										3	k	1		
1	1482	1391	67		1	k	17	0	1606	1601	3						
3	101	131	-20					2	1618	1565	36	1	132	163	-42		
5	305	265	43		1	94	68	6	4	401	388	15	3	309	289	29	
7	176	139	19		3	274	277	-1	6	270	290	-18	5	56	11	7	
9	205	165	21						8	143	132	4	7	265	270	-5	
													9	302	317	-12	
	1	k	7		1	k	18		2	k	9						
					1	128	65	18					3	k	2		
1	198	269	-86						2	221	260	-40					
3	541	526	22		2	k	0		4	405	407	-2	1	863	917	-70	
5	474	469	6						6	164	163	0	3	667	690	-34	
7	351	368	-16		0	480	603	-303	8	93	86	1	5	236	219	16	
9	113	151	-15		2	639	540	168					7	229	242	-10	
					4	310	318	-14		2	k	10		9	207	201	3
	1	k	8		6	143	203	-67									
					8	71	40	8	0	64	23	6		3	k	3	
1	2294	2254	19		10	129	166	-23	2	221	235	-13					
3	1230	1197	28						4	258	206	41	1	1389	1351	30	
5	191	225	-26						6	272	291	-16	3	403	424	-33	
7	146	165	-9		2	k	1		8	114	145	-12	5	710	731	-27	
9	59	60	0		2	524	475	84					7	93	93	0	
					4	1844	1760	50		2	k	11		9	106	59	11
	1	k	9		6	349	312	45									
					8	83	62	5	2	188	188	0		3	k	4	
1	559	548	15		10	-41	35	-4	4	157	135	11					
3	685	675	12						6	-102	12	-16	1	1484	1417	50	
5	272	262	8		2	k	2		8	-107	83	-26	3	187	199	-12	
7	255	208	31										5	441	434	9	
9	82	17	9		0	4400	4247	33		2	k	12		7	452	475	-27
					2	1580	1466	79					9	331	287	35	
	1	k	10		4	734	699	44	0	631	677	-43					
					6	131	140	-5	2	597	609	-14		3	k	5	
1	723	776	-68		8	86	37	10	4	319	324	-4					
3	445	407	46		10	-35	10	-2	6	67	121	-15	1	-38	35	-7	
5	423	458	-40						8	-82	37	-11	3	561	532	41	
7	588	616	-30		2	k	3						5	836	812	26	
9	167	110	21							2	k	13		7	448	409	41
													9	34	119	-18	
	1	k	11		2	359	426	-122									
					4	292	268	32	2	114	132	-7					
					6	-46	66	-14	4	173	145	13		3	k	6	
1	494	512	-24		8	107	90	5	6	28	71	-6					
3	401	406	-5		10	209	202	4					1	2069	2085	-9	
5	106	102	1							2	k	14		3	367	366	1
7	83	89	-1		2	k	4						5	97	75	7	
									0	369	376	-4		7	50	93	-10
	1	k	12		2	72	9	15	2	370	389	-18		9	102	70	8
					4	374	435	-97	4	158	128	13					
1	1011	1005	5		6	810	805	6	6	-108	24	-18		3	k	7	
3	763	740	25		8	282	228	42									
5	106	118	-4		10	279	238	28		2	k	15		1	421	411	14
7	250	305	-41										3	336	325	14	
													5	558	619	-80	
	1	k	13		2	k	5		2	166	120	19		7	434	455	-22
									4	276	237	27		9	159	189	-14
1	172	266	-69		2	735	804	-98	6	325	334	-7					
3	128	130	-1		4	238	242	-4		2	k	16		3	k	8	
5	205	183	12		6	332	303	30									
7	180	137	20		8	171	202	-17	0	627	625	1	1	173	189	-13	

Supplementary material,
page 19
© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4623 Shapiro

