

Table 1. Final fractional atomic coordinates and equivalent isotropic thermal displacement parameters for non-H atoms of Cp''[Ph₃SiO]₂ZrCl (9) with e.s.d.'s in parentheses.

<i>Atom</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>s.o.f.</i>	<i>U</i> _{eq} (Å ²)*
Zr	0.19688(1)	0.15916(1)	0.30586(5)	1.(-)	0.0306(2)
Cl	0.20270(4)	0.14680(5)	0.51145(17)	1.(-)	0.0647(6)
Si(1)	0.11392(4)	0.13873(4)	0.44332(17)	1.(-)	0.0421(6)
Si(2d)	0.16995(13)	0.1370(3)	-0.0281(5)	0.55(3)	0.0481(19)
Si(3)	0.22384(4)	0.24172(4)	0.32907(15)	1.(-)	0.0375(5)
Si(4)	0.26633(3)	0.16164(4)	0.20430(14)	1.(-)	0.0283(4)
O(1)	0.21098(10)	0.20368(10)	0.3120(4)	1.(-)	0.0412(12)
O(2)	0.23164(9)	0.15863(9)	0.2241(3)	1.(-)	0.0335(11)
C(1)	0.13673(12)	0.13219(14)	0.3206(6)	1.(-)	0.0350(19)
C(2)	0.14588(14)	0.14798(17)	0.2084(6)	1.(-)	0.043(2)
C(3)	0.15956(16)	0.1341(2)	0.1329(7)	1.(-)	0.060(3)
C(4)	0.15771(16)	0.10859(19)	0.1994(7)	1.(-)	0.058(3)
C(5)	0.14418(15)	0.10722(16)	0.3134(7)	1.(-)	0.0471(19)
C(6b)	0.0873(10)	0.1006(8)	0.520(5)	0.53(7)	0.080(13)
C(7b)	0.0829(13)	0.1424(19)	0.360(3)	0.53(7)	0.13(2)
C(8b)	0.1417(8)	0.1676(9)	0.556(3)	0.53(7)	0.081(10)
C(9d)	0.1328(4)	0.1240(7)	-0.1180(14)	0.55(3)	0.081(8)
C(10d)	0.1869(5)	0.1117(5)	-0.0697(18)	0.55(3)	0.062(6)
C(11d)	0.1970(5)	0.1803(5)	-0.052(2)	0.55(3)	0.066(8)
C(12)	0.18889(16)	0.24752(16)	0.3362(6)	1.(-)	0.044(2)
C(13)	0.17152(15)	0.24348(17)	0.2313(7)	1.(-)	0.048(2)
C(14)	0.14478(19)	0.2467(2)	0.2328(9)	1.(-)	0.074(3)
C(15)	0.1355(3)	0.2536(3)	0.3378(12)	1.(-)	0.097(5)
C(16)	0.1509(3)	0.2574(3)	0.4395(10)	1.(-)	0.099(5)
C(17)	0.1788(3)	0.2556(2)	0.4415(8)	1.(-)	0.076(4)
C(18)	0.24843(17)	0.25542(16)	0.4714(6)	1.(-)	0.043(2)
C(19)	0.23900(17)	0.23722(18)	0.5754(7)	1.(-)	0.052(2)

Table 1 continued.

C(20)	0.25781(18)	0.24737(19)	0.6813(6)	1.(-)	0.054(3)
C(21)	0.2861(2)	0.2751(2)	0.6798(7)	1.(-)	0.062(3)
C(22)	0.2959(2)	0.2924(2)	0.5766(8)	1.(-)	0.075(3)
C(23)	0.2775(2)	0.28334(17)	0.4720(7)	1.(-)	0.064(3)
C(24)	0.24855(15)	0.26440(16)	0.1979(5)	1.(-)	0.040(2)
C(25)	0.24982(15)	0.29226(16)	0.1603(6)	1.(-)	0.044(2)
C(26)	0.26864(16)	0.30999(17)	0.0652(7)	1.(-)	0.050(2)
C(27)	0.28659(19)	0.3011(2)	0.0031(7)	1.(-)	0.064(3)
C(28)	0.2858(3)	0.2735(3)	0.0367(8)	1.(-)	0.084(4)
C(29)	0.2673(2)	0.2555(2)	0.1332(7)	1.(-)	0.067(3)
C(30)	0.29017(13)	0.17758(12)	0.3468(5)	1.(-)	0.0290(17)
C(31)	0.28760(13)	0.19975(13)	0.4190(5)	1.(-)	0.0310(17)
C(32)	0.30616(15)	0.21226(14)	0.5224(6)	1.(-)	0.039(2)
C(33)	0.32735(14)	0.20229(15)	0.5573(6)	1.(-)	0.0402(17)
C(34)	0.32963(14)	0.17996(15)	0.4872(6)	1.(-)	0.0397(19)
C(35)	0.31177(13)	0.16819(14)	0.3838(5)	1.(-)	0.0331(17)
C(36)	0.28825(13)	0.18893(13)	0.0756(5)	1.(-)	0.0323(17)
C(37)	0.31789(14)	0.21549(15)	0.0930(6)	1.(-)	0.0390(19)
C(38)	0.33520(16)	0.23521(16)	-0.0044(6)	1.(-)	0.045(2)
C(39)	0.32249(17)	0.22880(16)	-0.1191(6)	1.(-)	0.048(2)
C(40)	0.29330(17)	0.20278(16)	-0.1385(6)	1.(-)	0.046(2)
C(41)	0.27597(15)	0.18275(14)	-0.0420(6)	1.(-)	0.0397(19)
C(42)	0.26052(14)	0.12154(13)	0.1697(5)	1.(-)	0.0329(17)
C(43)	0.27959(14)	0.11776(14)	0.0870(6)	1.(-)	0.0377(19)
C(44)	0.27716(15)	0.08858(15)	0.0656(6)	1.(-)	0.044(2)
C(45)	0.25546(19)	0.06273(17)	0.1276(7)	1.(-)	0.058(3)
C(46)	0.2365(2)	0.06577(18)	0.2107(8)	1.(-)	0.074(3)
C(47)	0.23871(18)	0.09486(15)	0.2321(7)	1.(-)	0.053(2)
Si(2c)	0.17237(17)	0.1532(5)	-0.0341(6)	0.45(3)	0.057(3)
C(6a)	0.0997(18)	0.1051(11)	0.550(5)	0.47(7)	0.097(19)
C(7a)	0.0936(8)	0.1586(9)	0.375(4)	0.47(7)	0.073(11)

Table 1 continued.

C(8a)	0.1369(9)	0.1756(9)	0.532(4)	0.47(7)	0.093(11)
C(9c)	0.1381(6)	0.1530(11)	-0.111(2)	0.45(3)	0.114(16)
C(10c)	0.1825(8)	0.1247(7)	-0.105(3)	0.45(3)	0.090(11)
C(11c)	0.2088(5)	0.1932(6)	-0.039(3)	0.45(3)	0.062(9)

*) $U_{eq} = 1/3 \sum_i \sum_j U_{ij} \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$

Table 2. Interatomic Distances (Å) of Cp''[Ph₃SiO]₂ZrCl (9).

