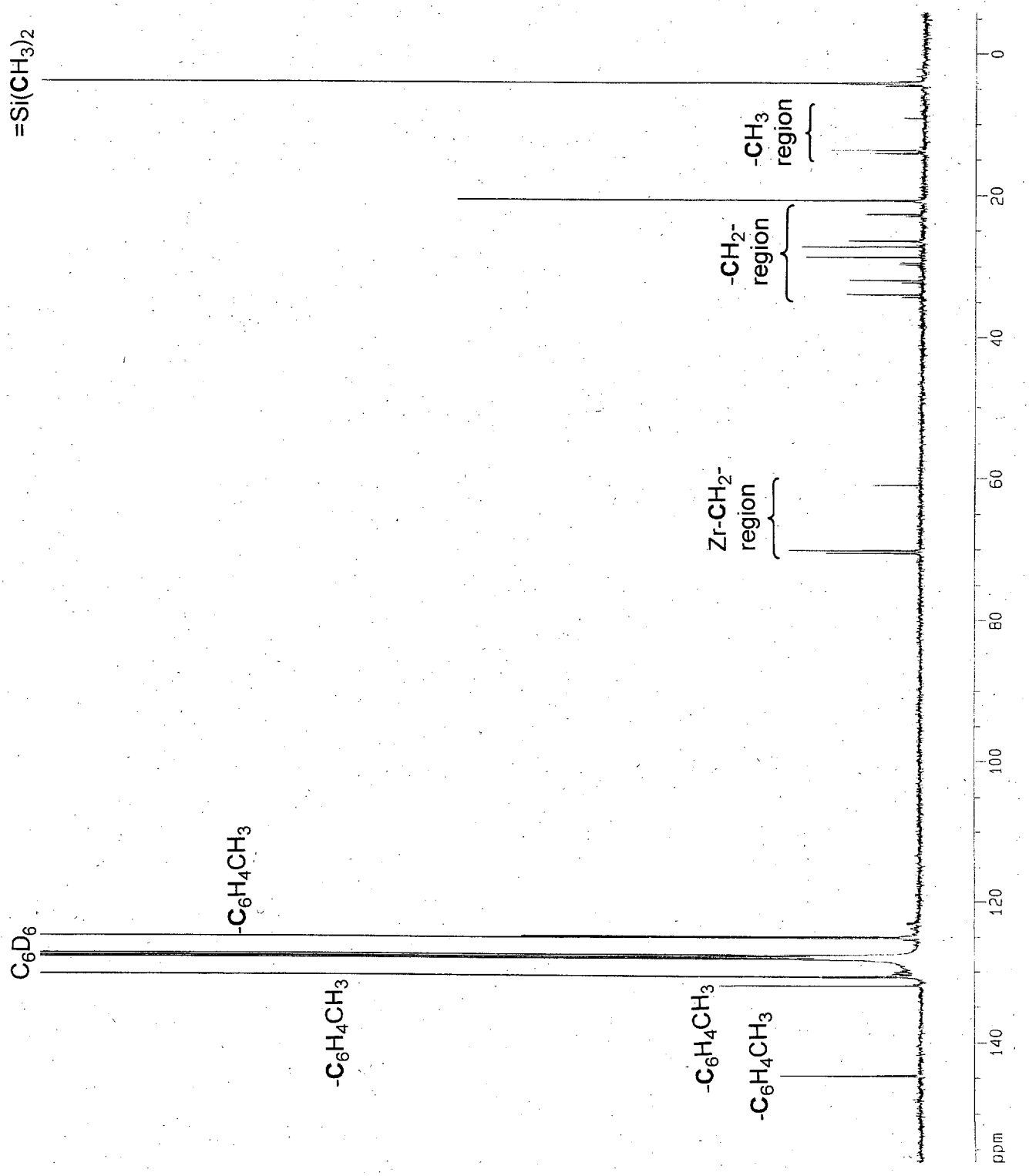
© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 1

Part 1. ^{13}C spectrum of insertion products and peak assignments.

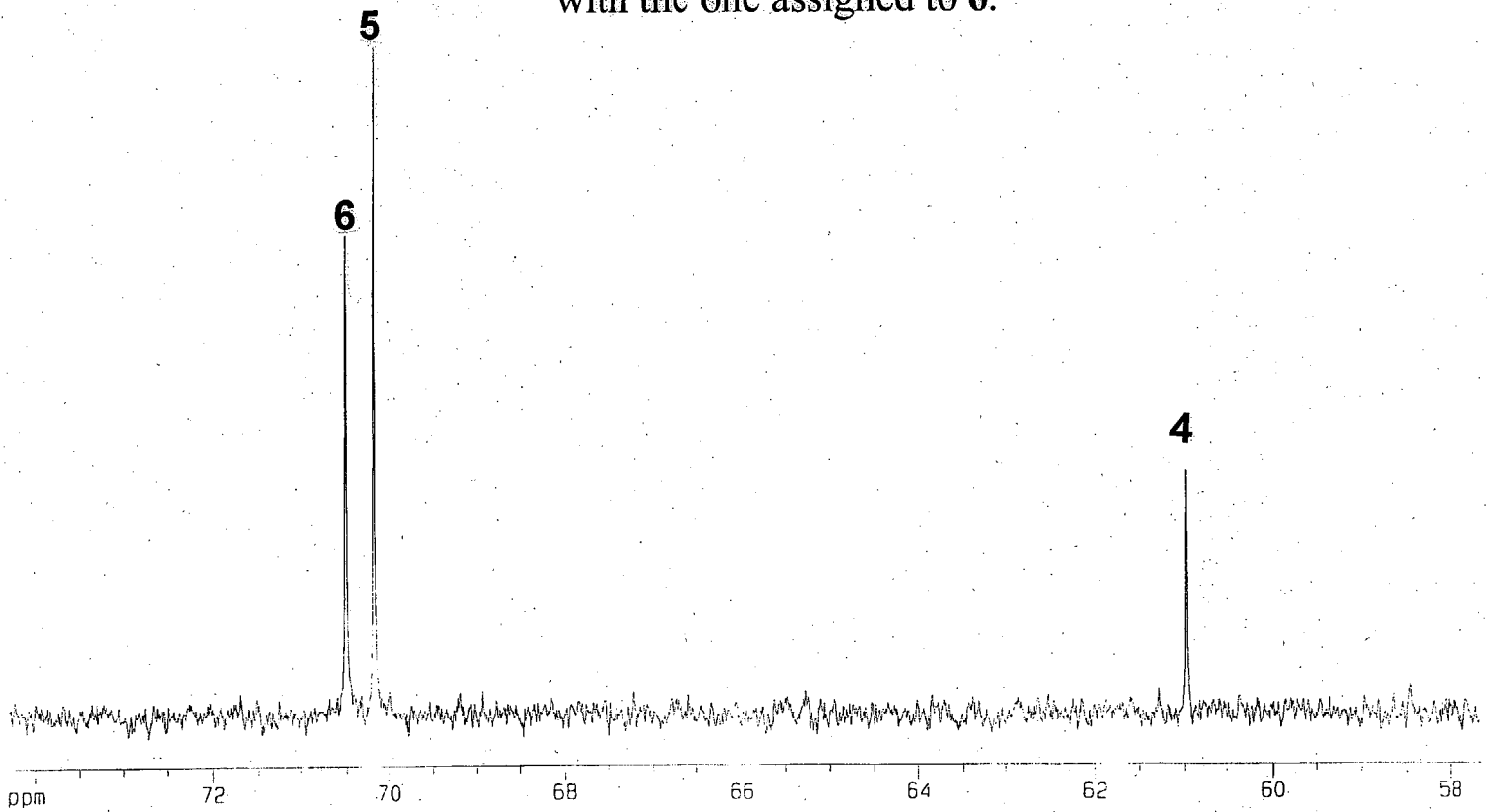
© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 2

