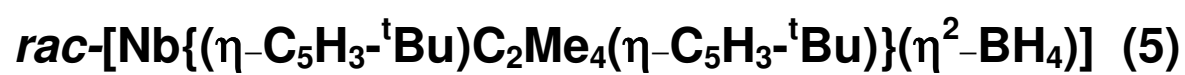


Appendix B

Crystallographic Data for



B.1 Crystal Data and Structure Refinement for *rac*-[Nb{(η-C₅H₃-^tBu)C₂Me₄(η-C₅H₃-^tBu)}(η²-BH₄)] (5)

Empirical formula	C ₁₆ H ₂₄ BNb	
Formula weight	432.30	
Temperature	125 K	
Wavelength (Mo-Kα)	0.71069 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P -1	
Unit cell dimensions	a = 9.98890(3) Å	α = 96.689(2)°
	b = 10.3510(3) Å	β = 108.360(2)°
	c = 12.6830(4) Å	γ = 108.838(2)°
Volume	1131.2 Å ³	
Z	2.00	
Density (calculated)	1.27 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.51 mm ⁻¹	
F(000)	455.58	
Crystal size	0.50 x 0.40 x 0.40 mm ³	
θ range for data collection	1.92 to 26.65°.	
Index ranges	0 ≤ h ≤ 9, -12 ≤ k ≤ 11, -14 ≤ l ≤ 13	
Reflections collected	6621	
Independent reflections	4262 [R(int) = 0.0060]	
Absorption correction	None	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F	
Weighting scheme	Statistical	
	w = (0.0010F + 6.00	
	*σ ² (F) + 6.00)	
Data / parameters [I > 3σ(I)]	4175/247	
Goodness-of-fit on F	1.1695	
Largest final shift	0.006258	
Final R indices	R = 0.0353, R _w = 0.0615	
Residual density	0.88 and -0.82 e.Å ⁻³	

B.2 Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for *rac*-[Nb{(η-C₅H₃-^tBu)C₂Me₄(η-C₅H₃-^tBu)}(η²-BH₄)] (5)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Nb(1)	9438(1)	4506(1)	2327(1)	12
C(1)	11210(3)	3481(3)	2453(2)	16
C(2)	12041(3)	4811(3)	3291(3)	17
C(3)	12199(3)	5903(3)	2708(3)	18
C(4)	11398(3)	5285(3)	1527(3)	19
C(5)	10785(3)	3783(3)	1342(2)	16
C(6)	8741(3)	2508(3)	3000(2)	16
C(7)	7589(3)	2169(3)	1867(2)	16
C(8)	6689(3)	2984(3)	1868(3)	16
C(9)	7328(3)	3902(3)	2969(3)	18
C(10)	8590(3)	3616(3)	3693(3)	19
C(11)	13279(4)	7436(3)	3275(3)	22
C(12)	14914(4)	7473(4)	3469(3)	31
C(13)	13210(5)	7932(4)	4439(3)	40
C(14)	12968(4)	8428(4)	2518(3)	31
C(15)	5199(3)	2754(3)	887(3)	18
C(16)	4045(4)	1295(4)	812(3)	25
C(17)	4551(4)	3867(4)	1122(3)	24
C(18)	5415(4)	2731(4)	-258(3)	24
C(21)	10945(3)	2023(3)	2707(3)	18
C(22)	9853(3)	1768(3)	3400(3)	17
C(23)	12528(4)	1994(4)	3384(3)	23
C(24)	10273(4)	915(3)	1557(3)	24
C(25)	10753(4)	2358(4)	4703(3)	24
C(26)	8904(4)	191(4)	3216(3)	28
B(1)	8752(5)	6435(4)	1861(4)	27
H(1)	9520(60)	6350(60)	2750(40)	50
H(2)	8530(60)	5400(60)	1370(40)	50
H(3)	9470(60)	7310(60)	1610(40)	50
H(4)	7650(60)	6600(60)	1820(50)	50
H(21)	12431	4952	4144	13
H(41)	11276	5829	918	13
H(51)	10176	3083	587	13
H(71)	7431	1454	1185	13
H(91)	6970	4648	3212	14
H(101)	9225	4095	4521	14
H(121)	15699	8444	3828	27
H(122)	14966	7141	2696	27
H(123)	15155	6822	3955	27
H(131)	13911	8935	4786	32