Zr	-Cl	2.393(2)	C(15)	-C(16)	1.307(19)
Zr	-O(1)	1.921(4)	C(16)	-C(17)	1.41(2)
Zr	-O(2)	1.929(5)	C(18)	-C(19)	1.378(10)
Zr	-C(1)	2.547(7)	C(18)	-C(23)	1.389(11)
Zr	-C(2)	2.503(8)	C(19)	-C(20)	1.410(11)
Zr	-C(3)	2.489(8)	C(20)	-C(21)	1.365(13)
Zr	-C(4)	2.526(8)	C(21)	-C(22)	1.351(12)
Zr	-C(5)	2.550(7)	C(22)	-C(23)	1.388(13)
Si(1)	-C(1)	1.874(7)	C(24)	-C(25)	1.39(1)
Si(1)	-C(6b)	1.85(4)	C(24)	-C(29)	1.387(13)
Si(1)	-C(7b)	1.85(7)	C(25)	-C(26)	1.374(10)
Si(1)	-C(8b)	1.86(4)	C(26)	-C(27)	1.341(13)
Si(1)	-C(6a)	1.85(5)	C(27)	-C(28)	1.376(16)
Si(1)	-C(7a)	1.85(4)	C(28)	-C(29)	1.385(14)
Si(1)	-C(8a)	1.85(4)	C(30)	-C(31)	1.396(8)
Si(2d)	-C(3)	1.828(10)	C(30)	-C(35)	1.401(10)
Si(2d)	-C(9d)	1.87(3)	C(31)	-C(32)	1.390(9)
Si(2d)	-C(10d)	1.85(3)	C(32)	-C(33)	1.396(11)
Si(2d)	-C(11d)	1.86(2)	C(33)	-C(34)	1.382(10)
Si(3)	-O(1)	1.643(5)	C(34)	-C(35)	1.371(9)
Si(3)	-C(12)	1.861(9)	C(36)	-C(37)	1.388(9)
Si(3)	-C(18)	1.879(7)	C(36)	-C(41)	1.393(9)
Si(3)	-C(24)	1.849(6)	C(37)	-C(38)	1.404(9)
Si(4)	-O(2)	1.636(5)	C(38)	-C(39)	1.371(10)
Si(4)	-C(30)	1.872(6)	C(39)	-C(40)	1.368(11)
Si(4)	-C(36)	1.868(6)	C(40)	-C(41)	1.403(9)
Si(4)	-C(42)	1.867(6)	C(42)	-C(43)	1.377(10)
C(1)	-C(2)	1.404(9)	C(42)	-C(47)	1.381(9)
C(1)	-C(5)	1.435(10)	C(43)	-C(44)	1.386(9)
C(2)	-C(3)	1.429(11)	C(44)	-C(45)	1.355(10)
C(3)	-C(4)	1.405(12)	C(45)	-C(46)	1.359(13)

Table 2 continued.

C(4)	-C(5)	1.402(11)	C(46)	-C(47)	1.386(11)
C(12)	-C(13)	1.385(11)	Si(2c)	-C(3)	2.012(13)
C(12)	-C(17)	1.390(13)	Si(2c)	-C(9c)	1.87(4)
C(13)	-C(14)	1.388(13)	Si(2c)	-C(10c)	1.86(4)
C(14)	-C(15)	1.343(17)	Si(2c)	-C(11c)	1.87(3)

Table 3. Bond angles (deg.) of Cp''[Ph₃SiO]₂ZrCl (9).

Cl	-Zr	-O(1)	103.32(14)	C(12)	-Si(3)	-C(18)	112.3(3)
Cl	-Zr	-O(2)	102.82(13)	C(12)	-Si(3)	-C(24)	108.3(3)
Cl	-Zr	-C(1)	93.47(16)	C(18)	-Si(3)	-C(24)	109.2(3)
Cl	-Zr	-C(2)	125.42(17)	O(2)	-Si(4)	-C(30)	108.9(3)
Cl	-Zr	-C(3)	138.4(2)	O(2)	-Si(4)	-C(36)	111.2(3)
Cl	-Zr	-C(4)	108.63(19)	O(2)	-Si(4)	-C(42)	108.9(3)
Cl	-Zr	-C(5)	84.65(18)	C(30)	-Si(4)	-C(36)	108.9(3)
O(1)	-Zr	-O(2)	102.17(19)	C(30)	-Si(4)	-C(42)	110.0(3)
O(1)	-Zr	-C(1)	104.5(2)	C(36)	-Si(4)	-C(42)	108.9(3)
O(1)	-Zr	-C(2)	90.9(2)	Zr	-O(1)	-Si(3)	175.3(3)
O(1)	-Zr	-C(3)	110.0(2)	Zr	-O(2)	-Si(4)	159.3(2)
O(1)	-Zr	-C(4)	141.9(2)	Zr	-C(1)	-Si(1)	125.8(3)
O(1)	-Zr	-C(5)	137.2(2)	Zr	-C(1)	-C(2)	72.1(4)
O(2)	-Zr	-C(1)	144.48(18)	Zr	-C(1)	-C(5)	73.8(4)
O(2)	-Zr	-C(2)	125.45(19)	Si(1)	-C(1)	-C(2)	126.4(5)
O(2)	-Zr	-C(3)	93.9(2)	Si(1)	-C(1)	-C(5)	127.3(5)
O(2)	-Zr	-C(4)	90.6(2)	C(2)	-C(1)	-C(5)	105.7(6)
O(2)	-Zr	-C(5)	117.2(2)	Zr	-C(2)	-C(1)	75.6(4)
C(1)	-Zr	-C(2)	32.3(2)	Zr	-C(2)	-C(3)	72.8(5)
C(1)	-Zr	-C(3)	55.0(2)	C(1)	-C(2)	-C(3)	110.3(6)
C(1)	-Zr	-C(4)	54.1(2)	Zr	-C(3)	-Si(2d)	126.6(5)
C(1)	-Zr	-C(5)	32.7(2)	Zr	-C(3)	-C(2)	73.9(4)
C(2)	-Zr	-C(3)	33.3(3)	Zr	-C(3)	-C(4)	75.2(5)
C(2)	-Zr	-C(4)	53.5(3)	Zr	-C(3)	-Si(2c)	119.3(6)
C(2)	-Zr	-C(5)	53.2(2)	Si(2d)	-C(3)	-C(2)	134.7(7)
C(3)	-Zr	-C(4)	32.5(3)	Si(2d)	-C(3)	-C(4)	117.7(7)
C(3)	-Zr	-C(5)	54.0(3)	C(2)	-C(3)	-C(4)	106.1(7)
C(4)	-Zr	-C(5)	32.1(3)	C(2)	-C(3)	-Si(2c)	115.0(8)
C(1)	-Si(1)	-C(6b)	109.5(16)	C(4)	-C(3)	-Si(2c)	138.8(8)
C(1)	-Si(1)	-C(7b)	104.0(15)	Zr	-C(4)	-C(3)	72.3(5)
C(1)	-Si(1)	-C(8b)	109.9(13)	Zr	-C(4)	-C(5)	74.9(4)

Table 3 continued.