J-4640-m20

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

3	41	29	2	10	-14	67	-7	6	-9	102	-15	5	k	5		
5	157	184	-16					8	40	53	-1					
7	142	176	-16		4	k	2					1	174	177	-3	
9	42	0	2						4	k	12	3	523	481	58	
	3	k	9	0	1156	1124	25					5	521	511	12	
				2	277	350	-116	0	795	726	56	7	324	324	0	
1	200	166	26	4	362	315	65	2	424	469	-51	9	67	19	6	
3	308	280	30	6	940	885	56	4	150	178	-14					
5	-39	1	-2	8	122	176	-25	6	-79	15	-9		5	k	6	
7	-10	19	0	10	271	271	0									
9	-115	37	-21		4	k	3		4	k	13	1	314	312	1	
	3	k	10	2	360	348	19	2	256	256	0	3	228	239	-11	
				4	555	543	17	4	-15	40	-2	5	325	364	-43	
1	666	668	-1	6	496	481	18	6	266	249	12	7	125	113	4	
3	539	568	-36	8	533	498	38		4	k	14	9	40	116	-18	
5	-68	69	-16	10	-77	80	-19						5	k	7	
7	36	3	2		4	k	4	0	1083	1088	-3	1	396	318	95	
	3	k	11					2	696	716	-21	3	653	649	5	
				0	284	226	53	4	74	62	2	5	209	212	-2	
1	268	252	14	2	320	257	81	6	118	132	-5	7	312	227	63	
3	-33	105	-21	4	241	245	-4		4	k	15	9	150	139	4	
5	197	191	3	6	557	546	13						5	k	8	
7	79	69	2	8	274	311	-30	2	272	271	0					
	3	k	12	10	126	157	-12	4	37	47	-1	1	1425	1456	-24	
					4	k	5		4	k	16	3	1135	1050	75	
1	270	283	-11					0	109	1	12	5	107	45	16	
3	106	118	-4	2	662	683	-29	2	115	48	16	7	164	220	-31	
5	295	305	-8	4	642	684	-57	4	95	196	-28	9	118	137	-7	
7	256	257	0	6	805	819	-15						5	k	9	
	3	k	13	8	612	614	-1	4	4	k	17	1	516	472	55	
				10	107	143	-12					3	658	631	31	
1	112	70	12		4	k	6	2	98	25	12	5	365	421	-60	
3	326	349	-21									7	485	472	12	
5	94	69	6	0	163	127	21		5	k	0					
7	199	190	4	2	380	350	42	1	737	743	-10		5	k	10	
	3	k	14	4	607	655	-65	3	335	257	135	1	-43	4	-3	
				6	79	155	-32	5	308	251	87	3	-60	41	-9	
1	1246	1265	-15	8	62	78	-3	7	89	79	4	5	183	185	0	
3	458	409	46		4	k	7	9	133	151	-11	7	385	449	-62	
5	184	203	-10						5	k	1		5	k	11	
	3	k	15	2	-104	34	-30									
				4	62	130	-27	1	443	419	41	1	54	17	4	
1	83	29	8	6	423	390	35	3	1151	1227	-74	3	628	652	-28	
3	187	207	-11	8	61	111	-13	5	879	902	-26	5	142	117	10	
5	84	46	7		4	k	8	7	886	866	21	7	393	383	8	
	3	k	16					9	216	228	-7		5	k	12	
				0	948	956	-7		5	k	2					
1	421	471	-50	2	1134	1171	-35					1	346	349	-2	
3	-74	89	-19	4	598	583	18	1	155	138	13	3	190	171	10	
	3	k	17	6	-75	87	-22	3	813	761	62	5	198	163	18	
				8	105	127	-7	5	136	158	-14	7	214	210	2	
	3	k	17		4	k	9	7	340	357	-17		5	k	13	
1	133	10	25					9	408	451	-43					
3	49	117	-16	2	623	660	-48		5	k	3		1	-95	10	-15
	4	k	0	4	178	153	14					3	412	485	-76	
				6	70	10	7	1	233	268	-43	5	333	292	31	
0	3480	3340	43	8	66	23	5	3	625	565	82		5	k	14	
2	1057	1024	37		4	k	10	5	522	521	1					
4	777	758	27					7	493	481	13		1	170	183	-6
6	110	13	38	0	783	783	0	9	99	85	3	3	143	126	6	
8	363	353	14	2	821	854	-36		5	k	4	5	103	82	5	
10	226	233	-5	4	99	3	17						5	k	15	
	4	k	1	6	359	344	13	1	1159	1120	36					
				8	161	194	-16	3	339	334	6	1	91	49	8	
2	657	617	57		4	k	11	5	363	326	42	3	-14	125	-24	
4	1212	1167	40					7	239	231	5					
6	926	859	69	2	123	79	16	9	155	166	-5		5	k	16	
8	857	877	-21	4	214	214	0									