H(132)	13512	7336	4963	32
H(133)	12120	7834	4327	32
H(141)	13689	9418	2932	27
H(142)	13108	8162	1792	27
H(143)	11876	8365	2337	27
H(161)	3030	1086	174	19
H(162)	4445	556	653	19
H(163)	3873	1289	1549	19
H(171)	3563	3677	455	21
H(172)	5305	4824	1207	21
H(173)	4319	3827	1831	21
H(181)	4398	2559	-887	20
H(182)	6196	3633	-228	20
H(183)	5743	1935	-446	20
H(231)	12385	1042	3554	21
H(232)	13206	2171	2927	21
H(233)	13047	2728	4123	21
H(241)	10096	-42	1719	21
H(242)	10991	1117	1148	21
H(243)	9257	929	1076	21
H(251)	11478	1883	4979	21
H(252)	11332	3393	4872	21
H(253)	10002	2174	5104	21
H(261)	9617	-313	3486	27
H(262)	8224	75	3679	27
H(263)	8247	-240	2394	27

B.3 Bond Lengths [Å] and Angles [°] for *rac*-[Nb{(η-C₅H₃-^tBu)C₂Me₄

(η-C₅H₃-^tBu)}(η²-BH₄)] (5)

Nb(1)-C(1)	2.299(3)	Nb(1)-C(2)	2.372(3)
Nb(1)-C(3)	2.497(3)	Nb(1)-C(4)	2.420(3)
Nb(1)-C(5)	2.318(3)	Nb(1)-C(6)	2.311(3)
Nb(1)-C(7)	2.383(3)	Nb(1)-C(8)	2.497(3)
Nb(1)-C(9)	2.399(3)	Nb(1)-C(10)	2.311(3)
Nb(1)-B(1)	2.386(4)	Nb(1)-H(1)	1.89(5)
Nb(1)-H(2)	1.80(5)	C(1)-C(2)	1.441(4)
C(1)-C(5)	1.440(4)	C(1)-C(21)	1.537(4)
C(2)-C(3)	1.415(5)	C(2)-H(21)	1.003(3)
C(3)-C(4)	1.409(4)	C(3)-C(11)	1.527(4)
C(4)-C(5)	1.434(4)	C(4)-H(41)	1.007(3)
C(5)-H(51)	0.999(3)	C(6)-C(7)	1.441(4)
C(6)-C(10)	1.437(4)	C(6)-C(22)	1.529(4)
C(7)-C(8)	1.411(4)	C(7)-H(71)	1.006(3)