C(1)	-Si(1)	-C(6a)	107.(2)	C(3)	-C(4)	-C(5)	109.2(7)
C(1)	-Si(1)	-C(7a)	108.3(14)	Zr	-C(5)	-C(1)	73.5(4)
C(1)	-Si(1)	-C(8a)	115.0(15)	Zr	-C(5)	-C(4)	73.0(4)
C(6b)	-Si(1)	-C(7b)	97.(3)	C(1)	-C(5)	-C(4)	108.7(6)
C(6b)	-Si(1)	-C(8b)	110.(2)	Si(3)	-C(12)	-C(13)	118.9(6)
C(7b)	-Si(1)	-C(8b)	125.(3)	Si(3)	-C(12)	-C(17)	123.9(7)
C(6a)	-Si(1)	-C(7a)	131.(3)	C(13)	-C(12)	-C(17)	117.2(9)
C(6a)	-Si(1)	-C(8a)	108.(2)	C(12)	-C(13)	-C(14)	121.0(8)
C(7a)	-Si(1)	-C(8a)	85.9(19)	C(13)	-C(14)	-C(15)	119.4(10)
C(3)	-Si(2d)	-C(9d)	107.6(8)	C(14)	-C(15)	-C(16)	122.0(15)
C(3)	-Si(2d)	-C(10d)	112.7(8)	C(15)	-C(16)	-C(17)	120.6(12)
C(3)	-Si(2d)	-C(11d)	103.6(9)	C(12)	-C(17)	-C(16)	119.7(10)
C(9d)	-Si(2d)	-C(10d)	108.8(12)	Si(3)	-C(18)	-C(19)	121.0(6)
C(9d)	-Si(2d)	-C(11d)	109.0(13)	Si(3)	-C(18)	-C(23)	120.6(5)
C(10d)	-Si(2d)	-C(11d)	114.8(12)	C(19)	-C(18)	-C(23)	118.3(7)
O(1)	-Si(3)	-C(12)	108.3(3)	C(18)	-C(19)	-C(20)	120.7(7)
O(1)	-Si(3)	-C(18)	108.2(3)	C(19)	-C(20)	-C(21)	119.6(7)
O(1)	-Si(3)	-C(24)	110.6(3)	C(20)	-C(21)	-C(22)	119.7(8)
C(21)	-C(22)	-C(23)	121.8(8)	C(37)	-C(36)	-C(41)	117.6(5)
C(18)	-C(23)	-C(22)	119.7(7)	C(36)	-C(37)	-C(38)	121.4(6)
Si(3)	-C(24)	-C(25)	120.9(6)	C(37)	-C(38)	-C(39)	119.9(7)
Si(3)	-C(24)	-C(29)	123.2(6)	C(38)	-C(39)	-C(40)	119.8(6)
C(25)	-C(24)	-C(29)	116.0(6)	C(39)	-C(40)	-C(41)	120.8(6)
C(24)	-C(25)	-C(26)	122.0(7)	C(36)	-C(41)	-C(40)	120.5(6)
C(25)	-C(26)	-C(27)	121.5(7)	Si(4)	-C(42)	-C(43)	121.0(4)
C(26)	-C(27)	-C(28)	118.3(9)	Si(4)	-C(42)	-C(47)	121.7(5)
C(27)	-C(28)	-C(29)	121.1(12)	C(43)	-C(42)	-C(47)	117.1(6)
C(24)	-C(29)	-C(28)	121.1(9)	C(42)	-C(43)	-C(44)	122.1(6)
Si(4)	-C(30)	-C(31)	121.3(5)	C(43)	-C(44)	-C(45)	119.6(7)
Si(4)	-C(30)	-C(35)	121.3(4)	C(44)	-C(45)	-C(46)	119.6(7)
C(31)	-C(30)	-C(35)	117.4(5)	C(45)	-C(46)	-C(47)	121.1(8)

Table 3 continued.

C(30)	-C(31)	-C(32)	121.0(6)	C(42)	-C(47)	-C(46)	120.5(8)
C(31)	-C(32)	-C(33)	120.3(6)	C(3)	-Si(2c)	-C(9c)	110.0(12)
C(32)	-C(33)	-C(34)	119.0(6)	C(3)	-Si(2c)	-C(10c)	100.0(13)
C(33)	-C(34)	-C(35)	120.5(7)	C(3)	-Si(2c)	-C(11c)	115.0(12)
C(30)	-C(35)	-C(34)	121.8(6)	C(9c)	-Si(2c)	-C(10c)	112.1(18)
Si(4)	-C(36)	-C(37)	121.1(5)	C(9c)	-Si(2c)	-C(11c)	111.9(19)
Si(4)	-C(36)	-C(41)	121.2(5)	C(10c)	-Si(2c)	-C(11c)	107.3(16)

Table 4. Torsion angles (deg.) of Cp''[Ph₃SiO]₂ZrCl (9).

Cl	-Zr	-O(2)	-Si(4)	-27.5(7)	O(1)	-Zr	-O(2)	-Si(4)	79.4(7)
C(1)	-Zr	-O(2)	-Si(4)	-142.7(6)	C(2)	-Zr	-O(2)	-Si(4)	179.4(6)
C(3)	-Zr	-O(2)	-Si(4)	-169.2(7)	C(4)	-Zr	-O(2)	-Si(4)	-136.8(7)
C(5)	-Zr	-O(2)	-Si(4)	-118.1(7)	Cl	-Zr	-C(1)	-Si(1)	50.2(4)
Cl	-Zr	-C(1)	-C(2)	172.6(4)	Cl	-Zr	-C(1)	-C(5)	-74.5(4)
O(1)	-Zr	-C(1)	-Si(1)	-54.5(4)	O(1)	-Zr	-C(1)	-C(2)	67.9(4)
O(1)	-Zr	-C(1)	-C(5)	-179.2(4)	O(2)	-Zr	-C(1)	-Si(1)	168.1(3)
O(2)	-Zr	-C(1)	-C(2)	-69.5(5)	O(2)	-Zr	-C(1)	-C(5)	43.4(6)
C(2)	-Zr	-C(1)	-Si(1)	-122.4(6)	C(2)	-Zr	-C(1)	-C(5)	112.9(6)
C(3)	-Zr	-C(1)	-Si(1)	-159.0(5)	C(3)	-Zr	-C(1)	-C(2)	-36.6(4)
C(3)	-Zr	-C(1)	-C(5)	76.3(5)	C(4)	-Zr	-C(1)	-Si(1)	160.8(5)
C(4)	-Zr	-C(1)	-C(2)	-76.9(4)	C(4)	-Zr	-C(1)	-C(5)	36.1(4)
C(5)	-Zr	-C(1)	-Si(1)	124.7(6)	C(5)	-Zr	-C(1)	-C(2)	-112.9(6)
Cl	-Zr	-C(2)	-C(1)	-9.1(5)	Cl	-Zr	-C(2)	-C(3)	-126.1(4)
O(1)	-Zr	-C(2)	-C(1)	-116.2(4)	O(1)	-Zr	-C(2)	-C(3)	126.7(4)
O(2)	-Zr	-C(2)	-C(1)	138.1(4)	O(2)	-Zr	-C(2)	-C(3)	21.0(5)
C(1)	-Zr	-C(2)	-C(3)	-117.0(6)	C(3)	-Zr	-C(2)	-C(1)	117.0(6)
C(4)	-Zr	-C(2)	-C(1)	78.7(4)	C(4)	-Zr	-C(2)	-C(3)	-38.3(4)
C(5)	-Zr	-C(2)	-C(1)	38.4(4)	C(5)	-Zr	-C(2)	-C(3)	-78.6(5)
Cl	-Zr	-C(3)	-Si(2d)	-143.1(6)	Cl	-Zr	-C(3)	-C(2)	82.7(5)
Cl	-Zr	-C(3)	-C(4)	-29.3(7)	O(1)	-Zr	-C(3)	-Si(2d)	75.7(7)
O(1)	-Zr	-C(3)	-C(2)	-58.5(5)	O(1)	-Zr	-C(3)	-C(4)	-170.5(5)
O(2)	-Zr	-C(3)	-Si(2d)	-28.7(7)	O(2)	-Zr	-C(3)	-C(2)	-162.9(4)
O(2)	-Zr	-C(3)	-C(4)	85.1(5)	C(1)	-Zr	-C(3)	-Si(2d)	169.7(8)
C(1)	-Zr	-C(3)	-C(2)	35.5(4)	C(1)	-Zr	-C(3)	-C(4)	-76.5(5)
C(2)	-Zr	-C(3)	-Si(2d)	134.2(9)	C(2)	-Zr	-C(3)	-C(4)	-112.0(7)
C(4)	-Zr	-C(3)	-Si(2d)	-113.8(9)	C(4)	-Zr	-C(3)	-C(2)	112.0(7)
C(5)	-Zr	-C(3)	-Si(2d)	-149.8(8)	C(5)	-Zr	-C(3)	-C(2)	76.0(5)
C(5)	-Zr	-C(3)	-C(4)	-36.1(5)	Cl	-Zr	-C(4)	-C(3)	160.0(5)
Cl	-Zr	-C(4)	-C(5)	43.7(5)	O(1)	-Zr	-C(4)	-C(3)	14.6(7)
O(1)	-Zr	-C(4)	-C(5)	-101.7(5)	O(2)	-Zr	-C(4)	-C(3)	-96.3(5)

Table 4 continued.

