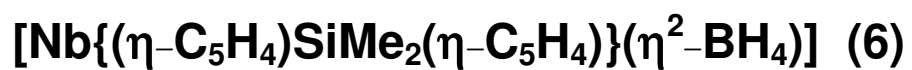


Appendix C

Crystallographic Data for



C.1 Crystal Data and Structure Refinement for $[\text{Nb}\{(\eta\text{-C}_5\text{H}_4)\text{SiMe}_2(\eta\text{-C}_5\text{H}_4)\}(\eta^2\text{-BH}_4)]$ (6)

Empirical formula	$\text{C}_{12}\text{H}_{18}\text{BNbSi}$	
Formula weight	294.08	
Temperature (Mo-K α)	150 K	
Wavelength	0.71069 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	$P12_1/n$	
Unit cell dimensions	$a = 8.600(2)$ Å $B = 10.449(2)$ Å $c = 14.838(3)$ Å	$\alpha = 90^\circ$ $\beta = 101.662(2)^\circ$ $\gamma = 90^\circ$
Volume	1305.8 Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.50 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.94 mm ⁻¹	
F(000)	591.39	
Crystal size	$0.20 \times 0.20 \times 0.20$ mm ³	
θ range for data collection	1.92 to 26.57° .	
Index ranges	$-10 \leq h \leq 10$, $0 \leq k \leq 13$, $0 \leq l \leq 18$	
Reflections collected	7764	
Independent reflections	2782 [R(int) = 0.024]	
Absorption correction	None	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F	
Weighting scheme	Statistical	
Data / parameters [$I > 3\sigma(I)$]	2634/148	
Goodness-of-fit on F	0.6076	
Largest final shift	0.00675	
Final R indices	$R = 0.0355$, $R_w = 0.0459$	
Residual density	0.45 and -0.47 e.Å ⁻³	

C.2 Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotropic Displacement

Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Nb}\{\eta\text{-C}_5\text{H}_4\}\text{SiMe}_2\{\eta\text{-C}_5\text{H}_4\}\{\eta^2\text{-BH}_4\}]$ (6)

$U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Nb(1)	5212(1)	4139(1)	7376(1)	19
Si(1)	3426(1)	3020(1)	8860(1)	22
C(1)	5001(4)	4251(3)	8899(2)	23
C(2)	4719(4)	5528(3)	8527(2)	27
C(3)	6154(5)	5985(3)	8325(3)	32
C(4)	7309(4)	5028(4)	8535(3)	33
C(5)	6634(4)	3945(3)	8884(2)	26
C(6)	3293(4)	2712(3)	7608(2)	23
C(7)	4460(4)	1998(3)	7248(2)	25
C(8)	4361(4)	2386(3)	6318(3)	28
C(9)	3200(4)	3335(3)	6101(2)	27
C(10)	2537(4)	3575(3)	6885(2)	24
C(11)	4144(5)	1600(4)	9571(3)	32
C(12)	1538(5)	3694(4)	9082(3)	37
B(1)	6602(6)	4908(5)	6258(4)	41
H(1)	5380(60)	5380(50)	6450(30)	50
H(2)	7040(60)	4040(50)	6790(30)	50
H(3)	7550(60)	5640(50)	6390(30)	50
H(4)	6360(60)	4570(50)	5570(40)	50
H(21)	3679	6013	8434	27
H(31)	6320	6848	8057	32
H(41)	8447	5101	8457	32
H(51)	7196	3117	9081	26
H(71)	5207	1337	7591	25
H(81)	5022	2032	5887	27
H(91)	2891	3778	5488	26
H(101)	1687	4223	6933	24
H(111)	3267	958	9532	32
H(112)	4519	1858	10230	32
H(113)	5052	1194	9343	32
H(121)	730	3004	9049	37
H(122)	1727	4105	9704	37
H(123)	1128	4364	8603	37

