

Supporting Information for the Manuscript entitled “Thermodynamics of Metallocene Catalyst Activation:  
Alignment of Theory and Experiment”

### Table of Contents

Table S-1. Dissociation of $R_6Al_2$ in solution without correction due to specific solvation at M06-2X/TZVP level of theory. $\Delta G$ and $\Delta H$ in $\text{kJ mol}^{-1}$ , $\Delta S$ in $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ . $p = 1 \text{ atm}$ , $T = 298\text{K}$ , except for benzene 313K. ....	2
Table S-2. M06-2X/TZVP calculated $R_3Al$ -solvent and $R_6Al_2$ -solvent interaction enthalpies ( $\Delta H$ ) and specific solvation ( $\Delta\Delta H$ ) calculated as the enthalpy difference. $\Delta H$ in $\text{kJ mol}^{-1}$ , $p = 1 \text{ atm}$ , $T = 298\text{K}$ , except for benzene 313K. ....	2
Table S-3 – Absolute values of thermodynamic functions (au). Method = M06-2X/TZVP, $p = 1 \text{ atm}$ and $T = 298 \text{ K}$ unless otherwise noted. ....	3
Boltzmann Weighting of Equilibrium 2 .....	36

**Table S-1.** Dissociation of  $R_6Al_2$  in solution without correction due to specific solvation at M06-2X/TZVP level of theory.  $\Delta G$  and  $\Delta H$  in  $\text{kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta S$  in  $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ .  $p = 1 \text{ atm}$ ,  $T = 298\text{K}$ , except for benzene 313K.

R	Solvent	$\Delta H$	$\Delta H\text{-qh}$	$\Delta G$ ( $\Delta S$ )	$\Delta G\text{-qh}$ ( $\Delta S\text{-qh}$ )	$\Delta G\text{-qh-tr}$ ( $\Delta S\text{-qh-tr}$ )
Me	mesitylene	81.5	79.6	13.7 (228)	23.7 (188)	37.7 (141)
Me	heptane	81.5	79.2	4.3 (259)	22.9 (189)	35.7 (146)
Me	benzene	80.3	78.1	9.4 (227)	19.2 (188)	33.8 (142)
Et	mesitylene	81.9	77.6	-5.8 (294)	9.5 (229)	23.4 (182)
Et	heptane	82.7	78.5	0.2 (276)	10.7 (228)	23.5 (184)
i-Bu	heptane	38.2	37.8	-30.6 (231)	-35.6 (246)	-22.7 (203)

**Table S-2.** M06-2X/TZVP calculated  $R_3Al$ -solvent and  $R_6Al_2$ -solvent interaction enthalpies ( $\Delta H$ ) and specific solvation ( $\Delta\Delta H$ ) calculated as the enthalpy difference.  $\Delta H$  in  $\text{kJ mol}^{-1}$ ,  $p = 1 \text{ atm}$ ,  $T = 298\text{K}$ , except for benzene 313K.

Adduct	$\Delta H$	$\Delta H\text{-qh}$	Adduct	$\Delta H$	$\Delta H\text{-qh}$
$Me_3Al$ -mesitylene	-37.4	-39.4	$Et_3Al$ -mesitylene	-41.2	-43.8
$Me_6Al_2$ -mesitylene	-14.2	-20.3	$Et_6Al_2$ -mesitylene	-18.5	-21.4
$\Delta\Delta H$	23.2	19.1	$\Delta\Delta H$	22.8	22.3
$Me_3Al$ -heptane	-18.7	-20.6	$Et_3Al$ -heptane	-25.1	-27.2
$Me_6Al_2$ -heptane	-8.0	-12.8	$Et_6Al_2$ -heptane	-15.7	-20.6
$\Delta\Delta H$	10.6	7.8	$\Delta\Delta H$	9.4	6.5
$Me_3Al$ -benzene	-30.7	-33.1	$i\text{-Bu}_3Al$ -heptane	-18.3	-21.7
$Me_6Al_2$ -benzene	-13.5	-18.5	$i\text{-Bu}_6Al_2$ -heptane	-16.9	-21.5
$\Delta\Delta H$	17.1	14.6	$\Delta\Delta H$	1.3	0.2

**Table S-3** – Absolute values of thermodynamic functions (au). Method = M06-2X/TZVP,  $p = 1$  atm and  $T = 298$  K unless otherwise noted.

	Function	Gas-phase	PCM			
			Benzene ( $T = 313$ K)	Heptane	Mesitylene	Toluene
Me <sub>3</sub> Al	<i>E</i>	-362.138908	-362.140397	-362.140087	-362.140445	-362.140451
	<i>H</i>	-362.022669	-362.023751	-362.024067	-362.024555	-362.024512
	<i>H</i> -qh	-362.024263	-362.025394	-362.025671	-362.026131	-362.026095
	<i>TS</i>	0.045747	0.045416	0.044389	0.042741	0.043349
	<i>G</i>	-362.068416	-362.069167	-362.068456	-362.067296	-362.067861
	<i>TS</i> -qh	0.039939	0.042724	0.040017	0.040036	0.039984
	<i>G</i> -qh	-362.064202	-362.068118	-362.065688	-362.066167	-362.066079
	<i>TS</i> -tr		0.039872	0.039499	0.037423	0.038091
	<i>G</i> -tr		-362.063623	-362.063566	-362.061978	-362.062603
	<i>TS</i> -qh-tr		0.037179	0.035127	0.034718	0.034726
	<i>G</i> -qh-tr		-362.062573	-362.060798	-362.060849	-362.060821
Me <sub>3</sub> Al (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-362.147349				
Me <sub>3</sub> Al (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-361.973463				
Me <sub>3</sub> Al (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-361.974321				
Me <sub>3</sub> Al (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-361.429548				
	<i>H</i>	-361.313521				
	<i>H</i> -qh	-361.315098				
Me <sub>3</sub> Al (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-361.508497				
Me <sub>3</sub> Al ( $T = 418$ K)	<i>E</i>	-362.138908				
	<i>H</i>	-362.016499				
	<i>H</i> -qh	-362.018717				
	<i>TS</i>	0.071367				
	<i>G</i>	-362.087866				
	<i>TS</i> -qh	0.063208				
	<i>G</i> -qh	-362.081925				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub>	<i>E</i>	-724.312906	-724.314371	-724.314085	-724.314807	-724.314434
	<i>H</i>	-724.077659	-724.078104	-724.079177	-724.080159	-724.079641
	<i>H</i> -qh	-724.080013	-724.080526	-724.081503	-724.082594	-724.081964
	<i>TS</i>	0.059412	0.063812	0.059363	0.059644	0.059376
	<i>G</i>	-724.137071	-724.141916	-724.138540	-724.139803	-724.139017
	<i>TS</i> -qh	0.058555	0.063030	0.058597	0.058763	0.058626
	<i>G</i> -qh	-724.138568	-724.143556	-724.140100	-724.141357	-724.140590
	<i>TS</i> -tr		0.058267	0.054473	0.054326	0.054118
	<i>G</i> -tr		-724.136371	-724.133650	-724.134485	-724.133759
	<i>TS</i> -qh-tr		0.057485	0.053707	0.053446	0.053368