O(2) -Zr -C(4) -C(5)	147.4(5)	C(1) -Zr -C(4) -C(3)	79.5(5)
C(1) -Zr -C(4) -C(5)	-36.8(4)	C(2) -Zr -C(4) -C(3)	39.2(5)
C(2) -Zr -C(4) -C(5)	-77.1(5)	C(3) -Zr -C(4) -C(5)	-116.3(7)
C(5) -Zr -C(4) -C(3)	116.3(7)	Cl -Zr -C(5) -C(1)	105.0(4)
Cl -Zr -C(5) -C(4)	-138.9(5)	O(1) -Zr -C(5) -C(1)	1.1(6)
O(1) -Zr -C(5) -C(4)	117.3(5)	O(2) -Zr -C(5) -C(1)	-153.3(4)
O(2) -Zr -C(5) -C(4)	-37.2(5)	C(1) -Zr -C(5) -C(4)	116.1(7)
C(2) -Zr -C(5) -C(1)	-37.9(4)	C(2) -Zr -C(5) -C(4)	78.2(5)
C(3) -Zr -C(5) -C(1)	-79.5(5)	C(3) -Zr -C(5) -C(4)	36.6(5)
C(4) -Zr -C(5) -C(1)	-116.1(7)	C(6b) -Si(1) -C(1) -Zr	-121.4(18)
C(6b) -Si(1) -C(1) -C(2)	145.1(18)	C(6b) -Si(1) -C(1) -C(5)	-24.7(19)
C(7b) -Si(1) -C(1) -Zr	136.(3)	C(7b) -Si(1) -C(1) -C(2)	42.(3)
C(7b) -Si(1) -C(1) -C(5)	-128.(3)	C(8b) -Si(1) -C(1) -Zr	-0.9(13)
C(8b) -Si(1) -C(1) -C(2)	-94.5(14)	C(8b) -Si(1) -C(1) -C(5)	95.8(14)
C(9d) -Si(2d) -C(3) -Zr	-163.7(10)	C(9d) -Si(2d) -C(3) -C(2)	-59.3(15)
C(9d) -Si(2d) -C(3) -C(4)	104.5(12)	C(10d) -Si(2d) -C(3) -Zr	76.4(12)
C(10d) -Si(2d) -C(3) -C(2)	-179.2(11)	C(10d) -Si(2d) -C(3) -C(4)	-15.4(13)
C(11d) -Si(2d) -C(3) -Zr	-48.4(11)	C(11d) -Si(2d) -C(3) -C(2)	56.0(14)
C(11d) -Si(2d) -C(3) -C(4)	-140.2(11)	O(1) -Si(3) -C(12) -C(13)	-71.2(6)
O(1) -Si(3) -C(12) -C(17)	108.5(7)	C(18) -Si(3) -C(12) -C(13)	169.5(5)
C(18) -Si(3) -C(12) -C(17)	-10.9(7)	C(24) -Si(3) -C(12) -C(13)	48.8(6)
C(24) -Si(3) -C(12) -C(17)	-131.5(6)	O(1) -Si(3) -C(18) -C(19)	-41.8(8)
O(1) -Si(3) -C(18) -C(23)	134.5(7)	C(12) -Si(3) -C(18) -C(19)	77.7(8)
C(12) -Si(3) -C(18) -C(23)	-106.0(8)	C(24) -Si(3) -C(18) -C(19)	-162.2(7)
C(24) -Si(3) -C(18) -C(23)	14.1(8)	O(1) -Si(3) -C(24) -C(25)	149.5(6)
O(1) -Si(3) -C(24) -C(29)	-32.1(8)	C(12) -Si(3) -C(24) -C(25)	31.0(7)
C(12) -Si(3) -C(24) -C(29)	-150.6(7)	C(18) -Si(3) -C(24) -C(25)	-91.6(7)
C(18) -Si(3) -C(24) -C(29)	86.8(7)	C(30) -Si(4) -O(2) -Zr	-6.9(8)
C(36) -Si(4) -O(2) -Zr	-127.0(7)	C(42) -Si(4) -O(2) -Zr	113.1(7)
O(2) -Si(4) -C(30) -C(31)	-34.8(5)	O(2) -Si(4) -C(30) -C(35)	146.5(5)
C(36) -Si(4) -C(30) -C(31)	86.6(5)	C(36) -Si(4) -C(30) -C(35)	-92.1(5)

Table 4 continued.

C(42) -Si(4) -C(30) -C(31)	-154.1(5)	C(42) -Si(4) -C(30) -C(35)	27.2(6)
O(2) -Si(4) -C(36) -C(37)	122.1(6)	O(2) -Si(4) -C(36) -C(41)	-60.2(6)
C(30) -Si(4) -C(36) -C(37)	2.1(7)	C(30) -Si(4) -C(36) -C(41)	179.8(7)
C(42) -Si(4) -C(36) -C(37)	-117.9(6)	C(42) -Si(4) -C(36) -C(41)	59.8(7)
O(2) -Si(4) -C(42) -C(43)	142.7(5)	O(2) -Si(4) -C(42) -C(47)	-42.3(7)
C(30) -Si(4) -C(42) -C(43)	-98.0(6)	C(30) -Si(4) -C(42) -C(47)	77.0(7)
C(36) -Si(4) -C(42) -C(43)	21.3(7)	C(36) -Si(4) -C(42) -C(47)	-163.8(6)
Zr -C(1) -C(2) -C(3)	65.2(6)	Si(1) -C(1) -C(2) -Zr	121.7(5)
Si(1) -C(1) -C(2) -C(3)	-173.1(5)	C(5) -C(1) -C(2) -Zr	-66.7(5)
C(5) -C(1) -C(2) -C(3)	-1.5(8)	Zr -C(1) -C(5) -C(4)	-65.0(6)
Si(1) -C(1) -C(5) -Zr	-123.0(5)	Si(1) -C(1) -C(5) -C(4)	172.0(6)
C(2) -C(1) -C(5) -Zr	65.6(5)	C(2) -C(1) -C(5) -C(4)	0.5(8)
Zr -C(2) -C(3) -Si(2d)	-126.(1)	Zr -C(2) -C(3) -C(4)	68.9(6)
C(1) -C(2) -C(3) -Zr	-66.9(5)	C(1) -C(2) -C(3) -Si(2d)	167.1(9)
C(1) -C(2) -C(3) -C(4)	1.9(9)	Zr -C(3) -C(4) -C(5)	66.4(6)
Si(2d) -C(3) -C(4) -Zr	123.9(7)	Si(2d) -C(3) -C(4) -C(5)	-169.7(7)
C(2) -C(3) -C(4) -Zr	-68.0(6)	C(2) -C(3) -C(4) -C(5)	-1.6(9)
Zr -C(4) -C(5) -C(1)	65.4(5)	C(3) -C(4) -C(5) -Zr	-64.7(6)
C(3) -C(4) -C(5) -C(1)	0.7(10)	Si(3) -C(12) -C(13) -C(14)	178.2(6)
C(17) -C(12) -C(13) -C(14)	-1.4(11)	Si(3) -C(12) -C(17) -C(16)	-175.8(7)
C(13) -C(12) -C(17) -C(16)	3.9(12)	C(12) -C(13) -C(14) -C(15)	-0.5(13)
C(13) -C(14) -C(15) -C(16)	0.0(17)	C(14) -C(15) -C(16) -C(17)	2.6(19)
C(15) -C(16) -C(17) -C(12)	-4.5(16)	Si(3) -C(18) -C(19) -C(20)	178.9(7)
C(23) -C(18) -C(19) -C(20)	2.6(13)	Si(3) -C(18) -C(23) -C(22)	-177.4(7)
C(19) -C(18) -C(23) -C(22)	-1.0(13)	C(18) -C(19) -C(20) -C(21)	-1.8(14)
C(19) -C(20) -C(21) -C(22)	-0.5(15)	C(20) -C(21) -C(22) -C(23)	2.1(16)
C(21) -C(22) -C(23) -C(18)	-1.3(15)	Si(3) -C(24) -C(25) -C(26)	178.2(6)
C(29) -C(24) -C(25) -C(26)	-0.3(11)	Si(3) -C(24) -C(29) -C(28)	-179.0(8)
C(25) -C(24) -C(29) -C(28)	-0.5(13)	C(24) -C(25) -C(26) -C(27)	0.6(13)
C(25) -C(26) -C(27) -C(28)	0.1(14)	C(26) -C(27) -C(28) -C(29)	-0.9(16)
C(27) -C(28) -C(29) -C(24)	1.1(17)	Si(4) -C(30) -C(31) -C(32)	-177.8(5)