C(8)-C(9)	1.414(4)	C(8)-C(15)	1.524(4)
C(9)-C(10)	1.438(4)	C(9)-H(91)	1.003(3)
C(10)-H(101)	1.003(3)	C(11)-C(12)	1.544(5)
C(11)-C(13)	1.535(5)	C(11)-C(14)	1.522(5)
C(12)-H(121)	0.993(4)	C(12)-H(122)	1.022(4)
C(12)-H(123)	1.000(4)	C(13)-H(131)	0.995(4)
C(13)-H(132)	1.000(5)	C(13)-H(133)	1.011(5)
C(14)-H(141)	1.001(4)	C(14)-H(142)	0.994(4)
C(14)-H(143)	1.009(4)	C(15)-C(16)	1.541(4)
C(15)-C(17)	1.531(4)	C(15)-C(18)	1.532(4)
C(16)-H(161)	1.008(3)	C(16)-H(162)	0.996(3)
C(16)-H(163)	1.002(4)	C(17)-H(171)	1.013(3)
C(17)-H(172)	0.998(3)	C(17)-H(173)	0.997(3)
C(18)-H(181)	1.012(3)	C(18)-H(182)	0.989(3)
C(18)-H(183)	1.008(3)	C(21)-C(22)	1.574(4)
C(21)-C(23)	1.542(4)	C(21)-C(24)	1.547(4)
C(22)-C(25)	1.543(4)	C(22)-C(26)	1.543(4)
C(23)-H(231)	1.007(3)	C(23)-H(232)	1.005(3)
C(23)-H(233)	1.000(3)	C(24)-H(241)	1.006(3)
C(24)-H(242)	0.989(3)	C(24)-H(243)	1.004(3)
C(25)-H(251)	0.994(3)	C(25)-H(252)	0.998(4)
C(25)-H(253)	1.008(3)	C(26)-H(261)	1.007(4)
C(26)-H(262)	1.013(4)	C(26)-H(263)	0.993(4)
B(1)-H(1)	1.17(5)	B(1)-H(2)	1.09(5)
B(1)-H(3)	1.10(5)	B(1)-H(4)	1.14(5)
C(1)-Nb(1)-C(2)	35.9(1)	C(1)-Nb(1)-C(3)	57.6(1)
C(2)-Nb(1)-C(3)	33.66(11)	C(1)-Nb(1)-C(4)	58.5(1)
C(2)-Nb(1)-C(4)	56.9(1)	C(3)-Nb(1)-C(4)	33.2(1)
C(1)-Nb(1)-C(5)	36.3(1)	C(2)-Nb(1)-C(5)	59.3(1)
C(3)-Nb(1)-C(5)	57.5(1)	C(4)-Nb(1)-C(5)	35.2(1)
C(1)-Nb(1)-C(6)	70.6(1)	C(2)-Nb(1)-C(6)	87.47(11)
C(3)-Nb(1)-C(6)	120.99(11)	C(4)-Nb(1)-C(6)	128.24(11)
C(5)-Nb(1)-C(6)	96.1(1)	C(1)-Nb(1)-C(7)	85.8(1)
C(2)-Nb(1)-C(7)	115.59(11)	C(3)-Nb(1)-C(7)	143.3(1)
C(4)-Nb(1)-C(7)	125.8(1)	C(5)-Nb(1)-C(7)	91.8(1)
C(1)-Nb(1)-C(8)	119.3(1)	C(2)-Nb(1)-C(8)	145.08(11)
C(3)-Nb(1)-C(8)	176.34(9)	C(4)-Nb(1)-C(8)	144.2(1)
C(5)-Nb(1)-C(8)	118.9(1)	C(1)-Nb(1)-C(9)	128.79(11)
C(2)-Nb(1)-C(9)	129.8(1)	C(3)-Nb(1)-C(9)	149.6(1)
C(4)-Nb(1)-C(9)	172.4(1)	C(5)-Nb(1)-C(9)	148.6(1)
C(1)-Nb(1)-C(10)	97.17(11)	C(2)-Nb(1)-C(10)	95.19(11)
C(3)-Nb(1)-C(10)	123.47(11)	C(4)-Nb(1)-C(10)	151.78(11)
C(5)-Nb(1)-C(10)	129.92(11)	C(1)-Nb(1)-B(1)	145.36(13)
C(2)-Nb(1)-B(1)	121.45(12)	C(3)-Nb(1)-B(1)	90.93(12)
C(4)-Nb(1)-B(1)	87.44(13)	C(5)-Nb(1)-B(1)	116.44(13)
C(1)-Nb(1)-H(1)	135.9(15)	C(2)-Nb(1)-H(1)	101.5(15)
C(3)-Nb(1)-H(1)	79.7(15)	C(4)-Nb(1)-H(1)	92.3(15)
C(5)-Nb(1)-H(1)	127.3(15)	C(1)-Nb(1)-H(2)	136.9(16)
C(2)-Nb(1)-H(2)	133.3(16)	C(3)-Nb(1)-H(2)	99.6(16)