	<i>G</i> -qh-tr		-724.138011	-724.135210	-724.136040	-724.135332
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> ( <i>T</i> = 418 K)	<i>E</i>	-724.312906				
	<i>H</i>	-724.064807				
	<i>H</i> -qh	-724.068028				
	<i>TS</i>	0.098356				
	<i>G</i>	-724.163163				
	<i>TS</i> -qh	0.097146				
	<i>G</i> -qh	-724.165174				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-724.332105				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-723.986419				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-723.988448				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-722.897568				
	<i>H</i>	-722.662855				
	<i>H</i> -qh	-722.664948				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-723.053750				
Et <sub>3</sub> Al	<i>E</i>	-480.038193		-480.039223	-480.039611	
	<i>H</i>	-479.830338		-479.831632	-479.832185	
	<i>H</i> -qh	-479.832776		-479.834066	-479.834643	
	<i>TS</i>	0.053113		0.052614	0.053610	
	<i>G</i>	-479.883451		-479.884246	-479.885795	
	<i>TS</i> -qh	0.049016		0.049034	0.049092	
	<i>G</i> -qh	-479.881792		-479.883100	-479.883735	
	<i>TS</i> -tr			0.047724	0.048293	
	<i>G</i> -tr			-479.879356	-479.880478	
	<i>TS</i> -qh-tr			0.044144	0.043774	
	<i>G</i> -qh-tr			-479.878210	-479.878417	
Et <sub>3</sub> Al ( <i>T</i> = 418 K)	<i>E</i>	-480.038193				
	<i>H</i>	-479.821080				
	<i>H</i> -qh	-479.824459				
	<i>TS</i>	0.085299				
	<i>G</i>	-479.906379				
	<i>TS</i> -qh	0.079533				
	<i>G</i> -qh	-479.903992				
Et <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> C <sub>s</sub>	<i>E</i>	-960.113237				
	<i>H</i>	-959.694593				
	<i>H</i> -qh	-959.698990				
	<i>TS</i>	0.079576				
	<i>G</i>	-959.774169				

	<i>TS-qh</i> <i>G-qh</i>	0.074495 -959.773485				
$\text{Et}_6\text{Al}_2\text{C}_s$ ( $T = 418\text{K}$ )	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i>	-960.113237 -959.675594 -959.681658 0.133799 -959.809393 0.126647 -959.808305				
$\text{Et}_6\text{Al}_2\text{C}_2$	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>			-960.113517 -959.694749 -959.698046 0.073832 -959.768581 0.072229 -959.770275 0.068943 -959.763692 0.067340 -959.765386	-960.114116 -959.695560 -959.698849 0.073822 -959.769382 0.072230 -959.771079 0.068505 -959.764065 0.066912 -959.765761	
<i>i</i> - $\text{Bu}_3\text{Al}$	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-715.887990 -715.501642 -715.505019 0.066305 -715.567947 0.062962 -715.567981		-715.888694 -715.502755 -715.506155 0.067654 -715.570409 0.064098 -715.570253 0.062764 -715.565519 0.059208 -715.565363		
<i>i</i> - $\text{Bu}_6\text{Al}_2\text{C}_i$	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i>	-1431.800615 -1431.024325 -1431.031311 0.110623 -1431.134948 0.101885 -1431.133196				

i-Bu <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> C <sub>2</sub>	<i>E</i>			-1431.796686		
	<i>H</i>			-1431.020068		
	<i>H-qh</i>			-1431.026691		
	<i>TS</i>			0.109098		
	<i>G</i>			-1431.129166		
	<i>TS-qh</i>			0.100270		
	<i>G-qh</i>			-1431.126961		
	<i>TS-tr</i>			0.104209		
	<i>G-tr</i>			-1431.124277		
	<i>TS-qh-tr</i>			0.095381		
	<i>G-qh-tr</i>			-1431.122072		
Benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-232.215642	-232.217217			
	<i>H</i>	-232.108650	-232.110374			
	<i>H-qh</i>	-232.108650	-232.110374			
	<i>TS</i>	0.032442	0.032469			
	<i>G</i>	-232.141092	-232.142843			
	<i>TS-qh</i>	0.032442	0.032469			
	<i>G-qh</i>	-232.141092	-232.142843			
	<i>TS-tr</i>		0.026925			
	<i>G-tr</i>		-232.137299			
		<i>TS-qh-tr</i>		0.026925		
	<i>G-qh-tr</i>		-232.137299			
Benzene (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-232.224629				
Benzene (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-232.028399				
Benzene (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-232.029440				
Benzene (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-231.720165				
Benzene (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-231.798455				
Heptane	<i>E</i>	-276.333351		-276.333576		
	<i>H</i>	-276.103672		-276.104102		
	<i>H-qh</i>	-276.105000		-276.105450		
	<i>TS</i>	0.045016		0.045107		
	<i>G</i>	-276.148688		-276.149209		
	<i>TS-qh</i>	0.044227		0.044269		
	<i>G-qh</i>	-276.149227		-276.149719		
	<i>TS-tr</i>			0.040217		
	<i>G-tr</i>			-276.144319		
		<i>TS-qh-tr</i>		0.039379		
	<i>G-qh-tr</i>		-276.144829			

Heptane (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-276.339778				
Heptane (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-276.106500				
Heptane (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-276.108460				
Heptane (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-275.704319				
Heptane (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-275.842818				
Mesitylene	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-350.143455 -349.950809 -349.951408 0.042370 -349.993179 0.040628 -349.992036			-350.145137 -349.950747 -349.952242 0.048179 -349.998926 0.044946 -349.997188 0.042861 -349.993608 0.039629 -349.991871	
Mesitylene (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-350.155875				
Mesitylene (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-349.859958				
Mesitylene (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-349.861784				
Mesitylene (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-349.387240				
Mesitylene (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-349.517685				
Toluene	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-271.524922 -271.389072 -271.389568 0.037584 -271.426656 0.036870 -271.426438			-271.526601 -271.390868 -271.391367 0.037617 -271.428485 0.036878 -271.428245 0.032359 -271.423227 0.031620 -271.422987	
Toluene (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-271.535022				
Toluene (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-271.305541				
Toluene (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-271.306929				
Toluene (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-270.942675				
Toluene (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-271.0382843				
Me <sub>3</sub> Al-benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-594.368291		-594.370500		

	<i>H</i>	-594.142304	-594.144781			
	<i>H-qh</i>	-594.144912	-594.147352			
	<i>TS</i>	0.062281	0.061564			
	<i>G</i>	-594.204585	-594.206345			
	<i>TS-qh</i>	0.058816	0.058791			
	<i>G-qh</i>	-594.203728	-594.206143			
	<i>TS-tr</i>		0.056019			
	<i>G-tr</i>		-594.200800			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.053247			
	<i>G-qh-tr</i>		-594.200599			
Me <sub>3</sub> Al-benzene (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-594.385921				
Me <sub>3</sub> Al-benzene (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-594.018618				
Me <sub>3</sub> Al-benzene (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-594.020687				
Me <sub>3</sub> Al-benzene (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-593.167093				
Me <sub>3</sub> Al-benzene (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-593.321819				
Me <sub>3</sub> Al-heptane	<i>E</i>	-638.481341		-638.482210		
	<i>H</i>	-638.133447		-638.134646		
	<i>H-qh</i>	-638.137106		-638.138271		
	<i>TS</i>	0.068838		0.068688		
	<i>G</i>	-638.202285		-638.203334		
	<i>TS-qh</i>	0.065466		0.065503		
	<i>G-qh</i>	-638.202572		-638.203774		
	<i>TS-tr</i>			0.063798		
	<i>G-tr</i>			-638.198444		
	<i>TS-qh-tr</i>			0.060613		
	<i>G-qh-tr</i>			-638.198884		
Me <sub>3</sub> Al-heptane (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-638.496173				
Me <sub>3</sub> Al-heptane (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-638.092529				
Me <sub>3</sub> Al-heptane (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-638.095816				
Me <sub>3</sub> Al-heptane (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-637.143914				
Me <sub>3</sub> Al-heptane (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-637.361100				
Me <sub>3</sub> Al-mesitylene	<i>E</i>	-350.143455			-350.145137	
	<i>H</i>	-349.950809			-349.950747	
	<i>H-qh</i>	-349.951408			-349.952242	
	<i>TS</i>	0.042370			0.048179	
	<i>G</i>	-349.993179			-349.998926	
	<i>TS-qh</i>	0.040628			0.044946	
	<i>G-qh</i>	-349.992036			-349.997188	

	TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr				0.042861 -349.993608 0.039629 -349.991871	
Me <sub>3</sub> Al-mesitylene (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-712.321536				
Me <sub>3</sub> Al-mesitylene (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-711.855495				
Me <sub>3</sub> Al-mesitylene (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-711.858417				
Me <sub>3</sub> Al-mesitylene (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-710.839719				
Me <sub>3</sub> Al-mesitylene (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-711.045749				
Me <sub>3</sub> Al-toluene	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-633.679243 -633.424954 -633.427300 0.059442 -633.484396 0.057301 -633.484601				-633.681481 -633.427521 -633.429814 0.060451 -633.487972 0.057257 -633.487071 0.055193 -633.482714 0.051999 -633.481813
Me <sub>3</sub> Al-toluene (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-633.697900				
Me <sub>3</sub> Al-toluene (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-633.297601				
Me <sub>3</sub> Al-toluene (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-633.300018				
Me <sub>3</sub> Al-toluene (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-632.391425				
Me <sub>3</sub> Al-toluene (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-632.563298				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-956.536049 -956.190016 -956.194372 0.080861 -956.270877 0.077231 -956.271603	-956.538353 -956.192744 -956.197109 0.080922 -956.273666 0.077295 -956.274404			0.075378 -956.268122 0.071751 -956.268860
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -benzene (M06/def2-TZVP)	<i>E</i>	-956.564156				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -benzene (MN15/def2-TZVP)	<i>E</i>	-956.024380				

Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -benzene (MN15/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-956.027617				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -benzene (MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-954.629366				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -benzene (CCSD(T)//MP2/def2-TZVPD)	<i>E</i>	-954.861881				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -heptane	<i>E</i>	-1000.651400				
	<i>H</i>	-1000.184396				
	<i>H</i> -qh	-1000.189887				
	<i>TS</i>	0.090568				
	<i>G</i>	-1000.274964				
	<i>TS</i> -qh	0.082358				
	<i>G</i> -qh	-1000.272245				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -mesitylene	<i>E</i>	-1074.465892				
	<i>H</i>	-1074.033892				
	<i>H</i> -qh	-1074.039148				
	<i>TS</i>	0.087792				
	<i>G</i>	-1074.121684				
	<i>TS</i> -qh	0.081778				
	<i>G</i> -qh	-1074.120926				
Me <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -toluene	<i>E</i>	-995.846021				
	<i>H</i>	-995.472652				
	<i>H</i> -qh	-995.477094				
	<i>TS</i>	0.079042				
	<i>G</i>	-995.551694				
	<i>TS</i> -qh	0.074840				
	<i>G</i> -qh	-995.551934				
Et <sub>3</sub> Al-heptane	<i>E</i>	-756.383013				
	<i>H</i>	-755.943565				
	<i>H</i> -qh	-755.948132				
	<i>TS</i>	0.076715				
	<i>G</i>	-756.020280				
	<i>TS</i> -qh	0.072874				
	<i>G</i> -qh	-756.021006				
Et <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -heptane	<i>E</i>	-1236.453901				
	<i>H</i>	-1235.803249				
	<i>H</i> -qh	-1235.809744				
	<i>TS</i>	0.102016				
	<i>G</i>	-1235.905265				
	<i>TS</i> -qh	0.095591				
	<i>G</i> -qh	-1235.905335				

i-Bu <sub>3</sub> Al-heptane	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh	-992.230291 -991.612273 -991.618282 0.093602 -991.705875 0.086447 -991.704729				
i-Bu <sub>6</sub> Al <sub>2</sub> -heptane	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh	-1708.141965 -1707.133568 -1707.143364 0.132867 -1707.266435 0.123608 -1707.266972				
(Me <sub>3</sub> Al-benzene) <sub>2</sub> ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh	-1188.758738 -1188.303567 -1188.312935 0.099441 -1188.403008 0.090808 -1188.403743				
(Me <sub>3</sub> Al-heptane) <sub>2</sub>	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh	-1512.794767 -1511.912530 -1511.922152 0.127851 -1512.040381 0.116948 -1512.039100				
(Me <sub>3</sub> Al-mesitylene) <sub>2</sub>	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh	-1424.618449 -1423.989984 -1423.998493 0.116355 -1424.106339 0.103389 -1424.101882				
(Me <sub>3</sub> Al-toluene) <sub>2</sub>	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh	-1267.378641 -1266.867330 -1266.874396				

	<i>TS</i>	0.099647				
	<i>G</i>	-1266.966977				
	<i>TS-qh</i>	0.089863				
	<i>G-qh</i>	-1266.964259				
(Et <sub>3</sub> Al-heptane) <sub>2</sub>	<i>E</i>	-1512.794767				
	<i>H</i>	-1511.912530				
	<i>H-qh</i>	-1511.922152				
	<i>TS</i>	0.127851				
	<i>G</i>	-1512.040381				
	<i>TS-qh</i>	0.116948				
	<i>G-qh</i>	-1512.039100				
(i-Bu <sub>3</sub> Al-heptane) <sub>2</sub>	<i>E</i>	-1984.483316				
	<i>H</i>	-1983.242980				
	<i>H-qh</i>	-1983.254679				
	<i>TS</i>	0.156612				
	<i>G</i>	-1983.399592				
	<i>TS-qh</i>	0.142717				
	<i>G-qh</i>	-1983.397396				
[Cp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 1 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3410.201182	-3410.211602			
	<i>H</i>	-3409.729552	-3409.740328			
	<i>H-qh</i>	-3409.738827	-3409.749674			
	<i>TS</i>	0.147596	0.148374			
	<i>G</i>	-3409.877148	-3409.888702			
	<i>TS-qh</i>	0.136379	0.136408			
	<i>G-qh</i>	-3409.875206	-3409.886082			
	<i>TS-tr</i>		0.142829			
	<i>G-tr</i>		-3409.883157			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.130864			
	<i>G-qh-tr</i>		-3409.880538			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 2 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3410.203116	-3410.213389			
	<i>H</i>	-3409.730942	-3409.741624			
	<i>H-qh</i>	-3409.739760	-3409.750529			
	<i>TS</i>	0.145922	0.146382			
	<i>G</i>	-3409.876864	-3409.888006			
	<i>TS-qh</i>	0.135101	0.135274			
	<i>G-qh</i>	-3409.874861	-3409.885803			
	<i>TS-tr</i>		0.140837			
	<i>G-tr</i>		-3409.882461			