^{13}C Spectrum of Ethylene Insertion Products



Zr-CH_2- Region of the ^{13}C Spectrum of Ethylene Insertion Products

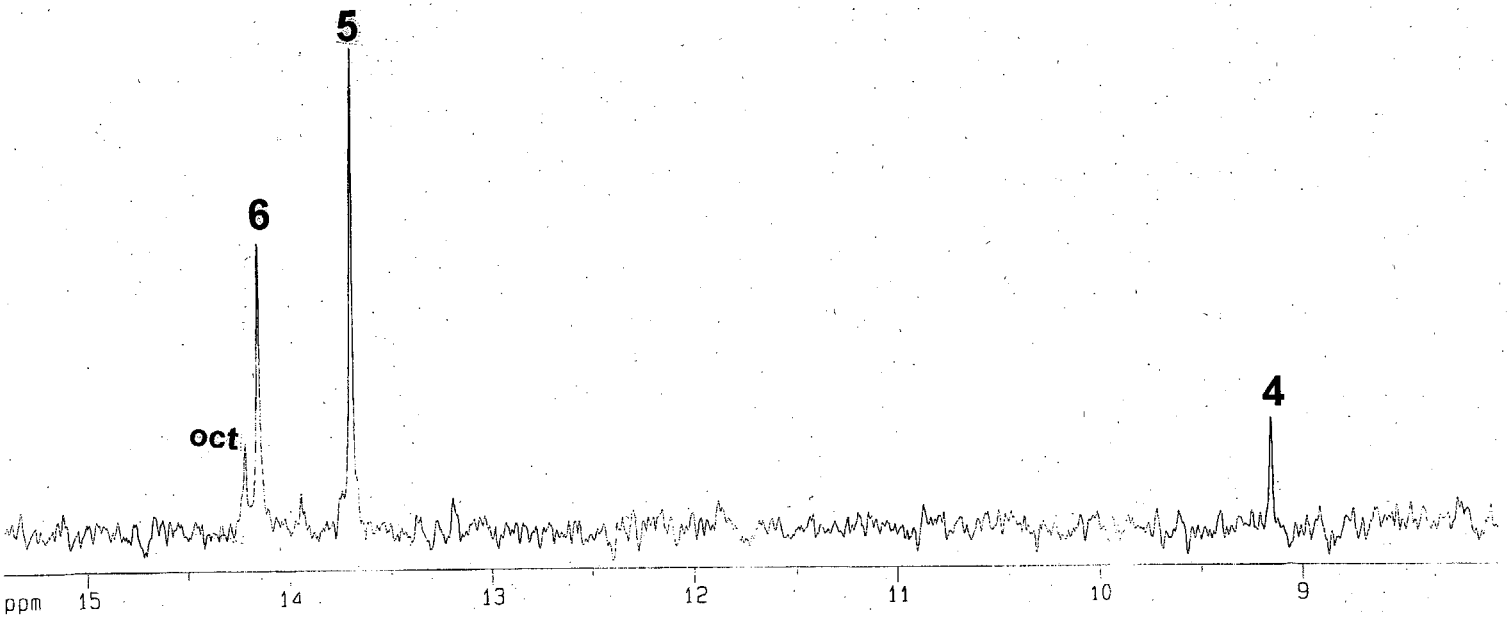
Peaks belonging to compounds **4**, **5**, and **6** are assigned by comparision with the individual spectra of **4**, **5**, and **6**. The octyl derivative likely is also present, but the peak belonging to the octyl derivative likely overlaps with the one assigned to **6**.



© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 3

-CH_2- Region of the ^{13}C Spectrum of Ethylene Insertion Products

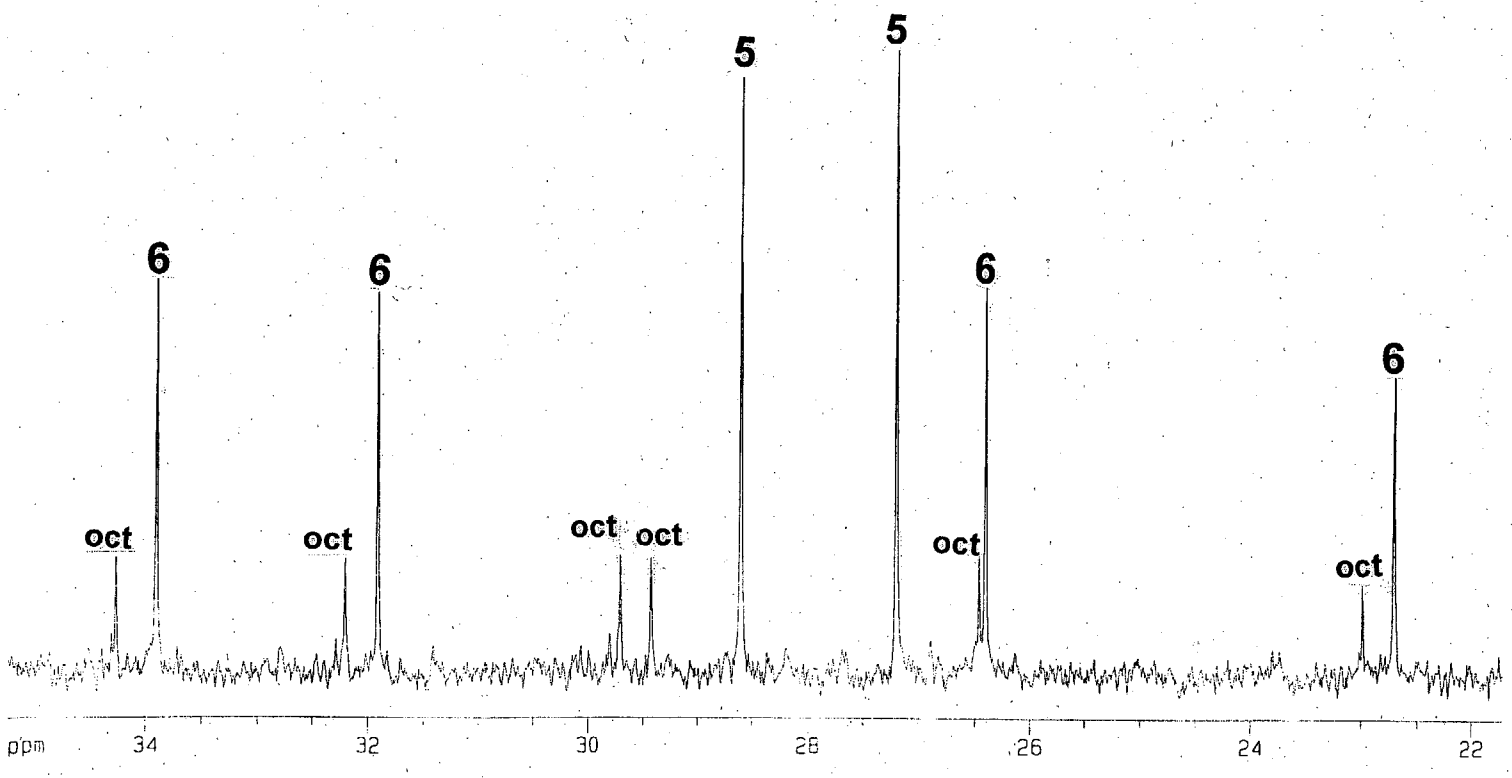
Peaks belonging to compounds **4**, **5**, and **6** are assigned by comparision with the individual spectra of **4**, **5**, and **6**. The peak labelled with "oct" is tentatively assigned to the octyl derivative.



© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 4

-CH_3 Region of the ^{13}C Spectrum of Ethylene Insertion Products

Peaks belonging to compounds **4**, **5**, and **6** are assigned by comparision with the individual spectra of **4**, **5**, and **6**. Peaks labelled with "oct" are tentatively assigned to the octyl derivative.



© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 5

Part 2. X-ray crystallographic structure determinations.

Table 1S. Crystal data and structure refinement for **2**.

Table 2S. Atomic coordinates for **2**.

Table 3S. Bond lengths and bond angles for **2**.

Table 4S. Anisotropic displacement coefficients for **2**.

Table 5S. H-atom coordinates for **2**.

Table 6S. Crystal data and structure refinement for **3**.

Table 7S. Atomic coordinates for **3**.

Table 8S. Bond lengths and bond angles for **3**.

Table 9S. Anisotropic displacement coefficients for **3**.

Table 10S. H-atom coordinates for **3**.

Table 1. Crystal data and structure refinement for 2.