C(4)-Nb(1)-H(2)	82.3(16)	C(5)-Nb(1)-H(2)	101.0(16)
C(6)-Nb(1)-C(7)	35.7(1)	C(6)-Nb(1)-C(8)	57.6(1)
C(7)-Nb(1)-C(8)	33.5(1)	C(6)-Nb(1)-C(9)	58.6(1)
C(7)-Nb(1)-C(9)	56.8(1)	C(8)-Nb(1)-C(9)	33.5(1)
C(6)-Nb(1)-C(10)	36.2(1)	C(7)-Nb(1)-C(10)	59.2(1)
C(8)-Nb(1)-C(10)	57.8(1)	C(9)-Nb(1)-C(10)	35.5(1)
C(6)-Nb(1)-B(1)	144.00(13)	C(7)-Nb(1)-B(1)	122.96(12)
C(8)-Nb(1)-B(1)	91.48(12)	C(9)-Nb(1)-B(1)	85.54(13)
C(10)-Nb(1)-B(1)	113.63(13)	C(6)-Nb(1)-H(1)	134.1(15)
C(7)-Nb(1)-H(1)	136.8(15)	C(8)-Nb(1)-H(1)	103.7(15)
C(9)-Nb(1)-H(1)	82.9(15)	C(10)-Nb(1)-H(1)	97.9(15)
C(6)-Nb(1)-H(2)	138.9(16)	C(7)-Nb(1)-H(2)	106.2(16)
C(8)-Nb(1)-H(2)	81.4(16)	C(9)-Nb(1)-H(2)	90.1(16)
C(10)-Nb(1)-H(2)	124.8(16)	B(1)-Nb(1)-H(1)	28.9(15)
B(1)-Nb(1)-H(2)	25.7(17)	H(1)-Nb(1)-H(2)	54.6(22)
Nb(1)-C(1)-C(2)	74.80(17)	Nb(1)-C(1)-C(5)	72.53(16)
C(2)-C(1)-C(5)	107.3(3)	Nb(1)-C(1)-C(21)	121.79(19)
C(2)-C(1)-C(21)	125.7(3)	C(5)-C(1)-C(21)	126.9(3)
Nb(1)-C(2)-C(1)	69.30(16)	Nb(1)-C(2)-C(3)	78.04(18)
C(1)-C(2)-C(3)	108.5(3)	Nb(1)-C(2)-H(21)	117.9(2)
C(1)-C(2)-H(21)	126.4(3)	C(3)-C(2)-H(21)	125.1(3)
Nb(1)-C(3)-C(2)	68.30(16)	Nb(1)-C(3)-C(4)	70.39(17)
C(2)-C(3)-C(4)	107.9(3)	Nb(1)-C(3)-C(11)	134.4(2)
C(2)-C(3)-C(11)	124.2(3)	C(4)-C(3)-C(11)	127.1(3)
Nb(1)-C(4)-C(3)	76.37(17)	Nb(1)-C(4)-C(5)	68.50(15)
C(3)-C(4)-C(5)	109.3(3)	Nb(1)-C(4)-H(41)	121.0(2)
C(3)-C(4)-H(41)	124.4(3)	C(5)-C(4)-H(41)	126.2(3)
Nb(1)-C(5)-C(1)	71.12(15)	Nb(1)-C(5)-C(4)	76.34(17)
C(1)-C(5)-C(4)	106.8(3)	Nb(1)-C(5)-H(51)	117.7(2)
C(1)-C(5)-H(51)	126.8(3)	C(4)-C(5)-H(51)	126.4(3)
Nb(1)-C(6)-C(7)	74.87(17)	Nb(1)-C(6)-C(10)	71.88(17)
C(7)-C(6)-C(10)	107.3(3)	Nb(1)-C(6)-C(22)	121.32(19)
C(7)-C(6)-C(22)	126.0(3)	C(10)-C(6)-C(22)	126.6(3)
Nb(1)-C(7)-C(6)	69.41(16)	Nb(1)-C(7)-C(8)	77.67(17)
C(6)-C(7)-C(8)	109.0(3)	Nb(1)-C(7)-H(71)	120.0(2)
C(6)-C(7)-H(71)	126.0(3)	C(8)-C(7)-H(71)	125.0(3)
Nb(1)-C(8)-C(7)	68.81(16)	Nb(1)-C(8)-C(9)	69.44(16)
C(7)-C(8)-C(9)	107.4(3)	Nb(1)-C(8)-C(15)	132.4(2)
C(7)-C(8)-C(15)	124.4(3)	C(9)-C(8)-C(15)	127.9(3)
Nb(1)-C(9)-C(8)	77.07(17)	Nb(1)-C(9)-C(10)	68.92(16)
C(8)-C(9)-C(10)	109.6(3)	Nb(1)-C(9)-H(91)	119.8(2)
C(8)-C(9)-H(91)	125.6(3)	C(10)-C(9)-H(91)	124.8(3)
Nb(1)-C(10)-C(6)	71.89(16)	Nb(1)-C(10)-C(9)	75.60(17)
C(6)-C(10)-C(9)	106.6(3)	Nb(1)-C(10)-H(101)	118.5(2)
C(6)-C(10)-H(101)	127.3(3)	C(9)-C(10)-H(101)	126.1(3)
C(3)-C(11)-C(12)	105.4(3)	C(3)-C(11)-C(13)	111.6(3)
C(12)-C(11)-C(13)	108.8(3)	C(3)-C(11)-C(14)	112.7(3)
C(12)-C(11)-C(14)	108.3(3)	C(13)-C(11)-C(14)	109.9(3)
C(11)-C(12)-H(121)	110.9(4)	C(11)-C(12)-H(122)	109.1(3)
H(121)-C(12)-H(122)	108.2(3)	C(11)-C(12)-H(123)	110.7(3)
H(121)-C(12)-H(123)	110.1(3)	H(122)-C(12)-H(123)	107.7(4)