Table 4 continued.

C(35) -C(30) -C(31) -C(32)	0.9(9)	Si(4) -C(30) -C(35) -C(34)	179.2(5)
C(31) -C(30) -C(35) -C(34)	0.5(9)	C(30) -C(31) -C(32) -C(33)	-1.3(9)
C(31) -C(32) -C(33) -C(34)	0.3(10)	C(32) -C(33) -C(34) -C(35)	1.1(10)
C(33) -C(34) -C(35) -C(30)	-1.6(10)	Si(4) -C(36) -C(37) -C(38)	176.7(6)
C(41) -C(36) -C(37) -C(38)	-1.0(11)	Si(4) -C(36) -C(41) -C(40)	-177.4(6)
C(37) -C(36) -C(41) -C(40)	0.3(11)	C(36) -C(37) -C(38) -C(39)	1.6(12)
C(37) -C(38) -C(39) -C(40)	-1.5(12)	C(38) -C(39) -C(40) -C(41)	0.9(13)
C(39) -C(40) -C(41) -C(36)	-0.3(12)	Si(4) -C(42) -C(43) -C(44)	175.6(6)
C(47) -C(42) -C(43) -C(44)	0.4(11)	Si(4) -C(42) -C(47) -C(46)	-175.3(7)
C(43) -C(42) -C(47) -C(46)	-0.1(11)	C(42) -C(43) -C(44) -C(45)	-0.1(11)
C(43) -C(44) -C(45) -C(46)	-0.5(12)	C(44) -C(45) -C(46) -C(47)	0.8(14)
C(45) -C(46) -C(47) -C(42)	-0.5(14)		

The sign of the torsion angle is positive if when looking from atom-2
to atom-3 a clockwise motion of atom-1 would superimpose it on atom-4.

Table 5. Final fractional atomic coordinates and equivalent isotropic thermal displacement parameters for non-H atoms of Cp''[Ph₃SiO]Ti(CH₂Ph)₂ (11a) with e.s.d.'s in parentheses.

<i>Atom</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{eq} (Å ²)*
Ti	-0.00487(3)	0.25939(3)	0.33158(2)	0.0178(1)
Si(1)	-0.31062(5)	0.33477(5)	0.54480(4)	0.0276(2)
Si(2)	-0.14071(5)	0.09273(5)	0.20160(4)	0.0285(2)
Si(3)	0.26050(5)	0.22072(4)	0.13556(4)	0.0220(2)
O(1)	0.13202(12)	0.23314(11)	0.22874(10)	0.0242(4)
C(1)	-0.21209(17)	0.19652(16)	0.38365(15)	0.0226(6)
C(2)	-0.22868(17)	0.29861(15)	0.41777(15)	0.0228(6)
C(3)	-0.18492(18)	0.37028(16)	0.33239(15)	0.0235(6)
C(4)	-0.14488(19)	0.31233(16)	0.25032(15)	0.0249(6)
C(5)	-0.16063(18)	0.20281(15)	0.28051(14)	0.0225(6)
C(6)	-0.2425(3)	0.2648(2)	0.63337(18)	0.0403(8)
C(7)	-0.3101(3)	0.4804(2)	0.5492(2)	0.0462(9)
C(8)	-0.4735(3)	0.2951(3)	0.5775(2)	0.0521(10)
C(9)	-0.2983(3)	0.0479(3)	0.2212(3)	0.0556(11)
C(10)	-0.0700(3)	0.1471(2)	0.07301(18)	0.0377(8)
C(11)	-0.0451(3)	-0.0199(2)	0.2355(2)	0.0442(9)
C(12)	0.23349(19)	0.28709(18)	0.02398(15)	0.0280(6)
C(13)	0.1690(2)	0.38579(19)	0.02711(19)	0.0374(8)
C(14)	0.1522(3)	0.4392(3)	-0.0551(2)	0.0544(10)
C(15)	0.1958(3)	0.3941(3)	-0.1414(2)	0.0608(11)
C(16)	0.2588(3)	0.2982(3)	-0.1468(2)	0.0618(11)
C(17)	0.2791(3)	0.2445(2)	-0.06505(17)	0.0430(8)
C(18)	0.30989(18)	0.07795(17)	0.12030(14)	0.0257(6)
C(19)	0.2612(2)	0.01396(19)	0.07215(17)	0.0344(7)
C(20)	0.3013(2)	-0.0921(2)	0.06256(19)	0.0413(8)
C(21)	0.3877(2)	-0.1368(2)	0.10310(19)	0.0409(8)
C(22)	0.4354(2)	-0.07646(19)	0.15225(19)	0.0397(8)
C(23)	0.3992(2)	0.03022(18)	0.15902(16)	0.0295(6)
C(24)	0.38563(17)	0.28810(15)	0.15810(14)	0.0231(6)

Table 5 continued.

C(25)	0.4681(2)	0.35233(18)	0.08500(17)	0.0314(7)
C(26)	0.5601(2)	0.4019(2)	0.10270(19)	0.0395(8)
C(27)	0.5735(2)	0.3873(2)	0.19297(19)	0.0376(8)
C(28)	0.4940(2)	0.32361(18)	0.26642(18)	0.0331(7)
C(29)	0.4001(2)	0.27567(16)	0.24962(15)	0.0272(6)
C(30)	0.01015(19)	0.13438(17)	0.43806(16)	0.0251(6)
C(31)	0.13458(18)	0.12182(15)	0.44908(14)	0.0239(6)
C(32)	0.2258(2)	0.04844(16)	0.40057(16)	0.0285(6)
C(33)	0.3408(2)	0.03627(19)	0.41291(18)	0.0364(7)
C(34)	0.3688(2)	0.0977(2)	0.47300(19)	0.0395(8)
C(35)	0.2803(2)	0.1717(2)	0.52202(18)	0.0384(8)
C(36)	0.1647(2)	0.18297(18)	0.50976(16)	0.0300(7)
C(37)	0.0469(2)	0.39389(16)	0.38234(16)	0.0256(6)
C(38)	0.06534(19)	0.49512(15)	0.31895(15)	0.0249(6)
C(39)	-0.0244(2)	0.57940(16)	0.33549(16)	0.0271(6)
C(40)	-0.0100(2)	0.67079(17)	0.27273(18)	0.0350(7)
C(41)	0.0950(3)	0.68130(19)	0.19194(18)	0.0432(9)
C(42)	0.1867(3)	0.6014(2)	0.17578(19)	0.0470(9)
C(43)	0.1726(2)	0.50938(18)	0.23849(18)	0.0368(7)

) $U_{eq} = 1/3 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^ a_j^* a_i \cdot a_j$

Table 6. Interatomic Distances (Å) of Cp''[Ph₃SiO]Ti(CH₂Ph)₂ (11a).