	<i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>		0.129730 -3409.880259			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 3 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-3410.199163 -3409.727241 -3409.736319 0.148202 -3409.875443 0.135515 -3409.871834  0.142490 -3409.880917 0.130073 -3409.877575	-3410.210018 -3409.738427 -3409.747502 0.148035 -3409.886462 0.135617 -3409.883119  0.142490 -3409.880917 0.130073 -3409.877575			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 4 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-3410.200777 -3409.728246 -3409.737024 0.145370 -3409.873616 0.134551 -3409.871575  0.140142 -3409.878046 0.129137 -3409.875877	-3410.210041 -3409.737904 -3409.746740 0.145686 -3409.883590 0.134681 -3409.881421  0.140142 -3409.878046 0.129137 -3409.875877			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 5 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-3410.200298 -3409.727905 -3409.736697 0.145856 -3409.873761 0.134789 -3409.871486  0.140406 -3409.878049 0.129311 -3409.875780	-3410.209686 -3409.737643 -3409.746469 0.145951 -3409.883594 0.134856 -3409.881325  0.140406 -3409.878049 0.129311 -3409.875780			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 1 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i>	-3772.369627 -3771.778479 -3771.789782	-3772.383610 -3771.792988 -3771.804345			

	<i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	0.168107 -3771.946586 0.153477 -3771.943259       	0.168695 -3771.961683 0.153541 -3771.957886 0.163150 -3771.956138 0.147996 -3771.952341			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 2 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-3772.368043 -3771.776705 -3771.787934 0.167991 -3771.944696 0.153328 -3771.941262       	-3772.383212 -3771.792438 -3771.803870 0.169310 -3771.961748 0.153575 -3771.957445 0.163766 -3771.956204 0.148031 -3771.951901			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 3 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-3772.369398 -3771.778193 -3771.789352 0.168087 -3771.946280 0.153202 -3771.942554       	-3772.383153 -3771.792477 -3771.803706 0.168243 -3771.960720 0.153325 -3771.957031 0.162699 -3771.955176 0.147781 -3771.951487			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 4 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i>	-3772.368183 -3771.777003 -3771.788298 0.168711 -3771.945714 0.153200 -3771.941498  	-3772.382135 -3771.791380 -3771.802783 0.168957 -3771.960337 0.153491 -3771.956274 0.163413			

	G-tr TS-qh-tr G-qh-tr		-3771.954793 0.147947 -3771.950730			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 5 (T = 313 K)	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-3772.367472 -3771.775967 -3771.787214 0.168821 -3771.944788 0.153525 -3771.940739	-3772.382018 -3771.790958 -3771.802288 0.169856 -3771.960814 0.153614 -3771.955902 0.164311 -3771.955269 0.148069 -3771.950357			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 6 (T = 313 K)	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-3772.367491 -3771.775921 -3771.787092 0.168521 -3771.944442 0.153440 -3771.940532	-3772.382039 -3771.791016 -3771.802288 0.169000 -3771.960016 0.153533 -3771.955821 0.163455 -3771.954471 0.147989 -3771.950277			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 7 (T = 313 K)	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-3772.363673 -3771.772368 -3771.783495 0.168460 -3771.940828 0.152860 -3771.936355	-3772.379632 -3771.789014 -3771.800485 0.171502 -3771.960516 0.153620 -3771.954105 0.165957 -3771.954971 0.148075 -3771.948560			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 8 (T = 313 K)	E H	-3772.363777 -3771.772226	-3772.379656 -3771.788584			



	<i>TS-tr</i>		0.149514			
	<i>G-tr</i>		-3526.540172			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.135247			
	<i>G-qh-tr</i>		-3526.535255			
[Me <sub>2</sub> CCp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 3 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3526.922491	-3526.932405			
	<i>H</i>	-3526.383985	-3526.394334			
	<i>H-qh</i>	-3526.392919	-3526.403337			
	<i>TS</i>	0.152329	0.152951			
	<i>G</i>	-3526.536314	-3526.547285			
	<i>TS-qh</i>	0.140200	0.140365			
	<i>G-qh</i>	-3526.533119	-3526.543702			
	<i>TS-tr</i>		0.147406			
	<i>G-tr</i>		-3526.541740			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.134820			
	<i>G-qh-tr</i>		-3526.538157			
[Me <sub>2</sub> CCp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 1 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3889.086837	-3889.101482			
	<i>H</i>	-3888.429211	-3888.444300			
	<i>H-qh</i>	-3888.440308	-3888.455345			
	<i>TS</i>	0.173804	0.173476			
	<i>G</i>	-3888.603015	-3888.617776			
	<i>TS-qh</i>	0.157957	0.158125			
	<i>G-qh</i>	-3888.598265	-3888.613470			
	<i>TS-tr</i>		0.167932			
	<i>G-tr</i>		-3888.612232			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.152581			
	<i>G-qh-tr</i>		-3888.607926			
[Me <sub>2</sub> CCp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 2 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3889.085566	-3889.100238			
	<i>H</i>	-3888.427845	-3888.443007			
	<i>H-qh</i>	-3888.439139	-3888.454423			
	<i>TS</i>	0.173837	0.174316			
	<i>G</i>	-3888.601682	-3888.617323			
	<i>TS-qh</i>	0.158588	0.158720			
	<i>G-qh</i>	-3888.597727	-3888.613143			
	<i>TS-tr</i>		0.168772			
	<i>G-tr</i>		-3888.611779			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.153176			
	<i>G-qh-tr</i>		-3888.607599			
[Me <sub>2</sub> CCp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 3 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3889.085126	-3889.099036			

	<i>H</i>	-3888.427649	-3888.442087			
	<i>H-qh</i>	-3888.438972	-3888.453400			
	<i>TS</i>	0.173629	0.174119			
	<i>G</i>	-3888.601278	-3888.616206			
	<i>TS-qh</i>	0.158759	0.158859			
	<i>G-qh</i>	-3888.597731	-3888.612259			
	<i>TS-tr</i>		0.168575			
	<i>G-tr</i>		-3888.610662			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.153315			
	<i>G-qh-tr</i>		-3888.606715			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 4 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3889.082947	-3889.099184			
	<i>H</i>	-3888.425579	-3888.442067			
	<i>H-qh</i>	-3888.437191	-3888.453157			
	<i>TS</i>	0.177441	0.174210			
	<i>G</i>	-3888.603020	-3888.616277			
	<i>TS-qh</i>	0.159653	0.158350			
	<i>G-qh</i>	-3888.596844	-3888.611507			
	<i>TS-tr</i>		0.168665			
	<i>G-tr</i>		-3888.610732			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.152806			
	<i>G-qh-tr</i>		-3888.605963			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 5 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3889.084019	-3889.099257			
	<i>H</i>	-3888.426561	-3888.442090			
	<i>H-qh</i>	-3888.437637	-3888.453134			
	<i>TS</i>	0.174149	0.173858			
	<i>G</i>	-3888.600710	-3888.615948			
	<i>TS-qh</i>	0.158367	0.158191			
	<i>G-qh</i>	-3888.596004	-3888.611325			
	<i>TS-tr</i>		0.168314			
	<i>G-tr</i>		-3888.610404			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.152646			
	<i>G-qh-tr</i>		-3888.605780			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 6 ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3889.084153	-3889.098768			
	<i>H</i>	-3888.426780	-3888.441836			
	<i>H-qh</i>	-3888.438110	-3888.452993			
	<i>TS</i>	0.174284	0.173975			
	<i>G</i>	-3888.601064	-3888.615811			
	<i>TS-qh</i>	0.158586	0.158194			