J-4640-m21

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

1	462	486	-23	2	297	262	31	1	305	282	28	8	k	0		
3	342	308	27	4	628	613	16	3	196	188	6					
	6	k	0	6	640	672	-34	5	288	259	26	0	755	741	17	
0	1250	1173	67	8	247	220	16	7	459	498	-43	2	-10	67	-18	
2	601	557	74		6	k	10	9	273	274	0	4	515	430	138	
4	587	635	-86	0	238	291	-33		7	k	5	6	50	29	4	
6	-73	8	-16	2	383	338	45	1	107	95	6	8	196	170	19	
8	156	106	30	4	341	395	-53	3	1142	1139	3	10	146	133	7	
10	380	383	-3	6	150	162	-5	5	1027	1025	2					
	6	k	1		6	k	11	7	833	842	-9	2	1337	1299	30	
2	208	134	66	2	260	238	16	9	155	131	9	4	1100	1146	-45	
4	125	142	-11	4	514	534	-22		7	k	6	6	653	691	-47	
6	-32	101	-23	6	522	525	-2	1	627	636	-11	8	638	646	-8	
8	-49	60	-10		6	k	12	3	486	534	-65		8	k	2	
10	-94	12	-13	0	115	95	4	5	396	397	-1	0	650	682	-35	
	6	k	2	2	202	210	-4	7	-96	66	-19	2	622	537	111	
0	1365	1309	38	4	306	282	18	9	160	179	-8	4	805	834	-34	
2	814	810	5	6	-51	50	-7		7	k	7	6	214	201	9	
4	80	37	12		6	k	13	1	362	370	-10	8	333	309	19	
6	163	174	-6	2	86	136	-16	3	844	883	-44		8	k	3	
8	257	236	15	4	285	296	-8	5	590	591	-1	2	382	334	63	
10	206	228	-12	6	262	244	11	7	780	807	-28	4	641	601	50	
	6	k	3		6	k	14		7	k	8	6	613	649	-44	
2	1085	1050	34	0	579	541	29	1	457	444	16	8	241	245	-2	
4	113	2	31	2	266	240	17	3	88	92	-1		8	k	4	
6	198	177	14	4	57	18	4	5	19	47	-3	0	200	116	43	
8	436	443	-7		6	k	15	7	320	302	13	2	80	29	13	
10	53	64	-1	2	75	101	-6		7	k	9	4	515	529	-18	
	6	k	4		6	k	16	1	321	291	28	6	179	236	-38	
0	118	145	-13	2	75	101	-6	3	380	400	-21	8	501	533	-33	
2	-34	13	-3		6	k	16	5	188	159	15		8	k	5	
4	601	528	93	0	602	615	-9	7	279	287	-6	2	1087	1082	4	
6	623	677	-68		7	k	0		7	k	10	4	589	592	-3	
8	189	175	7	1	206	284	-140	1	384	426	-47	6	597	620	-27	
	6	k	5	3	322	323	-1	3	111	30	19	8	163	175	-5	
2	76	102	-11	5	60	21	10	5	76	36	6		8	k	6	
4	777	719	67	7	156	159	-2	7	198	162	17	0	1854	1789	33	
6	273	269	3	9	195	185	7		7	k	11	2	991	998	-7	
8	388	387	1		7	k	1	1	101	51	13	4	770	796	-29	
	6	k	6	1	952	918	36	3	9	5	0	6	372	377	-4	
0	514	483	33	3	408	404	5	5	169	186	-8	8	369	356	11	
2	573	638	-94	5	928	914	15	7	99	47	10		8	k	7	
4	-50	66	-13	7	650	627	25		7	k	12	2	404	416	-14	
6	156	258	-67	9	469	489	-20	1	106	86	6	4	80	44	7	
8	44	82	-6		7	k	2	3	424	447	-23	6	342	332	8	
	6	k	7	1	498	493	8	5	115	113	0	8	102	90	3	
0	514	483	33	3	217	239	-24		7	k	13		8	k	8	
2	573	638	-94	5	85	67	5	1	163	112	20	0	211	272	-36	
4	-50	66	-13	7	-49	62	-10	3	214	222	-5	2	180	147	19	
6	156	258	-67	9	53	14	4	5	51	48	0	4	124	81	15	
8	44	82	-6		7	k	3		7	k	14	6	-46	43	-6	
	6	k	8	1	162	197	-33	1	567	589	-23	8	261	276	-10	
0	692	642	46	3	191	244	-53	3	165	163	0		8	k	9	
2	546	574	-37	5	933	996	-69		7	k	15	2	37	9	2	
4	116	152	-16	7	632	645	-13	1	110	66	10	4	236	213	15	
6	78	21	9	9	126	140	-5					6	311	313	-1	
8	139	159	-8		7	k	4						8	k	10	
	6	k	9													