**C.3 Bond Lengths [Å] and Angles [°] for [Nb{(η-C₅H₄)SiMe₂(η-C₅H₄)}
(η²-BH₄)] (6)**

Nb(1)-C(1)	2.307(3)	Nb(1)-C(2)	2.345(4)
Nb(1)-C(3)	2.429(4)	Nb(1)-C(4)	2.412(4)
Nb(1)-C(5)	2.332(3)	Nb(1)-C(6)	2.301(3)
Nb(1)-C(7)	2.325(3)	Nb(1)-C(8)	2.426(4)
Nb(1)-C(9)	2.440(3)	Nb(1)-C(10)	2.344(3)
Nb(1)-B(1)	2.373(5)	Nb(1)-H(1)	1.92(5)
Nb(1)-H(2)	1.95(5)	Si(1)-C(1)	1.860(4)
Si(1)-C(6)	1.865(4)	Si(1)-C(11)	1.853(4)
Si(1)-C(12)	1.859(4)	C(1)-C(2)	1.446(5)
C(1)-C(5)	1.445(5)	C(2)-C(3)	1.411(5)
C(2)-H(21)	1.012(4)	C(3)-C(4)	1.400(6)
C(3)-H(31)	1.006(4)	C(4)-C(5)	1.416(5)
C(4)-H(41)	1.011(4)	C(5)-H(51)	1.006(4)
C(6)-C(7)	1.437(5)	C(6)-C(10)	1.451(5)
C(7)-C(8)	1.424(5)	C(7)-H(71)	1.008(4)
C(8)-C(9)	1.397(5)	C(8)-H(81)	1.008(4)
C(9)-C(10)	1.418(5)	C(9)-H(91)	1.008(4)
C(10)-H(101)	1.009(3)	C(11)-H(111)	1.002(4)
C(11)-H(112)	1.002(4)	C(11)-H(113)	1.005(4)
C(12)-H(121)	0.996(4)	C(12)-H(122)	1.001(4)
C(12)-H(123)	1.009(4)	B(1)-H(1)	1.24(5)
B(1)-H(2)	1.21(5)	B(1)-H(3)	1.11(5)
B(1)-H(4)	1.06(5)		
C(1)-Nb(1)-C(2)	36.22(12)	C(1)-Nb(1)-C(3)	58.31(12)
C(2)-Nb(1)-C(3)	34.32(13)	C(1)-Nb(1)-C(4)	58.49(13)
C(2)-Nb(1)-C(4)	57.41(13)	C(3)-Nb(1)-C(4)	33.60(14)
C(1)-Nb(1)-C(5)	36.30(13)	C(2)-Nb(1)-C(5)	59.46(13)
C(3)-Nb(1)-C(5)	57.58(13)		
C(4)-Nb(1)-C(5)	34.69(13)	C(1)-Nb(1)-C(6)	71.65(12)
C(2)-Nb(1)-C(6)	92.93(12)	C(3)-Nb(1)-C(6)	126.35(13)
C(4)-Nb(1)-C(6)	126.73(13)	C(5)-Nb(1)-C(6)	93.03(12)
C(1)-Nb(1)-C(7)	93.04(12)	C(2)-Nb(1)-C(7)	124.52(13)
C(3)-Nb(1)-C(7)	149.98(13)	C(4)-Nb(1)-C(7)	125.74(13)
C(5)-Nb(1)-C(7)	94.48(12)	C(1)-Nb(1)-C(8)	126.79(12)
C(2)-Nb(1)-C(8)	149.66(13)	C(3)-Nb(1)-C(8)	174.90(13)
C(4)-Nb(1)-C(8)	146.74(13)	C(5)-Nb(1)-C(8)	125.90(13)
C(1)-Nb(1)-C(9)	126.38(12)	C(2)-Nb(1)-C(9)	124.98(13)
C(3)-Nb(1)-C(9)	145.47(13)	C(4)-Nb(1)-C(9)	174.88(12)
C(5)-Nb(1)-C(9)	150.02(12)	C(1)-Nb(1)-C(10)	92.89(12)
C(2)-Nb(1)-C(10)	94.07(13)	C(3)-Nb(1)-C(10)	124.81(13)
C(4)-Nb(1)-C(10)	149.73(13)	C(5)-Nb(1)-C(10)	124.61(13)
C(1)-Nb(1)-B(1)	144.93(16)	C(2)-Nb(1)-B(1)	119.36(17)
C(3)-Nb(1)-B(1)	88.86(17)	C(4)-Nb(1)-B(1)	87.62(16)
C(5)-Nb(1)-B(1)	117.38(16)	C(1)-Nb(1)-H(1)	134.6(15)
C(2)-Nb(1)-H(1)	99.0(15)	C(3)-Nb(1)-H(1)	79.4(15)