Identification code	jia02
Empirical formula	$C_{35}H_{47}N_3Si_3Zr$
Formula weight	685.25
Temperature	173(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Orthorhombic
Space group	$Pca2_1$
Unit cell dimensions	a = 20.3524(3) Å alpha = 90° b = 10.7398(2) Å beta = 90° c = 34.0023(3) Å gamma = 90°
Volume, Z	7432.26(16) $Å^3$, 8
Density (calculated)	1.225 g/cm^3
Absorption coefficient	0.419 mm^{-1}
F(000)	2880
Crystal size	0.40 x 0.30 x 0.30 mm
Crystal color	colorless block
θ range for data collection	1.90 to 24.00°
Limiting indices	$-23 \le h \le 19$, $-11 \le k \le 12$, $-38 \le l \le 38$
Reflections collected	25805
Independent reflections	10786 (R_{int} = 0.0490)
Absorption correction	empirical
Max. and min. transmission	0.8847 and 0.8504
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	10786 / 1 / 818
Goodness-of-fit on F^2	1.345
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0591, wR2 = 0.1635
R indices (all data)	R1 = 0.0723, wR2 = 0.1793
Absolute structure parameter	0.27(5)

Largest diff. peak and hole	0.527 and −0.399 eÅ^{-3}

© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 9

Table 2S Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 2. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Zr(1A)	8079.5(3)	1822.1(6)	-3.0(2)	23.1(2)
Zr(1B)	7430.3(3)	6923.5(6)	2366.3(2)	24.4(2)
Si(1)	7999(2)	1240(3)	-928(1)	25(1)
Si(1')	8454(3)	417(6)	-810(2)	26(1)
Si(2)	8315(2)	-1004(3)	-338(1)	24(1)
Si(2')	7710(3)	-1031(5)	-121(2)	26(1)
Si(3)	6864(2)	232(3)	-365(1)	29(1)
Si(3')	6944(3)	1057(5)	-621(2)	25(1)
Si(4')	7860(4)	5536(7)	3171(2)	34(2)
Si(4)	7381(2)	6221(3)	3275(1)	25(1)
Si(5)	7809(1)	4101(3)	2656(1)	21(1)
Si(5')	7278(4)	4035(7)	2439(2)	34(2)
Si(6)	6309(1)	5055(3)	2701(1)	27(1)
Si(6')	6336(3)	5780(7)	2965(2)	32(2)
N(11B)	7803(4)	7160(6)	2930(2)	37(2)
N(11A)	8487(4)	2010(7)	-564(2)	42(2)
N(21A)	8359(4)	-13(6)	89(2)	46(2)
N(21B)	7848(3)	5180(6)	2252(2)	37(2)
N(31B)	6446(3)	6571(7)	2494(2)	37(2)
N(31A)	7089(3)	1766(7)	-154(2)	43(2)
C(1A)	8294(4)	1839(7)	977(2)	34(2)
C(1B)	7754(4)	7169(9)	1370(3)	42(2)
C(2A)	7917(5)	1235(9)	1259(3)	47(2)
C(2B)	7459(5)	6479(11)	1061(3)	57(3)
C(3A)	7251(5)	1596(9)	1322(3)	49(2)
C(3B)	6786(6)	6571(9)	996(3)	56(3)
C(4A)	6988(4)	2549(10)	1087(3)	52(3)
C(4B)	6413(5)	7386(10)	1231(3)	53(3)
C(5A)	7382(5)	3156(8)	798(3)	38(2)
C(5B)	6689(4)	8035(8)	1529(3)	39(2)
C(6A)	8045(4)	2814(8)	743(2)	27(2)
C(6B)	7372(4)	7961(7)	1613(2)	32(2)
C(7A)	8438(4)	3341(8)	411(2)	35(2)
C(7B)	7670(4)	8568(8)	1966(2)	38(2)
C(11A)	9578(4)	2660(8)	-819(3)	40(2)
C(11B)	8138(4)	9352(7)	3001(2)	30(2)
C(12B)	8609(4)	10284(8)	3081(2)	34(2)
C(12A)	10037(4)	3599(7)	-919(2)	36(2)
C(13A)	9895(4)	4834(7)	-854(2)	32(2)
C(13B)	9235(4)	9982(7)	3218(2)	29(2)
C(14A)	9284(4)	5149(7)	-695(2)	35(2)
C(14B)	9395(4)	8703(8)	3253(2)	37(2)
C(15B)	8924(4)	7768(7)	3162(2)	36(2)
C(15A)	8813(4)	4246(8)	-606(2)	34(2)
C(16B)	8289(4)	8093(7)	3032(2)	28(2)
C(16A)	8962(4)	2952(8)	-670(2)	32(2)
C(17A)	10387(4)	5879(8)	-949(3)	45(2)

C(17B)	9736(4)	11007(8)	3320(2)	41(2)
C(21B)	8934(4)	6071(7)	2095(2)	37(2)
C(21A)	9472(5)	448(8)	316(2)	42(2)
C(22A)	9985(4)	325(9)	604(3)	47(2)
C(22B)	9475(4)	6171(8)	1845(2)	39(2)
C(23A)	9948(4)	-508(9)	921(2)	42(2)
C(23B)	9565(4)	5389(8)	1526(2)	38(2)
C(24B)	9066(4)	4534(8)	1452(2)	39(2)
C(24A)	9356(4)	-1218(9)	940(2)	44(2)
C(25A)	8841(5)	-1108(8)	678(2)	44(2)
C(25B)	8512(4)	4432(9)	1679(2)	40(2)
C(26B)	8430(4)	5208(7)	2012(2)	37(2)
C(26A)	8908(4)	-227(7)	360(2)	37(2)
C(27A)	10481(5)	-605(10)	1226(3)	57(3)
C(27B)	10182(5)	5478(10)	1264(3)	57(3)
C(31A)	6802(4)	3975(9)	-170(3)	46(2)
C(31B)	6013(4)	8731(9)	2513(2)	38(2)
C(32B)	5530(4)	9611(9)	2412(3)	49(2)
C(32A)	6384(4)	4976(9)	-81(3)	47(2)
C(33B)	4934(4)	9282(9)	2214(2)	43(2)
C(33A)	5765(4)	4792(9)	99(2)	41(2)
C(34B)	4870(4)	8030(9)	2129(3)	44(2)
C(34A)	5592(4)	3557(9)	180(2)	42(2)
C(35B)	5364(4)	7134(7)	2212(3)	35(2)
C(35A)	6009(4)	2541(9)	111(2)	40(2)
C(36B)	5931(3)	7471(8)	2413(3)	33(2)
C(36A)	6634(4)	2755(8)	-77(2)	33(2)
C(37B)	4404(5)	10210(11)	2118(3)	70(3)
C(37A)	5304(5)	5911(9)	173(3)	51(3)
C(40B)	7123(4)	4767(7)	2971(2)	29(2)
C(40A)	7652(4)	-185(6)	-631(2)	25(2)
C(51A)	7243(9)	2268(12)	-1118(4)	109(6)
C(51B)	6583(9)	7011(11)	3488(4)	98(6)
C(52B)	7893(5)	5804(8)	3711(3)	50(2)
C(52A)	8491(5)	730(9)	-1363(2)	45(2)
C(53B)	8643(5)	4106(14)	2947(4)	90(5)
C(53A)	9146(5)	-1051(12)	-625(3)	73(4)
C(54A)	8072(4)	-2654(7)	-182(3)	44(2)
C(54B)	7656(5)	2484(8)	2474(3)	53(3)
C(55B)	6220(8)	3795(12)	2277(5)	123(7)
C(55A)	6715(8)	-1051(12)	57(5)	124(7)
C(56A)	6121(5)	371(9)	-679(3)	58(3)
C(56B)	5565(5)	4997(12)	3023(4)	81(4)

© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 11

Table 3S Bond lengths [Å] and angles [°] for 2

Zr(1A)-N(21A)	2.075(7)	Zr(1A)-N(31A)	2.082(7)
Zr(1A)-N(11A)	2.089(7)	Zr(1A)-C(7A)	2.274(8)
Zr(1A)-C(6A)	2.753(7)	Zr(1A)-Si(2')	3.181(6)
Zr(1A)-Si(1)	3.212(3)	Zr(1A)-Si(1')	3.222(6)
Zr(1A)-Si(3')	3.229(6)	Zr(1A)-Si(3)	3.250(3)
Zr(1B)-N(11B)	2.078(7)	Zr(1B)-N(31B)	2.085(7)
Zr(1B)-N(21B)	2.093(7)	Zr(1B)-C(7B)	2.282(8)
Zr(1B)-C(6B)	2.795(8)	Zr(1B)-Si(5')	3.128(8)
Zr(1B)-Si(4)	3.181(3)	Zr(1B)-Si(4')	3.236(8)
Zr(1B)-Si(6)	3.246(3)	Zr(1B)-Si(6')	3.259(8)
Si(1)-N(11A)	1.791(8)	Si(1)-C(52A)	1.867(9)
Si(1)-C(40A)	1.965(8)	Si(1)-C(51A)	2.001(14)
Si(1')-C(40A)	1.857(9)	Si(1')-N(11A)	1.905(9)
Si(1')-C(52A)	1.913(10)	Si(1')-C(53A)	2.205(14)
Si(2)-N(21A)	1.802(7)	Si(2)-C(40A)	1.894(8)
Si(2)-C(54A)	1.916(9)	Si(2)-C(53A)	1.954(11)
Si(2')-N(21A)	1.857(9)	Si(2')-C(54A)	1.903(10)
Si(2')-C(40A)	1.964(10)	Si(2')-C(55A)	2.114(14)
Si(3)-C(56A)	1.855(10)	Si(3)-N(31A)	1.856(8)
Si(3)-C(40A)	1.896(8)	Si(3)-C(55A)	2.012(16)
Si(3')-N(31A)	1.785(9)	Si(3')-C(56A)	1.840(11)
Si(3')-C(40A)	1.964(9)	Si(3')-C(51A)	2.218(17)
Si(4')-C(40B)	1.844(11)	Si(4')-C(52B)	1.860(11)
Si(4')-N(11B)	1.929(10)	Si(4')-Si(5)	2.336(8)
Si(4')-C(53B)	2.340(16)	Si(4)-N(11B)	1.766(7)
Si(4)-C(52B)	1.868(9)	Si(4)-C(40B)	1.945(9)
Si(4)-C(51B)	1.971(13)	Si(4)-Si(6')	2.420(8)
Si(5)-N(21B)	1.797(7)	Si(5)-C(54B)	1.868(9)
Si(5)-C(40B)	1.900(8)	Si(5)-C(53B)	1.964(11)
Si(5')-N(21B)	1.807(10)	Si(5')-C(54B)	1.839(12)
Si(5')-C(40B)	1.995(11)	Si(5')-C(55B)	2.237(16)
Si(6)-N(31B)	1.796(7)	Si(6)-C(56B)	1.868(10)
Si(6)-C(40B)	1.918(8)	Si(6)-C(55B)	1.986(15)
Si(6')-C(56B)	1.790(12)	Si(6')-N(31B)	1.827(10)
Si(6')-C(40B)	1.936(10)	Si(6')-C(51B)	2.270(17)
N(11B)-C(16B)	1.451(10)	N(11A)-C(16A)	1.446(10)
N(21A)-C(26A)	1.467(10)	N(21B)-C(26B)	1.440(11)
N(31B)-C(36B)	1.452(10)	N(31A)-C(36A)	1.433(10)
C(1A)-C(2A)	1.388(13)	C(1A)-C(6A)	1.409(12)
C(1B)-C(2B)	1.418(14)	C(1B)-C(6B)	1.418(13)
C(2A)-C(3A)	1.427(13)	C(2B)-C(3B)	1.392(14)
C(3A)-C(4A)	1.405(14)	C(3B)-C(4B)	1.407(15)
C(4A)-C(5A)	1.427(13)	C(4B)-C(5B)	1.354(13)
C(5A)-C(6A)	1.410(12)	C(5B)-C(6B)	1.420(12)
C(6A)-C(7A)	1.496(11)	C(6B)-C(7B)	1.494(12)
C(11A)-C(16A)	1.387(11)	C(11A)-C(12A)	1.416(11)
C(11B)-C(16B)	1.391(11)	C(11B)-C(12B)	1.412(11)
C(12B)-C(13B)	1.396(11)	C(12A)-C(13A)	1.375(11)
C(13A)-C(14A)	1.398(12)	C(13A)-C(17A)	1.538(11)
C(13B)-C(14B)	1.417(11)	C(13B)-C(17B)	1.540(11)
C(14A)-C(15A)	1.396(11)	C(14B)-C(15B)	1.422(12)
C(15B)-C(16B)	1.411(12)	C(15A)-C(16A)	1.439(11)
C(21B)-C(22B)	1.396(11)	C(21B)-C(26B)	1.411(12)
C(21A)-C(26A)	1.366(12)	C(21A)-C(22A)	1.439(12)

C(22A)-C(23A)	1.401(12)	C(22B)-C(23B)	1.384(11)
C(23A)-C(24A)	1.428(13)	C(23A)-C(27A)	1.505(12)
C(23B)-C(24B)	1.392(12)	C(23B)-C(27B)	1.541(12)
C(24B)-C(25B)	1.371(11)	C(24A)-C(25A)	1.380(12)
C(25A)-C(26A)	1.442(11)	C(25B)-C(26B)	1.415(11)
C(31A)-C(36A)	1.391(13)	C(31A)-C(32A)	1.405(12)
C(31B)-C(36B)	1.404(13)	C(31B)-C(32B)	1.407(12)
C(32B)-C(33B)	1.432(13)	C(32A)-C(33A)	1.412(12)
C(33B)-C(34B)	1.382(12)	C(33B)-C(37B)	1.503(12)
C(33A)-C(34A)	1.400(13)	C(33A)-C(37A)	1.546(11)
C(34B)-C(35B)	1.420(11)	C(34A)-C(35A)	1.403(12)
C(35B)-C(36B)	1.391(11)	C(35A)-C(36A)	1.441(11)