	G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-3888.596696	-3888.611187 0.168431 -3888.610267 0.152650 -3888.605643			
[Me <sub>2</sub> CCp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 7 (T = 313 K)	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-3889.083016 -3888.425670 -3888.436971 0.175732 -3888.601402 0.158639 -3888.595610	-3889.097556 -3888.440715 -3888.452049 0.175813 -3888.616528 0.158859 -3888.610908 0.170268 -3888.610983 0.153314 -3888.605363			
[Me <sub>2</sub> CCp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 8 (T = 313 K)	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-3889.083946 -3888.426237 -3888.437191 0.172974 -3888.599211 0.157936 -3888.595127	-3889.097570 -3888.440534 -3888.451656 0.174854 -3888.615388 0.158352 -3888.610008 0.169309 -3888.609843 0.152808 -3888.604464			
[EBiZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 1 backward (T = 313 K)	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-3794.870826 -3794.260997 -3794.270840 0.161146 -3794.422143 0.148033 -3794.418873	-3794.881274 -3794.271840 -3794.281784 0.162198 -3794.434038 0.148207 -3794.429991 0.156654 -3794.428494 0.142662 -3794.424446			

[EBIZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 2 forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-3794.869530 -3794.259810 -3794.269530 0.160299 -3794.420109 0.147856 -3794.417386  0.155207 -3794.426630 0.142338 -3794.423514	-3794.880777 -3794.271423 -3794.281176 0.160751 -3794.432174 0.147882 -3794.429058  0.155207 -3794.426630 0.142338 -3794.423514			
[EBIZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 3 forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-3794.865084 -3794.255159 -3794.264737 0.159643 -3794.414802 0.147298 -3794.412035  0.154953 -3794.426495 0.142055 -3794.423399	-3794.881431 -3794.271542 -3794.281344 0.160497 -3794.432039 0.147600 -3794.428944  0.154953 -3794.426495 0.142055 -3794.423399			
[EBIZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 4 forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-3794.872858 -3794.262317 -3794.271859 0.158009 -3794.420326 0.146861 -3794.418720  0.152721 -3794.425096 0.141428 -3794.423375	-3794.882543 -3794.272375 -3794.281947 0.158265 -3794.430640 0.146972 -3794.428919  0.152721 -3794.425096 0.141428 -3794.423375			
[EBIZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 5 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i>	-3794.869815 -3794.259976 -3794.269769 0.161349 -3794.421325	-3794.880822 -3794.271289 -3794.281111 0.161428 -3794.432717			

	<i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	0.147672 -3794.417441	0.147790 -3794.428901 0.155884 -3794.427173 0.142246 -3794.423357			
[EBIZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 6 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-3794.868805 -3794.259215 -3794.269079 0.162928 -3794.422143 0.147963 -3794.417042	-3794.880796 -3794.271264 -3794.281078 0.161339 -3794.432603 0.147774 -3794.428852 0.155794 -3794.427058 0.142230 -3794.423308			
[EBIZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 7 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-3794.868751 -3794.258730 -3794.268530 0.160010 -3794.418740 0.147995 -3794.416525	-3794.878927 -3794.269302 -3794.279143 0.160345 -3794.429647 0.148188 -3794.427331 0.154800 -3794.424102 0.142644 -3794.421787			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 1 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i>	-4157.041439 -4156.312402 -4156.324370 0.182143 -4156.494545 0.165827 -4156.490197	-4157.055016 -4156.326427 -4156.338518 0.182792 -4156.509219 0.166063 -4156.504581 0.177248 -4156.503675 0.160518			

	<i>G-qh-tr</i>		-4156.499036			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 2 forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.040220	-4157.054766			
	<i>H</i>	-4156.310957	-4156.326122			
	<i>H-qh</i>	-4156.322943	-4156.338066			
	<i>TS</i>	0.182506	0.183285			
	<i>G</i>	-4156.493463	-4156.509407			
	<i>TS-qh</i>	0.165953	0.165903			
	<i>G-qh</i>	-4156.488896	-4156.503969			
	<i>TS-tr</i>		0.177741			
	<i>G-tr</i>		-4156.503863			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.160359			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.498425			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 3 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.039634	-4157.053911			
	<i>H</i>	-4156.310343	-4156.325233			
	<i>H-qh</i>	-4156.322308	-4156.337330			
	<i>TS</i>	0.182854	0.184676			
	<i>G</i>	-4156.493197	-4156.509909			
	<i>TS-qh</i>	0.165638	0.165961			
	<i>G-qh</i>	-4156.487946	-4156.503291			
	<i>TS-tr</i>		0.179132			
	<i>G-tr</i>		-4156.504365			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.160416			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.497746			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 4 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.041067	-4157.055147			
	<i>H</i>	-4156.311875	-4156.326408			
	<i>H-qh</i>	-4156.323511	-4156.338152			
	<i>TS</i>	0.180225	0.180987			
	<i>G</i>	-4156.492100	-4156.507395			
	<i>TS-qh</i>	0.164958	0.165079			
	<i>G-qh</i>	-4156.488469	-4156.503231			
	<i>TS-tr</i>		0.175443			
	<i>G-tr</i>		-4156.501851			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.159534			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.497686			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 5 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.039884	-4157.054564			
	<i>H</i>	-4156.310643	-4156.325625			
	<i>H-qh</i>	-4156.322128	-4156.337154			
	<i>TS</i>	0.179608	0.179835			

	<i>G</i>	-4156.490251	-4156.505460			
	<i>TS-qh</i>	0.165122	0.165161			
	<i>G-qh</i>	-4156.487250	-4156.502315			
	<i>TS-tr</i>		0.174291			
	<i>G-tr</i>		-4156.499916			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.159617			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.496771			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 6 forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.040115	-4157.054379			
	<i>H</i>	-4156.310906	-4156.325447			
	<i>H-qh</i>	-4156.322580	-4156.337043			
	<i>TS</i>	0.180679	0.180810			
	<i>G</i>	-4156.491585	-4156.506257			
	<i>TS-qh</i>	0.165397	0.165037			
	<i>G-qh</i>	-4156.487977	-4156.502080			
	<i>TS-tr</i>		0.175265			
	<i>G-tr</i>		-4156.500712			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.159493			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.496536			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 7 forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.040288	-4157.054759			
	<i>H</i>	-4156.311095	-4156.325905			
	<i>H-qh</i>	-4156.322678	-4156.337410			
	<i>TS</i>	0.180261	0.179708			
	<i>G</i>	-4156.491356	-4156.505613			
	<i>TS-qh</i>	0.164949	0.164636			
	<i>G-qh</i>	-4156.487627	-4156.502046			
	<i>TS-tr</i>		0.174164			
	<i>G-tr</i>		-4156.500069			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.159092			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.496502			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 8 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.038714	-4157.052521			
	<i>H</i>	-4156.309538	-4156.323802			
	<i>H-qh</i>	-4156.321371	-4156.335734			
	<i>TS</i>	0.181213	0.181879			
	<i>G</i>	-4156.490751	-4156.505681			
	<i>TS-qh</i>	0.165540	0.165690			
	<i>G-qh</i>	-4156.486911	-4156.501424			
	<i>TS-tr</i>		0.176334			
	<i>G-tr</i>		-4156.500136			