C(4)-Nb(1)-H(1)	95.7(15)	C(5)-Nb(1)-H(1)	130.4(15)
C(1)-Nb(1)-H(2)	132.3(15)	C(2)-Nb(1)-H(2)	129.9(14)
C(3)-Nb(1)-H(2)	95.6(14)	C(4)-Nb(1)-H(2)	77.7(15)
C(5)-Nb(1)-H(2)	96.4(15)	C(6)-Nb(1)-C(7)	36.20(12)
C(6)-Nb(1)-C(8)	58.42(12)	C(7)-Nb(1)-C(8)	34.80(12)
C(6)-Nb(1)-C(9)	58.37(12)	C(7)-Nb(1)-C(9)	57.58(12)
C(8)-Nb(1)-C(9)	33.37(12)	C(6)-Nb(1)-C(10)	36.40(12)
C(7)-Nb(1)-C(10)	59.58(12)	C(8)-Nb(1)-C(10)	57.36(12)
C(9)-Nb(1)-C(10)	34.40(12)	C(6)-Nb(1)-B(1)	143.35(16)
C(7)-Nb(1)-B(1)	116.12(17)	C(8)-Nb(1)-B(1)	86.12(16)
C(9)-Nb(1)-B(1)	87.31(16)	C(10)-Nb(1)-B(1)	118.00(15)
C(6)-Nb(1)-H(1)	134.8(15)	C(7)-Nb(1)-H(1)	130.6(15)
C(8)-Nb(1)-H(1)	95.8(15)	C(9)-Nb(1)-H(1)	79.5(15)
C(10)-Nb(1)-H(1)	99.0(15)	C(6)-Nb(1)-H(2)	134.4(14)
C(7)-Nb(1)-H(2)	98.5(14)	C(8)-Nb(1)-H(2)	80.5(14)
C(9)-Nb(1)-H(2)	98.2(15)	C(10)-Nb(1)-H(2)	132.6(15)
B(1)-Nb(1)-H(1)	31.5(15)	B(1)-Nb(1)-H(2)	30.5(14)
H(1)-Nb(1)-H(2)	62.0(20)	C(1)-Si(1)-C(6)	92.76(15)
C(1)-Si(1)-C(11)	112.26(16)	C(6)-Si(1)-C(11)	112.04(17)
C(1)-Si(1)-C(12)	112.90(18)	C(6)-Si(1)-C(12)	111.21(17)
C(11)-Si(1)-C(12)	113.88(19)	Nb(1)-C(1)-Si(1)	97.78(14)
Nb(1)-C(1)-C(2)	73.31(19)	Si(1)-C(1)-C(2)	124.1(3)
Nb(1)-C(1)-C(5)	72.8(2)	Si(1)-C(1)-C(5)	123.4(3)
C(2)-C(1)-C(5)	106.7(3)	Nb(1)-C(2)-C(1)	70.46(19)
Nb(1)-C(2)-C(3)	76.1(2)	C(1)-C(2)-C(3)	107.9(3)
Nb(1)-C(2)-H(21)	119.7(3)	C(1)-C(2)-H(21)	126.1(4)
C(3)-C(2)-H(21)	126.0(4)	Nb(1)-C(3)-C(2)	69.6(2)
Nb(1)-C(3)-C(4)	72.5(2)	C(2)-C(3)-C(4)	108.8(3)
Nb(1)-C(3)-H(31)	122.7(3)	C(2)-C(3)-H(31)	125.9(4)
C(4)-C(3)-H(31)	125.2(4)	Nb(1)-C(4)-C(3)	73.9(2)
Nb(1)-C(4)-C(5)	69.5(2)	C(3)-C(4)-C(5)	109.1(3)
Nb(1)-C(4)-H(41)	123.3(3)	C(3)-C(4)-H(41)	125.5(4)
C(5)-C(4)-H(41)	125.4(4)	Nb(1)-C(5)-C(1)	70.92(19)
Nb(1)-C(5)-C(4)	75.8(2)	C(1)-C(5)-C(4)	107.5(3)
Nb(1)-C(5)-H(51)	118.8(3)	C(1)-C(5)-H(51)	126.7(3)
C(4)-C(5)-H(51)	125.9(4)	Nb(1)-C(6)-Si(1)	97.81(14)
Nb(1)-C(6)-C(7)	72.82(19)	Si(1)-C(6)-C(7)	123.6(3)
Nb(1)-C(6)-C(10)	73.40(19)	Si(1)-C(6)-C(10)	123.9(3)
C(7)-C(6)-C(10)	106.9(3)	Nb(1)-C(7)-C(6)	70.99(18)
Nb(1)-C(7)-C(8)	76.5(2)	C(6)-C(7)-C(8)	107.6(3)
Nb(1)-C(7)-H(71)	118.7(2)	C(6)-C(7)-H(71)	126.2(3)
C(8)-C(7)-H(71)	126.2(3)	Nb(1)-C(8)-C(7)	68.72(19)
Nb(1)-C(8)-C(9)	73.8(2)	C(7)-C(8)-C(9)	109.0(3)
Nb(1)-C(8)-H(81)	123.5(3)	C(7)-C(8)-H(81)	125.4(4)
C(9)-C(8)-H(81)	125.6(4)	Nb(1)-C(9)-C(8)	72.8(2)
Nb(1)-C(9)-C(10)	69.10(19)	C(8)-C(9)-C(10)	108.9(3)
Nb(1)-C(9)-H(91)	123.9(3)	C(8)-C(9)-H(91)	125.4(4)
C(10)-C(9)-H(91)	125.7(3)	Nb(1)-C(10)-C(6)	70.20(18)
Nb(1)-C(10)-C(9)	76.5(2)	C(6)-C(10)-C(9)	107.6(3)
Nb(1)-C(10)-H(101)	119.3(2)	C(6)-C(10)-H(101)	125.9(3)
C(9)-C(10)-H(101)	126.5(3)	Si(1)-C(11)-H(111)	110.0(3)