N(21A)-Zr(1A)-N(31A)	106.0(3)	N(21A)-Zr(1A)-N(11A)	96.9(3)
N(31A)-Zr(1A)-N(11A)	99.3(3)	N(21A)-Zr(1A)-C(7A)	120.0(3)
N(31A)-Zr(1A)-C(7A)	118.9(3)	N(11A)-Zr(1A)-C(7A)	111.6(3)
N(21A)-Zr(1A)-C(6A)	103.7(3)	N(31A)-Zr(1A)-C(6A)	102.3(3)
N(11A)-Zr(1A)-C(6A)	144.5(2)	C(7A)-Zr(1A)-C(6A)	32.9(3)
N(21A)-Zr(1A)-Si(2')	33.8(2)	N(31A)-Zr(1A)-Si(2')	73.3(2)
N(11A)-Zr(1A)-Si(2')	94.1(2)	C(7A)-Zr(1A)-Si(2')	147.6(2)
C(6A)-Zr(1A)-Si(2')	118.9(2)	N(21A)-Zr(1A)-Si(1)	88.64(19)
N(31A)-Zr(1A)-Si(1)	72.8(2)	N(11A)-Zr(1A)-Si(1)	31.22(19)
C(7A)-Zr(1A)-Si(1)	139.6(2)	C(6A)-Zr(1A)-Si(1)	167.64(19)
Si(2')-Zr(1A)-Si(1)	71.17(12)	N(21A)-Zr(1A)-Si(1')	67.5(2)
N(31A)-Zr(1A)-Si(1')	90.3(2)	N(11A)-Zr(1A)-Si(1')	34.3(2)
C(7A)-Zr(1A)-Si(1')	141.9(2)	C(6A)-Zr(1A)-Si(1')	166.4(2)
Si(2')-Zr(1A)-Si(1')	59.84(15)	Si(1)-Zr(1A)-Si(1')	24.08(12)
N(21A)-Zr(1A)-Si(3')	93.0(2)	N(31A)-Zr(1A)-Si(3')	30.6(2)
N(11A)-Zr(1A)-Si(3')	73.4(2)	C(7A)-Zr(1A)-Si(3')	144.5(2)
C(6A)-Zr(1A)-Si(3')	132.81(19)	Si(2')-Zr(1A)-Si(3')	60.26(15)
Si(1)-Zr(1A)-Si(3')	43.68(12)	Si(1')-Zr(1A)-Si(3')	59.75(14)
N(21A)-Zr(1A)-Si(3)	76.5(2)	N(31A)-Zr(1A)-Si(3)	32.2(2)
N(11A)-Zr(1A)-Si(3)	90.4(2)	C(7A)-Zr(1A)-Si(3)	148.9(2)
C(6A)-Zr(1A)-Si(3)	122.23(17)	Si(2')-Zr(1A)-Si(3)	42.77(12)
Si(1)-Zr(1A)-Si(3)	59.17(8)	Si(1')-Zr(1A)-Si(3)	67.11(12)
Si(3')-Zr(1A)-Si(3)	22.27(12)	N(11B)-Zr(1B)-N(31B)	100.4(3)
N(11B)-Zr(1B)-N(21B)	97.6(3)	N(31B)-Zr(1B)-N(21B)	105.5(3)
N(11B)-Zr(1B)-C(7B)	112.2(3)	N(31B)-Zr(1B)-C(7B)	118.0(3)
N(21B)-Zr(1B)-C(7B)	119.7(3)	N(11B)-Zr(1B)-C(6B)	144.3(3)
N(31B)-Zr(1B)-C(6B)	102.9(2)	N(21B)-Zr(1B)-C(6B)	101.8(3)
C(7B)-Zr(1B)-C(6B)	32.3(3)	N(11B)-Zr(1B)-Si(5')	94.8(2)
N(31B)-Zr(1B)-Si(5')	73.0(3)	N(21B)-Zr(1B)-Si(5')	33.6(2)
C(7B)-Zr(1B)-Si(5')	146.7(3)	C(6B)-Zr(1B)-Si(5')	117.6(2)
N(11B)-Zr(1B)-Si(4)	31.13(19)	N(31B)-Zr(1B)-Si(4)	73.98(18)
N(21B)-Zr(1B)-Si(4)	88.87(19)	C(7B)-Zr(1B)-Si(4)	140.3(2)
C(6B)-Zr(1B)-Si(4)	169.34(19)	Si(5')-Zr(1B)-Si(4)	71.61(16)
N(11B)-Zr(1B)-Si(4')	34.6(2)	N(31B)-Zr(1B)-Si(4')	90.0(2)
N(21B)-Zr(1B)-Si(4')	68.6(2)	C(7B)-Zr(1B)-Si(4')	143.4(3)
C(6B)-Zr(1B)-Si(4')	165.8(2)	Si(5')-Zr(1B)-Si(4')	60.2(2)
Si(4)-Zr(1B)-Si(4')	22.84(15)	N(11B)-Zr(1B)-Si(6)	90.5(2)
N(31B)-Zr(1B)-Si(6)	30.5(2)	N(21B)-Zr(1B)-Si(6)	78.30(19)
C(7B)-Zr(1B)-Si(6)	146.9(2)	C(6B)-Zr(1B)-Si(6)	122.54(18)
Si(5')-Zr(1B)-Si(6)	44.67(15)	Si(4)-Zr(1B)-Si(6)	59.39(8)
Si(4')-Zr(1B)-Si(6)	66.98(15)	N(11B)-Zr(1B)-Si(6')	73.6(2)
N(31B)-Zr(1B)-Si(6')	31.2(2)	N(21B)-Zr(1B)-Si(6')	93.2(2)
C(7B)-Zr(1B)-Si(6')	144.1(3)	C(6B)-Zr(1B)-Si(6')	133.9(2)
Si(5')-Zr(1B)-Si(6')	60.6(2)	Si(4)-Zr(1B)-Si(6')	44.13(15)
Si(4')-Zr(1B)-Si(6')	58.86(19)	Si(6)-Zr(1B)-Si(6')	21.09(15)
N(11A)-Si(1)-C(52A)	112.8(4)	N(11A)-Si(1)-C(40A)	101.7(4)

C(52A)-Si(1)-C(40A)	111.8(4)	N(11A)-Si(1)-C(51A)	113.3(5)
C(52A)-Si(1)-C(51A)	108.6(5)	C(40A)-Si(1)-C(51A)	108.6(6)
N(11A)-Si(1)-Zr(1A)	37.2(2)	C(52A)-Si(1)-Zr(1A)	143.6(3)
C(40A)-Si(1)-Zr(1A)	70.5(2)	C(51A)-Si(1)-Zr(1A)	104.3(4)
C(40A)-Si(1')-N(11A)	101.5(4)	C(40A)-Si(1')-C(52A)	114.6(5)
N(11A)-Si(1')-C(52A)	105.8(5)	C(40A)-Si(1')-C(53A)	102.7(5)
N(11A)-Si(1')-C(53A)	119.7(4)	C(52A)-Si(1')-C(53A)	112.3(5)
C(40A)-Si(1')-Zr(1A)	71.2(3)	N(11A)-Si(1')-Zr(1A)	38.2(2)
C(52A)-Si(1')-Zr(1A)	139.9(4)	C(53A)-Si(1')-Zr(1A)	104.1(3)
N(21A)-Si(2)-C(40A)	100.7(4)	N(21A)-Si(2)-C(54A)	109.7(4)
C(40A)-Si(2)-C(54A)	113.0(4)	N(21A)-Si(2)-C(53A)	112.0(4)
C(40A)-Si(2)-C(53A)	111.4(5)	C(54A)-Si(2)-C(53A)	109.8(5)
N(21A)-Si(2')-C(54A)	107.9(5)	N(21A)-Si(2')-C(40A)	96.3(4)
C(54A)-Si(2')-C(40A)	110.5(4)	N(21A)-Si(2')-C(55A)	125.3(6)
C(54A)-Si(2')-C(55A)	113.1(5)	C(40A)-Si(2')-C(55A)	101.5(6)
N(21A)-Si(2')-Zr(1A)	38.4(2)	C(54A)-Si(2')-Zr(1A)	143.6(4)
C(40A)-Si(2')-Zr(1A)	71.3(3)	C(55A)-Si(2')-Zr(1A)	101.6(4)
C(56A)-Si(3)-N(31A)	110.6(4)	C(56A)-Si(3)-C(40A)	115.7(4)
N(31A)-Si(3)-C(40A)	100.7(3)	C(56A)-Si(3)-C(55A)	110.0(7)
N(31A)-Si(3)-C(55A)	111.6(5)	C(40A)-Si(3)-C(55A)	107.8(5)
C(56A)-Si(3)-Zr(1A)	142.7(4)	N(31A)-Si(3)-Zr(1A)	36.7(2)
C(40A)-Si(3)-Zr(1A)	70.1(2)	C(55A)-Si(3)-Zr(1A)	101.8(5)
N(31A)-Si(3')-C(56A)	114.6(5)	N(31A)-Si(3')-C(40A)	100.7(4)
C(56A)-Si(3')-C(40A)	113.2(5)	N(31A)-Si(3')-C(51A)	112.5(5)
C(56A)-Si(3')-C(51A)	113.7(6)	C(40A)-Si(3')-C(51A)	100.6(5)
N(31A)-Si(3')-Zr(1A)	36.4(2)	C(56A)-Si(3')-Zr(1A)	145.4(5)
C(40A)-Si(3')-Zr(1A)	70.1(3)	C(51A)-Si(3')-Zr(1A)	98.7(4)
C(40B)-Si(4')-C(52B)	117.6(6)	C(40B)-Si(4')-N(11B)	101.5(5)
C(52B)-Si(4')-N(11B)	106.3(5)	C(40B)-Si(4')-Si(5)	52.5(3)
C(52B)-Si(4')-Si(5)	147.6(5)	N(11B)-Si(4')-Si(5)	106.0(4)
C(40B)-Si(4')-C(53B)	98.0(5)	C(52B)-Si(4')-C(53B)	113.5(6)
N(11B)-Si(4')-C(53B)	119.8(5)	Si(5)-Si(4')-C(53B)	49.7(4)
C(40B)-Si(4')-Zr(1B)	71.0(3)	C(52B)-Si(4')-Zr(1B)	140.6(5)
N(11B)-Si(4')-Zr(1B)	37.7(2)	Si(5)-Si(4')-Zr(1B)	70.0(2)
C(53B)-Si(4')-Zr(1B)	102.2(4)	N(11B)-Si(4)-C(52B)	113.1(4)
N(11B)-Si(4)-C(40B)	103.7(4)	C(52B)-Si(4)-C(40B)	112.3(4)
N(11B)-Si(4)-C(51B)	113.5(5)	C(52B)-Si(4)-C(51B)	105.7(6)
C(40B)-Si(4)-C(51B)	108.5(6)	N(11B)-Si(4)-Si(6')	104.5(3)
C(52B)-Si(4)-Si(6')	142.0(4)	C(40B)-Si(4)-Si(6')	51.3(3)
C(51B)-Si(4)-Si(6')	61.3(6)	N(11B)-Si(4)-Zr(1B)	37.5(2)
C(52B)-Si(4)-Zr(1B)	144.2(4)	C(40B)-Si(4)-Zr(1B)	71.5(2)
C(51B)-Si(4)-Zr(1B)	106.3(4)	Si(6')-Si(4)-Zr(1B)	69.7(2)
N(21B)-Si(5)-C(54B)	110.8(4)	N(21B)-Si(5)-C(40B)	102.7(3)
C(54B)-Si(5)-C(40B)	114.4(4)	N(21B)-Si(5)-C(53B)	110.1(4)
C(54B)-Si(5)-C(53B)	108.2(6)	C(40B)-Si(5)-C(53B)	110.5(5)
N(21B)-Si(5)-Si(4')	98.3(3)	C(54B)-Si(5)-Si(4')	150.2(4)
C(40B)-Si(5)-Si(4')	50.3(3)	C(53B)-Si(5)-Si(4')	65.3(5)
N(21B)-Si(5')-C(54B)	111.7(6)	N(21B)-Si(5')-C(40B)	98.8(5)
C(54B)-Si(5')-C(40B)	111.4(5)	N(21B)-Si(5')-C(55B)	127.6(6)
C(54B)-Si(5')-C(55B)	108.4(6)	C(40B)-Si(5')-C(55B)	96.7(6)
N(21B)-Si(5')-Zr(1B)	39.9(3)	C(54B)-Si(5')-Zr(1B)	149.5(5)
C(40B)-Si(5')-Zr(1B)	72.4(3)	C(55B)-Si(5')-Zr(1B)	101.0(4)
N(31B)-Si(6)-C(56B)	112.6(5)	N(31B)-Si(6)-C(40B)	101.5(3)
C(56B)-Si(6)-C(40B)	114.5(5)	N(31B)-Si(6)-C(55B)	110.3(5)
C(56B)-Si(6)-C(55B)	109.2(7)	C(40B)-Si(6)-C(55B)	108.4(5)
N(31B)-Si(6)-Zr(1B)	36.2(2)	C(56B)-Si(6)-Zr(1B)	142.7(5)
C(40B)-Si(6)-Zr(1B)	70.1(2)	C(55B)-Si(6)-Zr(1B)	103.3(5)
C(56B)-Si(6')-N(31B)	114.9(6)	C(56B)-Si(6')-C(40B)	117.4(6)
N(31B)-Si(6')-C(40B)	99.7(5)	C(56B)-Si(6')-C(51B)	112.5(7)