	<i>TS-qh-tr</i>		0.160145			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.495879			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 9 forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.038277	-4157.052669			
	<i>H</i>	-4156.308931	-4156.323858			
	<i>H-qh</i>	-4156.320706	-4156.335729			
	<i>TS</i>	0.180875	0.181775			
	<i>G</i>	-4156.489806	-4156.505633			
	<i>TS-qh</i>	0.165294	0.165494			
	<i>G-qh</i>	-4156.486000	-4156.501223			
	<i>TS-tr</i>		0.176230			
	<i>G-tr</i>		-4156.500088			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.159950			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.495679			
[EBIZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] isomer 10 backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4157.034508	-4157.052335			
	<i>H</i>	-4156.305310	-4156.323637			
	<i>H-qh</i>	-4156.316968	-4156.335292			
	<i>TS</i>	0.181727	0.181931			
	<i>G</i>	-4156.487037	-4156.505568			
	<i>TS-qh</i>	0.165638	0.165688			
	<i>G-qh</i>	-4156.482606	-4156.500980			
	<i>TS-tr</i>		0.176386			
	<i>G-tr</i>		-4156.500023			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.160144			
	<i>G-qh-tr</i>		-4156.495436			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe] <sup>+</sup> ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-473.715541	-473.770616			
	<i>H</i>	-473.496275	-473.550513			
	<i>H-qh</i>	-473.497865	-473.551471			
	<i>TS</i>	0.056804	0.052789			
	<i>G</i>	-473.553079	-473.603302			
	<i>TS-qh</i>	0.053617	0.052111			
	<i>G-qh</i>	-473.551482	-473.603582			
	<i>TS-tr</i>		0.047244			
	<i>G-tr</i>		-473.597757			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.046566			
	<i>G-qh-tr</i>		-473.598037			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe] <sup>+</sup> -benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-705.979519	-706.017164			
	<i>H</i>	-705.650344	-705.687918			
	<i>H-qh</i>	-705.652971	-705.690455			

	<i>TS</i>	0.068479	0.067879			
	<i>G</i>	-705.718823	-705.755797			
	<i>TS-qh</i>	0.066170	0.065951			
	<i>G-qh</i>	-705.719141	-705.756406			
	<i>TS-tr</i>		0.062334			
	<i>G-tr</i>		-705.750252			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.060406			
	<i>G-qh-tr</i>		-705.750861			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ] <sup>+</sup> ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-835.919851	-835.958817			
	<i>H</i>	-835.580717	-835.619858			
	<i>H-qh</i>	-835.583455	-835.622588			
	<i>TS</i>	0.073964	0.073612			
	<i>G</i>	-835.654681	-835.693470			
	<i>TS-qh</i>	0.071124	0.071023			
	<i>G-qh</i>	-835.654579	-835.693611			
	<i>TS-tr</i>		0.068067			
	<i>G-tr</i>		-835.687925			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.065479			
	<i>G-qh-tr</i>		-835.688067			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ] <sup>+</sup> -benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-1068.148699	-1068.184937			
	<i>H</i>	-1067.700635	-1067.736945			
	<i>H-qh</i>	-1067.705807	-1067.742126			
	<i>TS</i>	0.091133	0.091594			
	<i>G</i>	-1067.791768	-1067.828539			
	<i>TS-qh</i>	0.085100	0.085022			
	<i>G-qh</i>	-1067.790907	-1067.827148			
	<i>TS-tr</i>		0.086050			
	<i>G-tr</i>		-1067.822995			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.079477			
	<i>G-qh-tr</i>		-1067.821603			
[Me <sub>2</sub> CCp <sub>2</sub> ZrMe] <sup>+</sup> ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-590.435937	-590.494865			
	<i>H</i>	-590.149908	-590.208110			
	<i>H-qh</i>	-590.151222	-590.208706			
	<i>TS</i>	0.060331	0.057538			
	<i>G</i>	-590.210239	-590.265648			
	<i>TS-qh</i>	0.058832	0.057397			
	<i>G-qh</i>	-590.210054	-590.266103			
	<i>TS-tr</i>		0.051994			

	<i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr		-590.260104 0.051852 -590.260558			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe] <sup>+</sup> -benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-822.703334 -822.307637 -822.310182 0.074029 -822.381666 0.071502 -822.381684  0.067958 -822.411572 0.065768 -822.411844	-822.739344 -822.343614 -822.346076 0.073502 -822.417116 0.071313 -822.417389  0.067958 -822.411572 0.065768 -822.411844			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ] <sup>+</sup> ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-952.640554 -952.235210 -952.237878 0.079270 -952.314480 0.077039 -952.314917  0.073423 -952.345406 0.071285 -952.345937	-952.677359 -952.271983 -952.274652 0.078968 -952.350951 0.076830 -952.351482  0.073423 -952.345406 0.071285 -952.345937			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ] <sup>+</sup> -benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-1184.868558 -1184.354286 -1184.359428 0.097867 -1184.452153 0.090688 -1184.450116  0.091163 -1184.479811 0.084946 -1184.478609	-1184.902805 -1184.388648 -1184.393663 0.096708 -1184.485356 0.090490 -1184.484153  0.091163 -1184.479811 0.084946 -1184.478609			
[EBI <sub>2</sub> ZrMe] <sup>+</sup> forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i>	-858.404160 -858.045943	-858.440750 -858.082601			

	<i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-858.047364 0.066505 -858.112448 0.066015 -858.113379	-858.083980 0.066339 -858.148940 0.065883 -858.149863 0.060794 -858.143395 0.060338 -858.144318			
[EBI <sub>2</sub> ZrMe] <sup>+</sup> -benzene forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-1090.654052 -1090.186853 -1090.189902 0.081433 -1090.268286 0.079351 -1090.269253	-1090.687605 -1090.220491 -1090.223545 0.081458 -1090.301949 0.079253 -1090.302798 0.075914 -1090.296405 0.073709 -1090.297254			
[EBI <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ] <sup>+</sup> backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-1220.597511 -1220.120265 -1220.123501 0.087133 -1220.207398 0.084370 -1220.207871	-1220.631515 -1220.154401 -1220.157565 0.086790 -1220.241191 0.084191 -1220.241756 0.081245 -1220.235646 0.078646 -1220.236211			
[EBI <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ] <sup>+</sup> -benzene backward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh	-1452.825344 -1452.239157 -1452.244860 0.104437 -1452.343594 0.097853 -1452.342713	-1452.858222 -1452.272208 -1452.277846 0.104373 -1452.376581 0.097700 -1452.375546			

	<i>TS-tr</i>		0.098828			
	<i>G-tr</i>		-1452.371036			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.092156			
	<i>G-qh-tr</i>		-1452.370002			
$[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]^- (T = 313 \text{ K})$	<i>E</i>	-2936.349282	-2936.377345			
	<i>H</i>	-2936.099727	-2936.128051			
	<i>H-qh</i>	-2936.105989	-2936.134313			
	<i>TS</i>	0.117035	0.117768			
	<i>G</i>	-2936.216762	-2936.245819			
	<i>TS-qh</i>	0.108615	0.109316			
	<i>G-qh</i>	-2936.214604	-2936.243629			
	<i>TS-tr</i>		0.112223			
	<i>G-tr</i>		-2936.240274			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.103772			
	<i>G-qh-tr</i>		-2936.238085			
$[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]^- \text{-benzene} (T = 313 \text{ K})$	<i>E</i>	-3168.577451	-3168.606095			
	<i>H</i>	-3168.218738	-3168.247662			
	<i>H-qh</i>	-3168.227142	-3168.256078			
	<i>TS</i>	0.132912	0.133059			
	<i>G</i>	-3168.351650	-3168.380721			
	<i>TS-qh</i>	0.122335	0.122403			
	<i>G-qh</i>	-3168.349477	-3168.378481			
	<i>TS-tr</i>		0.127514			
	<i>G-tr</i>		-3168.375176			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.116859			
	<i>G-qh-tr</i>		-3168.372937			
$[\text{Cp}_2\text{ZrMe}][\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4] \text{-benzene isomer 1} (T = 313 \text{ K})$	<i>E</i>	-3642.429500	-3642.442991			
	<i>H</i>	-3641.848103	-3641.861889			
	<i>H-qh</i>	-3641.858782	-3641.872577			
	<i>TS</i>	0.161051	0.161339			
	<i>G</i>	-3642.009154	-3642.023228			
	<i>TS-qh</i>	0.148149	0.148237			
	<i>G-qh</i>	-3642.006931	-3642.020814			
	<i>TS-tr</i>		0.155795			
	<i>G-tr</i>		-3642.017684			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.142692			
	<i>G-qh-tr</i>		-3642.015269			
$[\text{Cp}_2\text{ZrMe}][\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4] \text{-benzene isomer 2} (T = 313 \text{ K})$	<i>E</i>	-3642.426173	-3642.441052			