S-4640-m22

Ethylene-Bridged Scandium Dimer

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

J-4640-m23

0	805	826	-25	12	k	12	14	k	0	5	610	640	-32					
2	425	420	9	0		189	190	0	0	241	193	35	7	168	180	-5		
4	375	412	-58						2	336	355	-25		15	k	2		
6	222	200	19			13	k	0	4	239	194	41						
8	-30	74	-13			1		788	739	65				1	160	214	-32	
	12	k	1			3		348	328	28				3	-37	8	-2	
2	168	154	8			5		251	221	31				5	350	369	-17	
4	393	415	-25			7		225	239	-13				7	202	202	0	
6	293	298	-4								14	k	1					
8	-80	60	-15								2	1001	1001	0		15	k	3
	12	k	2			1		557	482	86				4	764	766	-2	
0	853	828	21			3		549	587	-47				6	507	465	41	
2	431	359	80			5		246	190	37				8	252	227	11	
4	198	250	-38			7		121	82	11				14	k	2		
6	169	125	20											0	539	520	16	
8	228	215	7											2	295	302	-5	
	12	k	3			1		85	22	12				4	191	222	-19	
2	223	246	-18			3		176	147	15				6	208	239	-18	
4	241	287	-38			5		-60	12	-6				14	k	3		
6	101	46	12			7		16	4	0				1	84	87	0	
8	80	119	-10											3	85	79	1	
	12	k	4											5	105	161	-21	
0	595	619	-22			1		458	441	19								
2	204	141	36			3		432	469	-41								
4	21	22	0			5		402	351	46								
6	59	38	3			7		104	121	-5				0	202	167	14	
8	404	394	9											2	265	233	23	
	12	k	5											4	82	111	-8	
2	400	405	-4			1		213	202	7				6	193	204	-6	
4	190	161	15			3		270	222	34								
6	205	181	13			5		69	85	-3								
	12	k	6			7		137	129	3								
0	1001	1007	-4															
2	776	767	9															
4	451	413	36															
6	218	237	-12															
	12	k	7															
2	425	454	-30															
4	552	529	23															
6	242	252	-6															
	12	k	8															
0	362	396	-24															
2	184	168	8															
4	55	0	4															
6	110	83	7															
	12	k	9															
2	260	229	20															
4	152	125	10															
	12	k	10															
0	368	366	1															
2	-66	16	-7															
4	81	61	4															
	12	k	11															
2	192	216	-13															