C(11)-C(13)-H(131)	110.1(3)	C(11)-C(13)-H(132)	109.9(4)
H(131)-C(13)-H(132)	109.9(4)	C(11)-C(13)-H(133)	109.3(3)
H(131)-C(13)-H(133)	109.0(4)	H(132)-C(13)-H(133)	108.6(3)
C(11)-C(14)-H(141)	109.7(3)	C(11)-C(14)-H(142)	110.0(3)
H(141)-C(14)-H(142)	109.9(3)	C(11)-C(14)-H(143)	109.3(3)
H(141)-C(14)-H(143)	108.7(3)	H(142)-C(14)-H(143)	109.2(4)
C(8)-C(15)-C(16)	105.9(3)	C(8)-C(15)-C(17)	111.6(3)
C(16)-C(15)-C(17)	109.0(2)	C(8)-C(15)-C(18)	111.9(2)
C(16)-C(15)-C(18)	108.4(3)	C(17)-C(15)-C(18)	109.9(3)
C(15)-C(16)-H(161)	109.4(3)	C(15)-C(16)-H(162)	110.1(3)
H(161)-C(16)-H(162)	109.1(3)	C(15)-C(16)-H(163)	109.8(3)
H(161)-C(16)-H(163)	108.7(3)	H(162)-C(16)-H(163)	109.6(4)
C(15)-C(17)-H(171)	109.3(3)	C(15)-C(17)-H(172)	110.2(3)
H(171)-C(17)-H(172)	108.6(3)	C(15)-C(17)-H(173)	110.2(3)
H(171)-C(17)-H(173)	108.7(3)	H(172)-C(17)-H(173)	109.8(3)
C(15)-C(18)-H(181)	109.3(3)	C(15)-C(18)-H(182)	110.8(3)
H(181)-C(18)-H(182)	109.4(3)	C(15)-C(18)-H(183)	109.6(3)
H(181)-C(18)-H(183)	107.9(3)	H(182)-C(18)-H(183)	109.8(3)
C(1)-C(21)-C(22)	108.4(2)	C(1)-C(21)-C(23)	108.1(2)
C(22)-C(21)-C(23)	112.2(2)	C(1)-C(21)-C(24)	108.3(2)
C(22)-C(21)-C(24)	113.2(2)	C(23)-C(21)-C(24)	106.4(2)
C(6)-C(22)-C(21)	108.2(2)	C(6)-C(22)-C(25)	108.5(3)
C(21)-C(22)-C(25)	112.3(2)	C(6)-C(22)-C(26)	108.7(2)
C(21)-C(22)-C(26)	112.5(3)	C(25)-C(22)-C(26)	106.6(3)
C(21)-C(23)-H(231)	109.6(3)	C(21)-C(23)-H(232)	110.6(3)
H(231)-C(23)-H(232)	108.5(3)	C(21)-C(23)-H(233)	110.2(3)
H(231)-C(23)-H(233)	108.9(3)	H(232)-C(23)-H(233)	109.1(3)
C(21)-C(24)-H(241)	108.7(3)	C(21)-C(24)-H(242)	110.6(3)
H(241)-C(24)-H(242)	109.9(3)	C(21)-C(24)-H(243)	108.9(3)
H(241)-C(24)-H(243)	108.7(3)	H(242)-C(24)-H(243)	110.1(3)
C(22)-C(25)-H(251)	109.6(3)	C(22)-C(25)-H(252)	109.7(3)
H(251)-C(25)-H(252)	110.1(3)	C(22)-C(25)-H(253)	109.1(3)
H(251)-C(25)-H(253)	109.3(3)	H(252)-C(25)-H(253)	109.0(3)
C(22)-C(26)-H(261)	109.9(3)	C(22)-C(26)-H(262)	109.9(3)
H(261)-C(26)-H(262)	107.9(3)	C(22)-C(26)-H(263)	110.6(3)
H(261)-C(26)-H(263)	109.5(3)	H(262)-C(26)-H(263)	109.1(3)
Nb(1)-B(1)-H(1)	51.2(27)	Nb(1)-B(1)-H(2)	45.8(27)
H(1)-B(1)-H(2)	97.0(37)	Nb(1)-B(1)-H(3)	123.6(27)
H(1)-B(1)-H(3)	108.1(36)	H(2)-B(1)-H(3)	112.8(38)
Nb(1)-B(1)-H(4)	127.3(27)	H(1)-B(1)-H(4)	116.3(37)
H(2)-B(1)-H(4)	113.1(37)	H(3)-B(1)-H(4)	109.1(39)
Nb(1)-H(1)-B(1)	99.8(34)	Nb(1)-H(2)-B(1)	108.6(36)