N(31B)-Si(6')-C(51B)	112.8(5)	C(40B)-Si(6')-C(51B)	97.9(5)
C(56B)-Si(6')-Si(4)	144.6(6)	N(31B)-Si(6')-Si(4)	100.5(4)
C(40B)-Si(6')-Si(4)	51.6(3)	C(51B)-Si(6')-Si(4)	49.6(4)
C(56B)-Si(6')-Zr(1B)	147.5(6)	N(31B)-Si(6')-Zr(1B)	36.2(3)
C(40B)-Si(6')-Zr(1B)	69.7(3)	C(51B)-Si(6')-Zr(1B)	96.8(5)
Si(4)-Si(6')-Zr(1B)	66.22(19)	C(16B)-N(11B)-Si(4)	124.6(5)
C(16B)-N(11B)-Si(4')	118.8(6)	Si(4)-N(11B)-Si(4')	39.9(3)
C(16B)-N(11B)-Zr(1B)	123.6(5)	Si(4)-N(11B)-Zr(1B)	111.4(3)
Si(4')-N(11B)-Zr(1B)	107.6(4)	C(16A)-N(11A)-Si(1)	121.3(6)
C(16A)-N(11A)-Si(1')	122.7(6)	Si(1)-N(11A)-Si(1')	42.5(3)
C(16A)-N(11A)-Zr(1A)	124.2(5)	Si(1)-N(11A)-Zr(1A)	111.6(4)
Si(1')-N(11A)-Zr(1A)	107.5(4)	C(26A)-N(21A)-Si(2)	116.9(6)
C(26A)-N(21A)-Si(2')	133.7(6)	Si(2)-N(21A)-Si(2')	46.2(3)
C(26A)-N(21A)-Zr(1A)	116.9(5)	Si(2)-N(21A)-Zr(1A)	115.2(3)
Si(2')-N(21A)-Zr(1A)	107.9(4)	C(26B)-N(21B)-Si(5)	118.9(5)
C(26B)-N(21B)-Si(5')	138.0(6)	Si(5)-N(21B)-Si(5')	42.6(3)
C(26B)-N(21B)-Zr(1B)	114.9(5)	Si(5)-N(21B)-Zr(1B)	114.7(3)
Si(5')-N(21B)-Zr(1B)	106.4(4)	C(36B)-N(31B)-Si(6)	124.5(5)
C(36B)-N(31B)-Si(6')	112.9(6)	Si(6)-N(31B)-Si(6')	38.4(3)
C(36B)-N(31B)-Zr(1B)	122.2(5)	Si(6)-N(31B)-Zr(1B)	113.3(4)
Si(6')-N(31B)-Zr(1B)	112.7(4)	C(36A)-N(31A)-Si(3')	111.9(6)
C(36A)-N(31A)-Si(3)	124.7(5)	Si(3')-N(31A)-Si(3)	40.1(3)
C(36A)-N(31A)-Zr(1A)	124.0(5)	Si(3')-N(31A)-Zr(1A)	113.0(4)
Si(3)-N(31A)-Zr(1A)	111.1(3)	C(2A)-C(1A)-C(6A)	122.5(8)
C(2B)-C(1B)-C(6B)	120.9(8)	C(1A)-C(2A)-C(3A)	120.1(9)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	119.9(10)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	118.3(8)
C(2B)-C(3B)-C(4B)	119.0(9)	C(3A)-C(4A)-C(5A)	120.7(9)
C(5B)-C(4B)-C(3B)	121.4(9)	C(6A)-C(5A)-C(4A)	120.6(8)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	121.9(9)	C(1A)-C(6A)-C(5A)	117.6(7)
C(1A)-C(6A)-C(7A)	121.0(7)	C(5A)-C(6A)-C(7A)	120.8(8)
C(1A)-C(6A)-Zr(1A)	102.9(5)	C(5A)-C(6A)-Zr(1A)	104.3(5)
C(7A)-C(6A)-Zr(1A)	55.7(4)	C(1B)-C(6B)-C(5B)	116.9(8)
C(1B)-C(6B)-C(7B)	120.5(8)	C(5B)-C(6B)-C(7B)	122.2(8)
C(1B)-C(6B)-Zr(1B)	105.7(5)	C(5B)-C(6B)-Zr(1B)	104.3(5)
C(7B)-C(6B)-Zr(1B)	54.6(4)	C(6A)-C(7A)-Zr(1A)	91.4(5)
C(6B)-C(7B)-Zr(1B)	93.1(5)	C(16A)-C(11A)-C(12A)	121.5(8)
C(16B)-C(11B)-C(12B)	121.6(7)	C(13B)-C(12B)-C(11B)	121.4(7)
C(13A)-C(12A)-C(11A)	120.7(8)	C(12A)-C(13A)-C(14A)	118.8(7)
C(12A)-C(13A)-C(17A)	122.2(8)	C(14A)-C(13A)-C(17A)	119.0(7)
C(12B)-C(13B)-C(14B)	117.6(7)	C(12B)-C(13B)-C(17B)	120.9(7)
C(14B)-C(13B)-C(17B)	121.5(8)	C(15A)-C(14A)-C(13A)	121.8(7)
C(13B)-C(14B)-C(15B)	120.8(8)	C(16B)-C(15B)-C(14B)	120.8(7)
C(14A)-C(15A)-C(16A)	119.5(7)	C(11B)-C(16B)-C(15B)	117.8(7)
C(11B)-C(16B)-N(11B)	120.2(7)	C(15B)-C(16B)-N(11B)	121.9(7)
C(11A)-C(16A)-C(15A)	117.7(7)	C(11A)-C(16A)-N(11A)	122.5(8)
C(15A)-C(16A)-N(11A)	119.7(7)	C(22B)-C(21B)-C(26B)	120.0(7)
C(26A)-C(21A)-C(22A)	119.1(7)	C(23A)-C(22A)-C(21A)	122.9(8)
C(23B)-C(22B)-C(21B)	122.5(8)	C(22A)-C(23A)-C(24A)	114.9(8)
C(22A)-C(23A)-C(27A)	122.4(9)	C(24A)-C(23A)-C(27A)	122.7(8)
C(22B)-C(23B)-C(24B)	116.4(8)	C(22B)-C(23B)-C(27B)	121.5(8)
C(24B)-C(23B)-C(27B)	122.1(8)	C(25B)-C(24B)-C(23B)	123.4(8)
C(25A)-C(24A)-C(23A)	124.5(9)	C(24A)-C(25A)-C(26A)	117.8(9)
C(24B)-C(25B)-C(26B)	120.1(9)	C(21B)-C(26B)-C(25B)	117.5(8)
C(21B)-C(26B)-N(21B)	119.8(7)	C(25B)-C(26B)-N(21B)	122.6(8)
C(21A)-C(26A)-C(25A)	120.7(8)	C(21A)-C(26A)-N(21A)	119.1(7)
C(25A)-C(26A)-N(21A)	120.1(8)	C(36A)-C(31A)-C(32A)	121.5(8)
C(36B)-C(31B)-C(32B)	120.4(8)	C(31B)-C(32B)-C(33B)	122.8(9)
C(31A)-C(32A)-C(33A)	121.8(9)	C(34B)-C(33B)-C(32B)	114.7(8)
C(34B)-C(33B)-C(37B)	122.2(9)	C(32B)-C(33B)-C(37B)	123.1(9)