J4640-m25

Table S8. Observed and Calculated Structure Factors for 3

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

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

J-4640-m27

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

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

J-4640-mar

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

14	67	49	7	3	271	262	22	12	360	345	26	1	114	113	0
15	51	34	5	4	625	620	8	13	22	5	1	2	-64	22	-15
16	272	260	18	5	99	86	14	14	283	268	23	3	145	109	28
17	46	59	-4	6	137	99	57	15	331	321	16	4	12	36	-3
18	124	106	13	7	764	779	-22	16	70	75	-2	5	146	142	3
				8	76	100	-24	17	78	67	6	6	64	63	0
	-3	k	s	9	281	270	24	18	25	51	-7	7	92	82	5
				10	349	351	-4								
0	506	501	6	11	151	145	8	4	k	s			-7	k	4
1	550	529	36	12	178	175	5	1	477	481	-5	1	220	227	-10
2	-30	32	-12	13	386	376	19	2	181	137	65	2	42	80	-16
3	437	435	3	14	209	236	-42	3	277	279	-4	3	-18	36	-5
4	-20	15	-3	15	249	239	-15	4	168	159	14	4	232	220	14
5	47	24	9	16	123	142	-17	5	549	516	56	5	171	128	41
6	269	263	13	17	145	140	4	6	-24	36	-9	6	114	103	7
7	261	256	11	18	157	142	15	7	213	213	0	7	28	10	2
8	437	434	6	19	135	157	-22	8	334	314	35	8	86	86	0
9	399	378	41	20	40	14	3	9	213	156	76	9	62	26	10
10	164	179	-21					10	115	134	-18	10	135	157	-20
11	186	213	-41	1	k	s		11	-47	5	-8	11	152	141	9
12	99	91	6					12	128	166	-41				
13	132	132	0	0	595	627	-48	13	472	446	42		-6	k	4
14	109	111	-1	1	581	558	40	14	279	288	-14				
15	118	89	21	2	333	231	160	15	143	145	-1	0	115	126	-7
16	162	164	-2	3	155	168	-25	16	40	10	5	1	105	106	0
17	186	176	11	4	254	279	-58	17	10	25	-1	2	334	331	5
18	106	105	0	5	357	367	-23					3	184	181	3
19	47	36	3	6	509	549	-64	5	k	s		4	-72	5	-19
				7	76	70	5	0	285	298	-17	5	98	92	4
				8	563	573	-15	1	115	101	12	6	129	113	14
				9	-71	25	-31	2	211	196	22	7	90	47	21
1	686	648	58	10	48	28	8	3	153	151	2	8	59	44	5
2	326	304	49	11	450	468	-35	4	155	145	11	9	253	248	7
3	641	626	23	12	239	246	-11	5	113	106	5	10	51	11	8
4	320	293	61	13	135	133	1	6	282	283	-1	11	148	134	12
5	60	107	-49	14	159	143	18	7	110	118	-6	12	225	206	23
6	357	347	20	15	-26	15	-3	8	49	70	-10	13	29	5	2
7	626	627	-1	16	36	42	-2	9	233	236	-3	14	61	9	12
8	110	114	-4	17	72	55	7	10	189	177	14				
9	224	227	-6	18	17	25	-1	11	66	61	2	-5	k	4	
10	224	214	18	19	100	113	-9	12	194	187	8	1	29	8	3
11	-29	32	-9					13	-13	23	-2	2	367	377	-18
12	34	59	-10	2	k	s		14	227	238	-15	3	309	305	6
13	82	64	10	1	161	172	-23	15	117	114	1	4	-9	20	-1
14	32	55	-7	2	150	141	17					5	119	113	5
15	317	315	3	3	625	562	83	6	k	s		6	-53	18	-12
16	101	87	9	4	145	140	6	1	278	252	40	7	169	180	-13
17	84	47	17	5	646	616	38	2	47	104	-33	8	208	207	0
18	124	102	17	6	201	187	26	3	-40	1	-6	9	187	192	-6
19	163	151	12	7	360	382	-49	4	112	121	-8	10	59	69	-4
				8	17	10	1	5	127	124	2	11	99	103	-3
				9	93	77	14	6	329	343	-24	12	84	1	24
0	803	742	69	10	273	291	-36	7	144	164	-20	13	225	206	24
1	20	5	2	11	114	151	-42	8	-19	4	-1	14	81	95	-8
2	211	204	15	12	-39	2	-6	9	55	76	-10	15	74	31	16
3	47	1	14	13	214	198	23	10	84	119	-26	16	109	95	9
4	630	618	19	14	131	134	-3	11	120	110	8				
5	294	284	25	15	56	47	3	12	32	12	3	-4	k	4	
6	426	429	-6	16	58	45	4					0	-6	5	0
7	180	168	23	17	153	140	13	0	234	221	13	1	377	373	6
8	757	744	23	18	134	145	-10	1	81	85	-2	2	220	217	4
9	284	292	-18	19	210	183	31	2	134	126	7	3	174	169	7
10	259	273	-30					3	-30	27	-6	4	35	15	5
11	161	165	-5	0	101	17	42	4	87	86	0	5	192	194	-2
12	96	85	9	1	733	692	77	5	66	58	3	6	389	388	2
13	156	160	-5	2	45	43	0	6	200	213	-17	7	34	59	-9
14	458	468	-19	3	84	94	-10	7	-11	7	0	8	181	184	-3
15	41	19	5	4	-20	2	-2	8	188	179	10	9	237	236	1
16	43	1	7	5	356	341	30	9	30	34	-1	10	126	130	-3
17	122	113	7	6	337	323	27					11	133	153	-19
18	289	287	2	7	50	30	8	-8	k	4		12	163	144	-20
19	46	57	-4	8	-27	55	-18	0	89	64	9	13	115	142	-23
				9	138	116	23					14	168	151	17
				10	57	44	5					15	-83	7	-25
0	k	s		11								16	131	120	9
1	290	285	11												
2	55	94	-37												

S-4640-m32

n-Propyl Bridged Scandium Dimer

Page 8

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