Si(1)-C(11)-H(112)	110.2(3)	H(111)-C(11)-H(112)	109.1(4)
Si(1)-C(11)-H(113)	109.8(3)	H(111)-C(11)-H(113)	108.9(4)
H(112)-C(11)-H(113)	108.9(4)	Si(1)-C(12)-H(121)	110.1(3)
Si(1)-C(12)-H(122)	109.9(3)	H(121)-C(12)-H(122)	109.7(4)
Si(1)-C(12)-H(123)	109.4(3)	H(121)-C(12)-H(123)	109.1(4)
H(122)-C(12)-H(123)	108.7(4)	Nb(1)-B(1)-H(1)	53.8(23)
Nb(1)-B(1)-H(2)	55.1(24)	H(1)-B(1)-H(2)	108.7(33)
Nb(1)-B(1)-H(3)	124.6(27)	H(1)-B(1)-H(3)	108.1(35)
H(2)-B(1)-H(3)	106.6(34)	Nb(1)-B(1)-H(4)	121.8(27)
H(1)-B(1)-H(4)	109.6(35)	H(2)-B(1)-H(4)	110.0(36)
H(3)-B(1)-H(4)	113.7(38)	Nb(1)-H(1)-B(1)	94.7(29)
Nb(1)-H(2)-B(1)	94.4(29)		

C.4 Anisotropic Displacement Parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Nb}\{\eta\text{-C}_5\text{H}_4\}\text{SiMe}_2(\eta\text{-C}_5\text{H}_4)\{\eta^2\text{-BH}_4\}]$ (6)

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)	18(1)	17(1)	21(1)	1(1)	3(1)	0(1)
Si(1)	22(1)	21(1)	22(1)	1(1)	5(1)	0(1)
C(1)	28(2)	23(2)	17(2)	-2(1)	1(1)	0(1)
C(2)	35(2)	20(2)	27(2)	-4(1)	4(2)	-1(1)
C(3)	43(2)	23(2)	29(2)	-4(1)	3(2)	-13(2)
C(4)	27(2)	37(2)	31(2)	-1(2)	1(2)	-10(2)
C(5)	24(2)	26(2)	26(2)	1(1)	-2(1)	-2(1)
C(6)	23(2)	19(2)	27(2)	-1(1)	3(1)	-2(1)
C(7)	31(2)	18(2)	26(2)	-5(1)	4(1)	-4(1)
C(8)	32(2)	25(2)	28(2)	-6(1)	8(1)	0(1)
C(9)	26(2)	29(2)	24(2)	0(1)	-1(1)	-3(1)
C(10)	21(2)	23(2)	25(2)	0(1)	-1(1)	-1(1)
C(11)	35(2)	25(2)	35(2)	5(2)	6(2)	-2(2)
C(12)	30(2)	43(2)	41(2)	2(2)	15(2)	5(2)
B(1)	38(3)	53(3)	36(2)	6(2)	13(2)	-10(2)

**C.5 Additional Structural Information for [Nb{(η-C₅H₄)SiMe₂(η-C₅H₄)}
(η²-BH₄)] (6)**

Nb-Cp ¹ _{cent}	2.0350 Å
Nb-Cp ¹ _{ave}	2.365(4) Å
Nb-Cp ² _{cent}	2.0329 Å
Nb-Cp ² _{ave}	2.367(3) Å
C _{ipso} -C _{ipso}	2.6991 Å
Cp ¹ _{norm} -Nb-Cp ² _{norm} , β	127.2°
Cp ¹ _{cent} -Nb-Cp ² _{cent} , χ	135.69°
C _{ipso} -Cp plane, φ	20.8°, 20.4°
C _{ipso} -Si-C _{ipso} , ε	92.79(9)°