C(34A)-C(33A)-C(32A)	116.3(8)	C(34A)-C(33A)-C(37A)	123.4(8)
C(32A)-C(33A)-C(37A)	120.2(9)	C(33B)-C(34B)-C(35B)	123.4(8)
C(33A)-C(34A)-C(35A)	123.5(8)	C(36B)-C(35B)-C(34B)	120.7(8)
C(34A)-C(35A)-C(36A)	118.9(9)	C(35B)-C(36B)-C(31B)	117.9(7)
C(35B)-C(36B)-N(31B)	121.3(7)	C(31B)-C(36B)-N(31B)	120.6(7)
C(31A)-C(36A)-N(31A)	119.8(7)	C(31A)-C(36A)-C(35A)	117.9(8)
N(31A)-C(36A)-C(35A)	122.2(8)	Si(4')-C(40B)-Si(5)	77.2(4)
Si(4')-C(40B)-Si(6)	143.8(5)	Si(5)-C(40B)-Si(6)	115.2(4)
Si(4')-C(40B)-Si(6')	115.2(5)	Si(5)-C(40B)-Si(6')	144.5(5)
Si(6)-C(40B)-Si(6')	36.0(3)	Si(4')-C(40B)-Si(4)	39.1(3)
Si(5)-C(40B)-Si(4)	113.8(4)	Si(6)-C(40B)-Si(4)	111.0(4)
Si(6')-C(40B)-Si(4)	77.1(4)	Si(4')-C(40B)-Si(5')	112.4(5)
Si(5)-C(40B)-Si(5')	39.2(3)	Si(6)-C(40B)-Si(5')	76.5(4)
Si(6')-C(40B)-Si(5')	110.1(5)	Si(4)-C(40B)-Si(5')	139.0(5)
Si(1')-C(40A)-Si(2)	73.0(3)	Si(1')-C(40A)-Si(3)	144.8(4)
Si(2)-C(40A)-Si(3)	117.5(4)	Si(1')-C(40A)-Si(2')	113.4(5)
Si(2)-C(40A)-Si(2')	43.7(3)	Si(3)-C(40A)-Si(2')	74.8(3)
Si(1')-C(40A)-Si(3')	114.5(4)	Si(2)-C(40A)-Si(3')	145.9(5)
Si(3)-C(40A)-Si(3')	37.8(2)	Si(2')-C(40A)-Si(3')	110.0(4)
Si(1')-C(40A)-Si(1)	41.0(3)	Si(2)-C(40A)-Si(1)	112.1(4)
Si(3)-C(40A)-Si(1)	111.4(4)	Si(2')-C(40A)-Si(1)	142.5(5)
Si(3')-C(40A)-Si(1)	75.2(3)	Si(1)-C(51A)-Si(3')	69.0(4)
Si(4)-C(51B)-Si(6')	69.2(4)	Si(4')-C(52B)-Si(4)	39.9(3)
Si(1)-C(52A)-Si(1')	41.6(3)	Si(5)-C(53B)-Si(4')	65.1(4)
Si(2)-C(53A)-Si(1')	64.6(3)	Si(2')-C(54A)-Si(2)	44.2(3)
Si(5')-C(54B)-Si(5)	41.4(3)	Si(6)-C(55B)-Si(5')	69.8(4)
Si(3)-C(55A)-Si(2')	69.2(4)	Si(3')-C(56A)-Si(3)	39.6(3)
Si(6')-C(56B)-Si(6)	37.9(3)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 16

Table 4S Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 2.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \ldots + 2hka^*b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Zr(1A)	23(1)	21(1)	25(1)	-3(1)	1(1)	0(1)
Zr(1B)	22(1)	25(1)	27(1)	7(1)	-1(1)	-2(1)
Si(1)	32(2)	23(2)	22(2)	2(1)	1(1)	1(1)
Si(1')	29(3)	26(3)	24(3)	-5(2)	3(3)	-1(3)
Si(2)	28(2)	19(2)	27(2)	-3(1)	2(1)	1(1)
Si(2')	27(3)	23(3)	27(3)	2(2)	2(3)	-4(2)
Si(3)	25(2)	26(2)	37(2)	-4(2)	6(2)	0(1)
Si(3')	19(3)	20(3)	37(3)	-8(3)	-4(3)	9(2)
Si(4')	36(4)	26(4)	38(4)	-2(3)	-1(4)	-3(3)
Si(4)	30(2)	21(2)	24(2)	-1(1)	0(1)	3(1)
Si(5)	20(2)	18(2)	25(1)	1(1)	-2(1)	3(1)
Si(5')	36(4)	28(4)	37(4)	2(3)	6(4)	3(3)
Si(6)	14(1)	27(2)	40(2)	6(2)	-5(1)	-3(1)
Si(6')	24(4)	30(4)	42(4)	4(4)	-1(3)	8(3)
N(11B)	48(4)	33(4)	28(4)	1(3)	-6(3)	-11(3)
N(11A)	43(4)	47(5)	36(4)	-7(3)	5(3)	-18(4)
N(21A)	76(5)	25(4)	36(4)	-2(3)	-26(4)	4(4)
N(21B)	47(4)	26(4)	38(4)	3(3)	15(3)	-1(3)
N(31B)	28(4)	41(4)	41(4)	26(3)	-5(3)	2(3)
N(31A)	15(3)	58(5)	56(5)	-29(4)	0(3)	10(3)
C(1A)	36(5)	26(5)	39(5)	-9(3)	10(4)	0(3)
C(1B)	23(4)	61(6)	43(5)	4(5)	2(4)	-2(4)
C(2A)	50(6)	42(6)	49(5)	1(4)	-5(5)	-6(4)
C(2B)	58(7)	67(7)	47(6)	-18(5)	-7(5)	2(5)
C(3A)	47(6)	59(6)	40(5)	10(4)	8(5)	-19(5)
C(3B)	68(7)	44(6)	54(6)	-10(5)	-24(5)	0(5)
C(4A)	31(5)	70(8)	56(6)	-2(6)	7(5)	-9(5)
C(4B)	50(6)	54(6)	57(6)	12(5)	-11(5)	-1(5)
C(5A)	43(5)	31(5)	39(5)	-2(4)	-4(4)	-5(4)
C(5B)	33(5)	44(6)	38(5)	2(4)	-2(4)	11(4)
C(6A)	32(5)	27(4)	21(4)	-7(3)	0(3)	-8(3)
C(6B)	44(5)	28(5)	23(4)	12(3)	-3(4)	-9(4)
C(7A)	43(5)	32(4)	31(4)	-12(3)	3(4)	-3(4)
C(7B)	39(5)	42(5)	34(4)	9(4)	-7(4)	-5(4)
C(11A)	39(5)	27(5)	56(5)	-7(4)	14(4)	-1(4)
C(11B)	26(4)	35(5)	30(4)	2(3)	-7(3)	-2(3)
C(12B)	36(5)	34(5)	32(4)	-1(3)	-6(4)	7(4)
C(12A)	35(5)	27(4)	45(5)	-5(4)	16(4)	0(4)
C(13A)	45(5)	29(4)	23(4)	7(3)	6(4)	-10(4)
C(13B)	44(5)	20(4)	25(4)	-4(3)	0(4)	-2(3)
C(14A)	43(5)	20(4)	40(4)	-2(3)	3(4)	1(4)
C(14B)	34(5)	37(5)	40(4)	-2(4)	-17(4)	7(4)
C(15B)	45(5)	20(4)	43(5)	5(4)	-8(4)	-4(4)
C(15A)	27(4)	38(5)	37(4)	0(4)	7(4)	5(4)
C(16B)	35(5)	29(5)	21(4)	1(3)	1(3)	-10(3)
C(16A)	37(5)	42(5)	16(3)	4(3)	2(3)	-11(4)
C(17A)	42(5)	43(6)	51(5)	9(4)	5(4)	-4(4)