B.4 Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for

rac-[Nb{(η-C₅H₃-^tBu)C₂Me₄(η-C₅H₃-^tBu)}(η²-BH₄)] (5)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Nb(1)	13(1)	10(1)	12(1)	2(1)	4(1)	3(1)
C(1)	14(1)	18(1)	16(1)	3(1)	6(1)	7(1)
C(2)	12(1)	19(2)	14(1)	0(1)	2(1)	2(1)
C(3)	15(1)	20(2)	18(1)	3(1)	7(1)	4(1)
C(4)	19(1)	21(2)	17(1)	7(1)	10(1)	6(1)
C(5)	15(1)	19(1)	15(1)	2(1)	7(1)	7(1)
C(6)	18(1)	15(1)	14(1)	5(1)	7(1)	5(1)
C(7)	16(1)	14(1)	15(1)	0(1)	6(1)	2(1)
C(8)	15(1)	12(1)	19(1)	2(1)	7(1)	2(1)
C(9)	18(1)	17(1)	18(1)	4(1)	9(1)	6(1)
C(10)	20(1)	18(2)	16(1)	4(1)	8(1)	5(1)
C(11)	21(2)	19(2)	20(2)	1(1)	8(1)	0(1)
C(12)	17(2)	31(2)	34(2)	6(2)	6(1)	-1(1)
C(13)	47(2)	26(2)	29(2)	-11(2)	22(2)	-12(2)
C(14)	32(2)	16(2)	42(2)	8(2)	16(2)	4(1)
C(15)	12(1)	19(2)	20(1)	3(1)	5(1)	6(1)
C(16)	17(2)	24(2)	29(2)	0(1)	8(1)	5(1)
C(17)	20(2)	21(2)	29(2)	2(1)	7(1)	10(1)
C(18)	18(1)	32(2)	20(2)	4(1)	5(1)	10(1)
C(21)	18(1)	17(2)	17(1)	5(1)	5(1)	8(1)
C(22)	19(1)	14(1)	19(1)	8(1)	6(1)	8(1)
C(23)	25(2)	27(2)	22(2)	10(1)	8(1)	15(1)
C(24)	27(2)	21(2)	24(2)	2(1)	8(1)	12(1)
C(25)	27(2)	31(2)	17(1)	11(1)	9(1)	13(1)
C(26)	28(2)	19(2)	38(2)	13(2)	12(2)	9(1)
B(1)	24(2)	15(2)	40(2)	9(2)	6(2)	8(2)

B.5 Additional Structural Information for *rac*-[Nb{(η-C₅H₃-^tBu)C₂Me₄(η-C₅H₃-^tBu)}(η²-BH₄)] (5)

Nb-Cp ¹ _{cent}	2.0493 Å
Nb-Cp ¹ _{ave}	2.3800(18) Å
Nb-Cp ² _{cent}	2.0478 Å
Nb-Cp ² _{ave}	2.3796(18) Å
C _{ipso} -C _{ipso}	2.6649 Å
Between Cp planes, α	55.3°
Cp ¹ _{norm} -Nb-Cp ² _{norm} , β	124.7°
Cp ¹ _{cent} -Nb-Cp ² _{cent} , χ	133.6°
C _{ipso} -Cp plane, φ	-4.8°, -3.4°