Ti	-O(1)	1.8055(15)	C(15)	-C(16)	1.357(5)
Ti	-C(1)	2.412(2)	C(16)	-C(17)	1.394(4)
Ti	-C(2)	2.476(2)	C(18)	-C(19)	1.398(3)
Ti	-C(3)	2.392(2)	C(18)	-C(23)	1.397(3)
Ti	-C(4)	2.322(2)	C(19)	-C(20)	1.392(4)
Ti	-C(5)	2.352(2)	C(20)	-C(21)	1.374(4)
Ti	-C(30)	2.140(2)	C(21)	-C(22)	1.370(4)
Ti	-C(37)	2.145(2)	C(22)	-C(23)	1.387(3)
Si(1)	-C(2)	1.871(2)	C(24)	-C(25)	1.399(3)
Si(1)	-C(6)	1.846(3)	C(24)	-C(29)	1.401(3)
Si(1)	-C(7)	1.860(3)	C(25)	-C(26)	1.385(3)
Si(1)	-C(8)	1.862(4)	C(26)	-C(27)	1.378(4)
Si(2)	-C(5)	1.867(2)	C(27)	-C(28)	1.382(4)
Si(2)	-C(9)	1.859(4)	C(28)	-C(29)	1.386(3)
Si(2)	-C(10)	1.861(3)	C(30)	-C(31)	1.482(3)
Si(2)	-C(11)	1.853(3)	C(31)	-C(32)	1.393(3)
Si(3)	-O(1)	1.6430(15)	C(31)	-C(36)	1.390(3)
Si(3)	-C(12)	1.867(2)	C(32)	-C(33)	1.384(3)
Si(3)	-C(18)	1.868(2)	C(33)	-C(34)	1.374(4)
Si(3)	-C(24)	1.872(2)	C(34)	-C(35)	1.385(4)
C(1)	-C(2)	1.418(3)	C(35)	-C(36)	1.390(3)
C(1)	-C(5)	1.422(3)	C(37)	-C(38)	1.487(3)
C(2)	-C(3)	1.431(3)	C(38)	-C(39)	1.400(3)
C(3)	-C(4)	1.404(3)	C(38)	-C(43)	1.393(3)
C(4)	-C(5)	1.420(3)	C(39)	-C(40)	1.384(3)
C(12)	-C(13)	1.396(3)	C(40)	-C(41)	1.376(4)
C(12)	-C(17)	1.387(3)	C(41)	-C(42)	1.374(4)
C(13)	-C(14)	1.382(4)	C(42)	-C(43)	1.390(3)
C(14)	-C(15)	1.367(4)			

Table 7. Bond angles (deg.) of Cp''[Ph₃SiO]Ti(CH₂Ph)₂ (11a).

O(1)	-Ti	-C(1)	131.97(7)	C(2)	-C(1)	-C(5)	110.97(18)
O(1)	-Ti	-C(2)	156.23(7)	Ti	-C(2)	-Si(1)	130.16(10)
O(1)	-Ti	-C(3)	127.69(7)	Ti	-C(2)	-C(1)	70.66(12)
O(1)	-Ti	-C(4)	99.30(7)	Ti	-C(2)	-C(3)	69.71(12)
O(1)	-Ti	-C(5)	100.88(7)	Si(1)	-C(2)	-C(1)	127.51(15)
O(1)	-Ti	-C(30)	102.37(8)	Si(1)	-C(2)	-C(3)	126.73(15)
O(1)	-Ti	-C(37)	101.58(8)	C(1)	-C(2)	-C(3)	105.25(18)
C(1)	-Ti	-C(2)	33.69(7)	Ti	-C(3)	-C(2)	76.15(12)
C(1)	-Ti	-C(3)	56.23(7)	Ti	-C(3)	-C(4)	69.98(12)
C(1)	-Ti	-C(4)	57.04(7)	C(2)	-C(3)	-C(4)	109.01(18)
C(1)	-Ti	-C(5)	34.72(7)	Ti	-C(4)	-C(3)	75.40(13)
C(1)	-Ti	-C(30)	80.26(8)	Ti	-C(4)	-C(5)	73.44(12)
C(1)	-Ti	-C(37)	125.05(8)	C(3)	-C(4)	-C(5)	109.31(18)
C(2)	-Ti	-C(3)	34.14(7)	Ti	-C(5)	-Si(2)	125.29(11)
C(2)	-Ti	-C(4)	57.41(7)	Ti	-C(5)	-C(1)	74.95(12)
C(2)	-Ti	-C(5)	57.92(7)	Ti	-C(5)	-C(4)	71.19(12)
C(2)	-Ti	-C(30)	93.49(8)	Si(2)	-C(5)	-C(1)	126.75(15)
C(2)	-Ti	-C(37)	92.08(8)	Si(2)	-C(5)	-C(4)	127.23(15)
C(3)	-Ti	-C(4)	34.62(7)	C(1)	-C(5)	-C(4)	105.45(17)
C(3)	-Ti	-C(5)	58.10(7)	Si(3)	-C(12)	-C(13)	120.01(17)
C(3)	-Ti	-C(30)	127.60(8)	Si(3)	-C(12)	-C(17)	122.82(19)
C(3)	-Ti	-C(37)	83.79(8)	C(13)	-C(12)	-C(17)	117.1(2)
C(4)	-Ti	-C(5)	35.36(7)	C(12)	-C(13)	-C(14)	121.5(3)
C(4)	-Ti	-C(30)	136.03(8)	C(13)	-C(14)	-C(15)	120.0(3)
C(4)	-Ti	-C(37)	110.26(8)	C(14)	-C(15)	-C(16)	119.9(3)
C(5)	-Ti	-C(30)	102.56(8)	C(15)	-C(16)	-C(17)	120.8(3)
C(5)	-Ti	-C(37)	141.86(8)	C(12)	-C(17)	-C(16)	120.7(3)
C(30)	-Ti	-C(37)	102.23(8)	Si(3)	-C(18)	-C(19)	123.44(17)
C(2)	-Si(1)	-C(6)	113.10(11)	Si(3)	-C(18)	-C(23)	119.63(16)
C(2)	-Si(1)	-C(7)	110.02(11)	C(19)	-C(18)	-C(23)	116.9(2)
C(2)	-Si(1)	-C(8)	105.97(12)	C(18)	-C(19)	-C(20)	121.2(2)

Table 7 continued.