	<i>H</i>	-3641.844888	-3641.860058			
	<i>H-qh</i>	-3641.855882	-3641.871117			
	<i>TS</i>	0.162589	0.163376			
	<i>G</i>	-3642.007477	-3642.023434			
	<i>TS-qh</i>	0.148323	0.148492			
	<i>G-qh</i>	-3642.004205	-3642.019609			
	<i>TS-tr</i>		0.157831			
	<i>G-tr</i>		-3642.017889			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.142948			
	<i>G-qh-tr</i>		-3642.014065			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ]-benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4004.596103	-4004.609742			
	<i>H</i>	-4003.895952	-4003.910013			
	<i>H-qh</i>	-4003.909729	-4003.923681			
	<i>TS</i>	0.187166	0.186284			
	<i>G</i>	-4004.083118	-4004.096297			
	<i>TS-qh</i>	0.166581	0.166654			
	<i>G-qh</i>	-4004.076310	-4004.090335			
	<i>TS-tr</i>		0.180739			
	<i>G-tr</i>		-4004.090752			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.161109			
	<i>G-qh-tr</i>		-4004.084790			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ]-2benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-3874.659502	-3874.673576			
	<i>H</i>	-3873.969000	-3873.983568			
	<i>H-qh</i>	-3873.981610	-3873.996371			
	<i>TS</i>	0.175164	0.176333			
	<i>G</i>	-3874.144164	-3874.159901			
	<i>TS-qh</i>	0.161103	0.161372			
	<i>G-qh</i>	-3874.142713	-3874.157743			
	<i>TS-tr</i>		0.170788			
	<i>G-tr</i>		-3874.154356			
	<i>TS-qh-tr</i>		0.155828			
	<i>G-qh-tr</i>		-3874.152199			
[Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ]-2benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i>	-4236.826586	-4236.840473			
	<i>H</i>	-4236.017373	-4236.031777			
	<i>H-qh</i>	-4236.033285	-4236.047723			
	<i>TS</i>	0.201866	0.201999			
	<i>G</i>	-4236.219239	-4236.233776			
	<i>TS-qh</i>	0.179679	0.179790			

	G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-4236.212964	-4236.227513 0.196455 -4236.228232 0.174246 -4236.221969			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ]-benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-3759.146304 -3758.498439 -3758.509490 0.169170 -3758.667609 0.153270 -3758.662760	-3759.160744 -3758.513284 -3758.524399 0.169715 -3758.682999 0.153452 -3758.677851 0.164170 -3758.677454 0.147907 -3758.672306			
[Me <sub>2</sub> Cp <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ]-benzene ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-4121.313415 -4120.546648 -4120.560292 0.190978 -4120.737626 0.171191 -4120.731483	-4121.327752 -4120.561522 -4120.575164 0.191395 -4120.752917 0.171365 -4120.746529 0.185851 -4120.747373 0.165820 -4120.740984			
[EBI <sub>2</sub> ZrMe][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ]-benzene forward ( <i>T</i> = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-4027.096558 -4026.377403 -4026.388936 0.175813 -4026.553216 0.160423 -4026.549359	-4027.110110 -4026.391255 -4026.402928 0.176671 -4026.567926 0.160603 -4026.563531 0.171127 -4026.562382 0.155059 -4026.557987			

[EBI <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> AlMe <sub>2</sub> ][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ]-benzene backward (T = 313 K)	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-4389.267285 -4388.429260 -4388.443622 0.198836 -4388.628096 0.178791 -4388.622413  0.193424 -4388.637294 0.173377 -4388.631666	-4389.281388 -4388.443870 -4388.458289 0.198968 -4388.642838 0.178922 -4388.637211  0.193424 -4388.637294 0.173377 -4388.631666			
PBB	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-4092.354634 -4091.996324 -4092.005834 0.143598 -4092.139922 0.129196 -4092.135030          				-4092.359772 -4092.001864 -4092.011360 0.143523 -4092.145387 0.129221 -4092.140581 0.138265 -4092.140129 0.123963 -4092.135323
Cp'' <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> C <sub>s</sub>	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-671.101151 -670.727659 -670.730144 0.070094 -670.797753 0.067737 -670.797881          				-671.103863 -670.730673 -670.733106 0.069894 -670.800567 0.067710 -670.800816 0.064636 -670.795309 0.062452 -670.795558
Cp'' <sub>2</sub> ZrMe <sub>2</sub> C <sub>2</sub>	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i>	-671.101388 -670.727824 -670.730022 0.068305 -670.796129				-671.104117 -670.730875 -670.733064 0.068220 -670.799095

	<i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	0.066599 -670.796621				0.066695 -670.799759 0.062962 -670.793837 0.061437 -670.794501
[Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe][Me(PBB)] isomer 1	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-4763.496121 -4762.759774 -4762.772777 0.182143 -4762.941917 0.166534 -4762.939311				-4763.504570 -4762.768753 -4762.781682 0.181994 -4762.950747 0.166506 -4762.948188 0.176736 -4762.945489 0.161248 -4762.942930
[Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe][Me(PBB)] isomer 2	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i> <i>G-qh-tr</i>	-4763.495417 -4762.759137 -4762.772111 0.181806 -4762.940943 0.166263 -4762.938374				-4763.504176 -4762.768524 -4762.781676 0.182573 -4762.951097 0.166499 -4762.948175 0.177315 -4762.945839 0.161241 -4762.942917
[Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe][Me(PBB)] isomer 3	<i>E</i> <i>H</i> <i>H-qh</i> <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS-qh</i> <i>G-qh</i> <i>TS-tr</i> <i>G-tr</i> <i>TS-qh-tr</i>	-4763.493749 -4762.757163 -4762.770086 0.182315 -4762.939478 0.166151 -4762.936237				-4763.502577 -4762.766548 -4762.779518 0.182751 -4762.949299 0.166247 -4762.945765 0.177493 -4762.944041 0.160989