C(6)	-Si(1)	-C(7)	109.48(13)	C(19)	-C(20)	-C(21)	120.2(2)
C(6)	-Si(1)	-C(8)	108.62(14)	C(20)	-C(21)	-C(22)	119.8(2)
C(7)	-Si(1)	-C(8)	109.56(16)	C(21)	-C(22)	-C(23)	120.2(2)
C(5)	-Si(2)	-C(9)	107.23(14)	C(18)	-C(23)	-C(22)	121.5(2)
C(5)	-Si(2)	-C(10)	107.86(10)	Si(3)	-C(24)	-C(25)	121.77(16)
C(5)	-Si(2)	-C(11)	110.73(11)	Si(3)	-C(24)	-C(29)	120.82(15)
C(9)	-Si(2)	-C(10)	109.60(17)	C(25)	-C(24)	-C(29)	117.4(2)
C(9)	-Si(2)	-C(11)	109.08(16)	C(24)	-C(25)	-C(26)	121.2(2)
C(10)	-Si(2)	-C(11)	112.20(13)	C(25)	-C(26)	-C(27)	120.3(2)
O(1)	-Si(3)	-C(12)	108.82(9)	C(26)	-C(27)	-C(28)	119.8(2)
O(1)	-Si(3)	-C(18)	110.86(8)	C(27)	-C(28)	-C(29)	120.1(2)
O(1)	-Si(3)	-C(24)	108.38(8)	C(24)	-C(29)	-C(28)	121.2(2)
C(12)	-Si(3)	-C(18)	110.56(10)	Ti	-C(30)	-C(31)	113.54(14)
C(12)	-Si(3)	-C(24)	109.19(10)	C(30)	-C(31)	-C(32)	122.15(19)
C(18)	-Si(3)	-C(24)	108.99(9)	C(30)	-C(31)	-C(36)	120.85(19)
Ti	-O(1)	-Si(3)	174.51(10)	C(32)	-C(31)	-C(36)	117.0(2)
Ti	-C(1)	-C(2)	75.65(12)	C(31)	-C(32)	-C(33)	121.5(2)
Ti	-C(1)	-C(5)	70.34(12)	C(32)	-C(33)	-C(34)	120.6(2)
C(33)	-C(34)	-C(35)	119.4(2)	C(39)	-C(38)	-C(43)	116.81(19)
C(34)	-C(35)	-C(36)	119.7(2)	C(38)	-C(39)	-C(40)	121.7(2)
C(31)	-C(36)	-C(35)	121.8(2)	C(39)	-C(40)	-C(41)	120.2(2)
Ti	-C(37)	-C(38)	118.49(15)	C(40)	-C(41)	-C(42)	119.3(2)
C(37)	-C(38)	-C(39)	122.1(2)	C(41)	-C(42)	-C(43)	120.7(3)
C(37)	-C(38)	-C(43)	121.09(19)	C(38)	-C(43)	-C(42)	121.2(2)

Table 8. Torsion angles (deg.) of Cp''[Ph₃SiO]Ti(CH₂Ph)₂ (11a).

C(37) -C(38) -C(39) -C(40)	-1.5(12)	C(38) -C(39) -C(40) -C(41)	0.9(13)
O(1) -Ti -C(1) -C(2)	-150.44(12)	O(1) -Ti -C(1) -C(5)	-31.51(15)
C(2) -Ti -C(1) -C(5)	118.93(17)	C(3) -Ti -C(1) -C(2)	-37.62(12)
C(3) -Ti -C(1) -C(5)	81.31(13)	C(4) -Ti -C(1) -C(2)	-79.35(13)
C(4) -Ti -C(1) -C(5)	39.58(11)	C(5) -Ti -C(1) -C(2)	-118.93(17)
C(30) -Ti -C(1) -C(2)	111.64(13)	C(30) -Ti -C(1) -C(5)	-129.43(13)
C(37) -Ti -C(1) -C(2)	13.47(16)	C(37) -Ti -C(1) -C(5)	132.40(12)
O(1) -Ti -C(2) -Si(1)	-171.25(12)	O(1) -Ti -C(2) -C(1)	65.5(2)
O(1) -Ti -C(2) -C(3)	-49.8(2)	C(1) -Ti -C(2) -Si(1)	123.24(19)
C(1) -Ti -C(2) -C(3)	-115.27(17)	C(3) -Ti -C(2) -Si(1)	-121.49(18)
C(3) -Ti -C(2) -C(1)	115.27(17)	C(4) -Ti -C(2) -Si(1)	-158.59(16)
C(4) -Ti -C(2) -C(1)	78.17(13)	C(4) -Ti -C(2) -C(3)	-37.10(12)
C(5) -Ti -C(2) -Si(1)	159.28(15)	C(5) -Ti -C(2) -C(1)	36.03(12)
C(5) -Ti -C(2) -C(3)	-79.23(13)	C(30) -Ti -C(2) -Si(1)	56.63(13)
C(30) -Ti -C(2) -C(1)	-66.61(13)	C(30) -Ti -C(2) -C(3)	178.12(13)
C(37) -Ti -C(2) -Si(1)	-45.76(13)	C(37) -Ti -C(2) -C(1)	-169.00(13)
C(37) -Ti -C(2) -C(3)	75.73(13)	O(1) -Ti -C(3) -C(2)	157.12(11)
O(1) -Ti -C(3) -C(4)	40.57(15)	C(1) -Ti -C(3) -C(2)	37.12(11)
C(1) -Ti -C(3) -C(4)	-79.43(13)	C(2) -Ti -C(3) -C(4)	-116.55(18)
C(4) -Ti -C(3) -C(2)	116.55(18)	C(5) -Ti -C(3) -C(2)	78.66(12)
C(5) -Ti -C(3) -C(4)	-37.89(12)	C(30) -Ti -C(3) -C(2)	-2.37(16)
C(30) -Ti -C(3) -C(4)	-118.91(14)	C(37) -Ti -C(3) -C(2)	-103.04(13)
C(37) -Ti -C(3) -C(4)	140.41(13)	O(1) -Ti -C(4) -C(3)	-148.57(12)
O(1) -Ti -C(4) -C(5)	95.72(12)	C(1) -Ti -C(4) -C(3)	76.89(13)
C(1) -Ti -C(4) -C(5)	-38.83(11)	C(2) -Ti -C(4) -C(3)	36.57(12)
C(2) -Ti -C(4) -C(5)	-79.15(12)	C(3) -Ti -C(4) -C(5)	-115.72(18)
C(5) -Ti -C(4) -C(3)	115.72(18)	C(30) -Ti -C(4) -C(3)	92.59(15)
C(30) -Ti -C(4) -C(5)	-23.12(17)	C(37) -Ti -C(4) -C(3)	-42.47(14)
C(37) -Ti -C(4) -C(5)	-158.19(12)	O(1) -Ti -C(5) -Si(2)	32.04(12)
O(1) -Ti -C(5) -C(1)	156.69(11)	O(1) -Ti -C(5) -C(4)	-90.78(12)
C(1) -Ti -C(5) -Si(2)	-124.65(18)	C(1) -Ti -C(5) -C(4)	112.52(17)

Table 8 continued.

C(2) -Ti -C(5) -Si(2) -159.61(14)	C(2) -Ti -C(5) -C(1) -34.96(11)
C(2) -Ti -C(5) -C(4) 77.57(12)	C(3) -Ti -C(5) -Si(2) 159.90(15)
C(3) -Ti -C(5) -C(1) -75.45(12)	C(3) -Ti -C(5) -C(4) 37.08(12)
C(4) -Ti -C(5) -Si(2) 122.82(18)	C(4) -Ti -C(5) -C(1) -112.52(17)
C(30) -Ti -C(5) -Si(2) -73.40(13)	C(30) -Ti -C(5) -C(1) 51.26(13)
C(30) -Ti -C(5) -C(4) 163.78(12)	C(37) -Ti -C(5) -Si(2) 157.17(11)
C(37) -Ti -C(5) -C(1) -78.17(16)	C(37) -Ti -C(5) -C(4) 34.35(18)
O(1) -Ti -C(30) -C(31) 48.69(16)	C(1) -Ti -C(30) -C(31) 179.77(19)
C(2) -Ti -C(30) -C(31) -149.13(15)	C(3) -Ti -C(30) -C(31) -147.80(13)
C(4) -Ti -C(30) -C(31) 166.44(13)	C(5) -Ti -C(30) -C(31) 152.98(14)
C(37) -Ti -C(30) -C(31) -56.24(16)	O(1) -Ti -C(37) -C(38) 65.86(18)
C(1) -Ti -C(37) -C(38) -102.00(18)	C(2) -Ti -C(37) -C(38) -94.57(17)
C(3) -Ti -C(37) -C(38) -61.41(17)	C(4) -Ti -C(37) -C(38) -38.71(19)
C(5) -Ti -C(37) -C(38) -59.1(2)	C(30) -Ti -C(37) -C(38) 171.40(17)
C(6) -Si(1) -C(2) -Ti -36.72(17)	C(6) -Si(1) -C(2) -C(1) 59.1(2)
C(6) -Si(1) -C(2) -C(3) -130.4(2)	C(7) -Si(1) -C(2) -Ti 86.04(16)
C(7) -Si(1) -C(2) -C(1) -178.1(2)	C(7) -Si(1) -C(2) -C(3) -7.6(2)
C(8) -Si(1) -C(2) -Ti -155.61(15)	C(8) -Si(1) -C(2) -C(1) -59.8(2)
C(8) -Si(1) -C(2) -C(3) 110.8(2)	C(9) -Si(2) -C(5) -Ti 159.10(15)
C(9) -Si(2) -C(5) -C(1) 61.6(2)	C(9) -Si(2) -C(5) -C(4) -108.5(2)
C(10) -Si(2) -C(5) -Ti -82.93(16)	C(10) -Si(2) -C(5) -C(1) 179.5(2)
C(10) -Si(2) -C(5) -C(4) 9.5(2)	C(11) -Si(2) -C(5) -Ti 40.19(16)
C(11) -Si(2) -C(5) -C(1) -57.4(2)	C(11) -Si(2) -C(5) -C(4) 132.6(2)
O(1) -Si(3) -C(12) -C(13) 43.1(2)	O(1) -Si(3) -C(12) -C(17) -139.4(2)
C(18) -Si(3) -C(12) -C(13) 165.05(19)	C(18) -Si(3) -C(12) -C(17) -17.5(3)
C(24) -Si(3) -C(12) -C(13) -75.0(2)	C(24) -Si(3) -C(12) -C(17) 102.4(2)
O(1) -Si(3) -C(18) -C(19) 82.69(19)	O(1) -Si(3) -C(18) -C(23) -96.71(18)
C(12) -Si(3) -C(18) -C(19) -38.1(2)	C(12) -Si(3) -C(18) -C(23) 142.52(17)
C(24) -Si(3) -C(18) -C(19) -158.09(18)	C(24) -Si(3) -C(18) -C(23) 22.5(2)
O(1) -Si(3) -C(24) -C(25) -136.95(17)	O(1) -Si(3) -C(24) -C(29) 43.13(19)
C(12) -Si(3) -C(24) -C(25) -18.6(2)	C(12) -Si(3) -C(24) -C(29) 161.53(17)

Table 8 continued.

C(18) -Si(3) -C(24) -C(25)	102.30(18)	C(18) -Si(3) -C(24) -C(29)	-77.61(18)
Ti -C(1) -C(2) -Si(1)	-126.31(17)	Ti -C(1) -C(2) -C(3)	61.54(14)
C(5) -C(1) -C(2) -Ti	-61.96(15)	C(5) -C(1) -C(2) -Si(1)	171.73(16)
C(5) -C(1) -C(2) -C(3)	-0.4(2)	Ti -C(1) -C(5) -Si(2)	123.07(18)
Ti -C(1) -C(5) -C(4)	-65.12(15)	C(2) -C(1) -C(5) -Ti	65.23(16)
C(2) -C(1) -C(5) -Si(2)	-171.69(16)	C(2) -C(1) -C(5) -C(4)	0.1(2)
Ti -C(2) -C(3) -C(4)	62.75(16)	Si(1) -C(2) -C(3) -Ti	125.59(17)
Si(1) -C(2) -C(3) -C(4)	-171.66(16)	C(1) -C(2) -C(3) -Ti	-62.18(14)
C(1) -C(2) -C(3) -C(4)	0.6(2)	Ti -C(3) -C(4) -C(5)	66.22(16)
C(2) -C(3) -C(4) -Ti	-66.73(16)	C(2) -C(3) -C(4) -C(5)	-0.5(3)
Ti -C(4) -C(5) -Si(2)	-120.51(18)	Ti -C(4) -C(5) -C(1)	67.74(15)
C(3) -C(4) -C(5) -Ti	-67.49(16)	C(3) -C(4) -C(5) -Si(2)	172.00(17)
C(3) -C(4) -C(5) -C(1)	0.2(2)	Si(3) -C(12) -C(13) -C(14)	177.1(2)
C(17) -C(12) -C(13) -C(14)	-0.5(4)	Si(3) -C(12) -C(17) -C(16)	-178.6(2)
C(13) -C(12) -C(17) -C(16)	-1.0(4)	C(12) -C(13) -C(14) -C(15)	2.0(5)
C(13) -C(14) -C(15) -C(16)	-1.9(5)	C(14) -C(15) -C(16) -C(17)	0.4(6)
C(15) -C(16) -C(17) -C(12)	1.1(5)	Si(3) -C(18) -C(19) -C(20)	179.9(2)
C(23) -C(18) -C(19) -C(20)	-0.7(3)	Si(3) -C(18) -C(23) -C(22)	177.76(18)
C(19) -C(18) -C(23) -C(22)	-1.7(3)	C(18) -C(19) -C(20) -C(21)	1.9(4)
C(19) -C(20) -C(21) -C(22)	-0.7(4)	C(20) -C(21) -C(22) -C(23)	-1.7(4)
C(21) -C(22) -C(23) -C(18)	2.9(4)	Si(3) -C(24) -C(25) -C(26)	179.87(18)
C(29) -C(24) -C(25) -C(26)	-0.2(3)	Si(3) -C(24) -C(29) -C(28)	178.74(17)
C(25) -C(24) -C(29) -C(28)	-1.2(3)	C(24) -C(25) -C(26) -C(27)	1.1(4)
C(25) -C(26) -C(27) -C(28)	-0.6(4)	C(26) -C(27) -C(28) -C(29)	-0.8(4)
C(27) -C(28) -C(29) -C(24)	1.7(3)	Ti -C(30) -C(31) -C(32)	-95.8(2)
Ti -C(30) -C(31) -C(36)	84.9(2)	C(30) -C(31) -C(32) -C(33)	-178.8(2)
C(36) -C(31) -C(32) -C(33)	0.6(3)	C(30) -C(31) -C(36) -C(35)	179.3(2)
C(32) -C(31) -C(36) -C(35)	-0.1(3)	C(31) -C(32) -C(33) -C(34)	-0.8(4)
C(32) -C(33) -C(34) -C(35)	0.5(4)	C(33) -C(34) -C(35) -C(36)	-0.1(4)
C(34) -C(35) -C(36) -C(31)	-0.1(4)	Ti -C(37) -C(38) -C(39)	102.1(2)
Ti -C(37) -C(38) -C(43)	-76.5(3)	C(37) -C(38) -C(39) -C(40)	-175.9(2)

Table 8 continued.

C(43) -C(38) -C(39) -C(40)	2.7(3)	C(37) -C(38) -C(43) -C(42)	176.0(2)
C(39) -C(38) -C(43) -C(42)	-2.6(4)	C(38) -C(39) -C(40) -C(41)	-0.6(4)
C(39) -C(40) -C(41) -C(42)	-1.8(4)	C(40) -C(41) -C(42) -C(43)	1.9(4)
C(41) -C(42) -C(43) -C(38)	0.4(4)		

The sign of the torsion angle is positive if when looking from atom-2
to atom-3 a clockwise motion of atom-1 would superimpose it on atom-4.