	<i>G-qh-tr</i>					-4762.940507
[Cp'' <sub>2</sub> ZrMe][Me(PBB)] isomer 4	<i>E</i>	-4763.494360				-4763.503344
	<i>H</i>	-4762.757846				-4762.767349
	<i>H-qh</i>	-4762.770603				-4762.780116
	<i>TS</i>	0.180634				0.181054
	<i>G</i>	-4762.938480				-4762.948403
	<i>TS-qh</i>	0.165593				0.165600
	<i>G-qh</i>	-4762.936196				-4762.945716
	<i>TS-tr</i>					0.175796
	<i>G-tr</i>					-4762.943145
	<i>TS-qh-tr</i>					0.160342
	<i>G-qh-tr</i>					-4762.940458
[Cp'' <sub>2</sub> ZrMe][Me(PBB)] isomer 5	<i>E</i>	-4763.492955				-4763.501824
	<i>H</i>	-4762.756564				-4762.765955
	<i>H-qh</i>	-4762.769497				-4762.778918
	<i>TS</i>	0.181434				0.181514
	<i>G</i>	-4762.937998				-4762.947469
	<i>TS-qh</i>	0.166281				0.166367
	<i>G-qh</i>	-4762.935778				-4762.945285
	<i>TS-tr</i>					0.176256
	<i>G-tr</i>					-4762.942211
	<i>TS-qh-tr</i>					0.161109
	<i>G-qh-tr</i>					-4762.940027
[Cp'' <sub>2</sub> ZrMe][Me(PBB)] isomer 6	<i>E</i>	-4763.492476				-4763.501428
	<i>H</i>	-4762.756010				-4762.765476
	<i>H-qh</i>	-4762.768924				-4762.778512
	<i>TS</i>	0.182136				0.182613
	<i>G</i>	-4762.938146				-4762.948089
	<i>TS-qh</i>	0.165868				0.166215
	<i>G-qh</i>	-4762.934792				-4762.944727
	<i>TS-tr</i>					0.177355
	<i>G-tr</i>					-4762.942831
	<i>TS-qh-tr</i>					0.160957
	<i>G-qh-tr</i>					-4762.939469
<i>syn</i> -[(Cp'' <sub>2</sub> ZrMe) <sub>2</sub> μ-Me][MePBB]	<i>E</i>	-5434.619783				-5434.631549
	<i>H</i>	-5433.507136				-5433.519538
	<i>H-qh</i>	-5433.524930				-5433.537353
	<i>TS</i>	0.230898				0.232268

	G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-5433.738034 0.207374 -5433.732304				-5433.751806 0.207405 -5433.744758 0.227010 -5433.746548 0.202147 -5433.739500
<i>anti</i> -[(Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe) <sub>2</sub> μ-Me][MePBB] isomer 1	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-5434.615713 -5433.503141 -5433.520353 0.229145 -5433.732286 0.206384 -5433.726737				-5434.628724 -5433.516843 -5433.534102 0.229459 -5433.746302 0.206414 -5433.740516 0.224201 -5433.741044 0.201156 -5433.735258
<i>anti</i> -[(Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe) <sub>2</sub> μ-Me][MePBB] isomer 2	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr TS-qh-tr G-qh-tr	-5434.612259 -5433.499341 -5433.516872 0.234823 -5433.734164 0.206413 -5433.723285				-5434.628124 -5433.515779 -5433.533267 0.234442 -5433.750221 0.206212 -5433.739479 0.229184 -5433.744963 0.200954 -5433.734221
<i>syn</i> -[(Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe) <sub>2</sub> μ-Me] <sup>+</sup>	E H H-qh TS G TS-qh G-qh TS-tr G-tr	-1302.135940 -1301.423892 -1301.430173 0.112724 -1301.536616 0.104683 -1301.534856				-1302.167826 -1301.455915 -1301.462006 0.111630 -1301.567545 0.104273 -1301.566279 0.106372 -1301.562287

	TS-qh-tr G-qh-tr					0.099015 -1301.561021
<i>anti</i> -[(Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe) <sub>2</sub> μ-Me] <sup>+</sup>	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-1302.139287 -1301.427453 -1301.433503 0.113356 -1301.540809 0.104345 -1301.537848				-1302.171217 -1301.459510 -1301.465414 0.112301 -1301.571811 0.103788 -1301.569202 0.107043 -1301.566553 0.098530 -1301.563944
<i>syn</i> -[(Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe) <sub>2</sub> μ-Me] <sup>+</sup> -toluene	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-1573.673082 -1572.822921 -1572.831368 0.129857 -1572.952778 0.119120 -1572.950488				-1573.704658 -1572.854796 -1572.863153 0.129719 -1572.984515 0.118803 -1572.981956 0.124461 -1572.979257 0.113545 -1572.976698
<i>anti</i> -[(Cp <sup>''</sup> <sub>2</sub> ZrMe) <sub>2</sub> μ-Me] <sup>+</sup> -toluene	<i>E</i> <i>H</i> <i>H</i> -qh <i>TS</i> <i>G</i> <i>TS</i> -qh <i>G</i> -qh <i>TS</i> -tr <i>G</i> -tr <i>TS</i> -qh-tr <i>G</i> -qh-tr	-1573.678473 -1572.828379 -1572.836623 0.128379 -1572.956758 0.118700 -1572.955323				-1573.709932 -1572.860269 -1572.868476 0.128962 -1572.989231 0.118421 -1572.986897 0.123704 -1572.983973 0.113163 -1572.981639

## Boltzmann Weighting of Equilibrium 2

As mentioned in the text, equilibrium 2 involves contact (CIP) and outer-sphere (OSIP) ion-pairs where more than one isomer of each could be located at the M06-2X/TZVP level of theory. In particular, eight to ten OSIP were within  $\Delta G\text{-qh-tr} = 10 \text{ kJ mol}^{-1}$  of the global minimum while three to seven CIP were within 10-20  $\text{kJ mol}^{-1}$  of the global minimum depending on the ligand set. Since dynamic simulations are not possible at this level of theory for systems of this size, we elected to average the individual  $\Delta G\text{-qh-tr}$  values for each possible CIP (+  $\text{Me}_3\text{Al}$ ) and OSIP by using the Boltzmann factors for each reactant, and product. This was achieved by setting up a matrix of these  $\Delta G\text{-qh-tr}$  values (shown below for the most complex EBI example).

	OSIP	$\Delta\Delta G \text{ (kJ mol}^{-1}\text{)}$	0.00	1.60	3.39	3.54	5.95	6.56	6.65	8.29	8.81	9.45
CIP		$\exp(-\Delta\Delta G/RT)$	1.00	0.54	0.27	0.26	0.10	0.08	0.08	0.04	0.03	0.03
$\Delta\Delta G \text{ (kJ mol}^{-1}\text{)}$	$\exp(-\Delta\Delta G/RT)$	mol fraction $x_i$	0.41	0.22	0.11	0.11	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01
0.00	1.00	0.36	31.55	29.95	28.16	28.01	25.60	24.99	24.90	23.26	22.74	22.10
2.45	0.39	0.14	34.00	32.39	30.61	30.45	28.05	27.43	27.34	25.71	25.18	24.55
2.75	0.35	0.12	34.30	32.70	30.91	30.76	28.35	27.74	27.65	26.01	25.49	24.85
2.81	0.34	0.12	34.36	32.76	30.98	30.82	28.42	27.80	27.71	26.07	25.55	24.91
2.86	0.33	0.12	34.41	32.81	31.02	30.87	28.46	27.85	27.76	26.12	25.60	24.96
2.99	0.32	0.11	34.54	32.93	31.15	30.99	28.59	27.97	27.89	26.25	25.72	25.09
6.98	0.07	0.02	38.53	36.93	35.14	34.99	32.59	31.97	31.88	30.24	29.72	29.08

Then, multiplying it in rows by the Boltzmann factors for the CIP and then in columns by the factors for the OSIP; the resulting matrix elements were then summed to provide the weighted average  $\Delta G\text{-qh-tr}$ . The results are summarized in the Table below, along with the numerical average  $\Delta G\text{-qh-tr}$  and a standard deviation to indicate the spread in those values.

Entry	$L_2$	$\Delta G\text{-qh-tr} \text{ (kJ mol}^{-1}\text{)}$		
		Global minimum values	Numerical average	Weighted average
1	$\text{Cp}_2$	24.2	24.4 (7.7)	23.2
2	EBI	31.6	29.1(3.6)	34.9
3	$\text{Me}_2\text{CCp}_2$	11.1	14.2(7.1)	9.7 <sub>6</sub>