C(17B)	46(5)	42(5)	36(4)	-4(4)	-3(4)	-12(4)
C(21B)	48(5)	28(5)	35(4)	-10(3)	12(4)	-1(4)
C(21A)	66(6)	30(5)	29(4)	9(3)	-1(4)	1(4)
C(22A)	39(5)	49(6)	54(5)	-4(5)	1(4)	-2(4)
C(22B)	49(5)	34(5)	34(4)	1(4)	-1(4)	-10(4)
C(23A)	39(5)	50(6)	38(5)	0(4)	-2(4)	21(4)
C(23B)	34(5)	41(5)	38(4)	-5(4)	4(4)	8(4)
C(24B)	49(5)	39(5)	29(4)	-1(4)	8(4)	6(4)
C(24A)	44(5)	50(6)	38(4)	4(4)	-17(4)	6(4)
C(25A)	62(6)	26(5)	44(5)	-1(4)	-7(4)	10(4)
C(25B)	46(5)	45(5)	30(4)	-6(4)	8(4)	-5(4)
C(26B)	58(6)	28(4)	25(4)	-2(3)	7(4)	9(4)
C(26A)	52(6)	25(4)	35(4)	-2(3)	-7(4)	12(4)
C(27A)	52(6)	66(7)	52(5)	6(5)	-15(5)	3(5)
C(27B)	65(7)	57(6)	48(5)	1(5)	18(5)	2(5)
C(31A)	30(5)	64(7)	43(5)	-26(5)	-5(4)	7(4)
C(31B)	24(4)	53(6)	37(5)	4(4)	0(3)	12(4)
C(32B)	52(6)	44(5)	50(5)	1(5)	17(5)	2(4)
C(32A)	42(5)	47(5)	53(6)	-13(4)	-11(4)	-6(4)
C(33B)	39(5)	48(6)	41(5)	18(4)	4(4)	21(4)
C(33A)	34(5)	57(6)	32(5)	-16(4)	-1(4)	8(4)
C(34B)	28(5)	56(6)	49(5)	12(4)	-9(4)	10(4)
C(34A)	24(4)	67(6)	36(4)	-17(4)	7(4)	2(4)
C(35B)	28(4)	26(4)	52(5)	15(4)	2(4)	7(3)
C(35A)	25(4)	52(6)	44(5)	-9(4)	7(4)	7(4)
C(36B)	18(4)	44(5)	38(4)	13(4)	-10(4)	-7(3)
C(36A)	23(4)	43(5)	32(5)	-9(4)	-8(3)	5(3)
C(37B)	68(8)	80(8)	62(6)	23(6)	5(6)	29(6)
C(37A)	48(6)	56(6)	50(5)	-14(4)	-6(4)	29(5)
C(40B)	22(4)	26(4)	38(4)	9(3)	-4(4)	3(3)
C(40A)	26(4)	10(4)	39(4)	-1(3)	3(3)	-1(3)
C(51A)	208(18)	44(7)	74(9)	-5(6)	-76(11)	50(9)
C(51B)	174(15)	55(8)	65(8)	5(6)	59(9)	60(9)
C(52B)	80(7)	36(5)	34(5)	1(4)	-24(5)	0(5)
C(52A)	51(6)	59(6)	25(4)	1(4)	12(4)	2(5)
C(53B)	28(5)	131(12)	112(10)	82(9)	-22(6)	4(7)
C(53A)	34(5)	101(9)	84(8)	-53(7)	5(5)	10(6)
C(54A)	57(6)	17(4)	59(5)	2(4)	4(5)	8(4)
C(54B)	68(7)	24(5)	68(7)	-9(4)	-23(5)	4(4)
C(55B)	172(15)	48(7)	148(14)	13(8)	-132(13)	-37(8)
C(55A)	145(13)	63(8)	163(15)	-31(9)	130(12)	-48(9)
C(56A)	35(5)	54(6)	84(7)	-27(6)	-5(5)	1(5)
C(56B)	21(5)	106(10)	118(10)	52(8)	20(6)	8(6)

© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 18

Table 55 Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 2.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	8737	1586	940	40
H(1BA)	8213	7099	1415	51
H(2A)	8103	580	1410	56
H(2BA)	7721	5955	900	69
H(3A)	6992	1202	1518	59
H(3BA)	6582	6092	795	67
H(4A)	6542	2793	1121	63
H(4BA)	5957	7482	1179	64
H(5A)	7196	3796	640	45
H(5BA)	6419	8554	1687	47
H(7A)	8918	3318	457	42
H(7B)	8297	4187	332	42
H(7BA)	7442	9344	2044	46
H(7BB)	8147	8717	1938	46
H(11A)	9694	1810	-855	48
H(11B)	7708	9592	2923	36
H(12B)	8496	11133	3042	41
H(12A)	10447	3374	-1031	43
H(14A)	9186	6000	-646	41
H(14B)	9821	8467	3339	44
H(15B)	9039	6915	3189	43
H(15A)	8397	4484	-504	41
H(17A)	10788	5516	-1060	68
H(17B)	10495	6334	-708	68
H(17C)	10191	6452	-1141	68
H(17D)	10146	10623	3410	62
H(17E)	9558	11538	3528	62
H(17F)	9824	11512	3085	62
H(21B)	8905	6584	2322	44
H(21A)	9524	992	98	50
H(22A)	10365	832	579	57
H(22B)	9792	6799	1895	47
H(24B)	9112	3993	1232	47
H(24A)	9313	-1805	1147	53
H(25A)	8454	-1597	706	52
H(25B)	8184	3840	1613	48
H(27A)	10361	-1240	1420	85
H(27B)	10533	200	1358	85
H(27C)	10895	-838	1099	85
H(27D)	10467	6148	1361	85
H(27E)	10051	5656	993	85
H(27F)	10422	4686	1273	85
H(31A)	7208	4134	-298	55
H(31B)	6397	8990	2650	45
H(32B)	5603	10460	2477	58
H(32A)	6520	5799	-142	57
H(34B)	4474	7753	2009	53
H(34A)	5169	3399	287	51

H(35B)	5306	6297	2129	43
H(35A)	5882	1724	187	48
H(37D)	4041	9787	1984	105
H(37E)	4584	10860	1947	105
H(37F)	4242	10588	2362	105
H(37A)	4898	5618	298	77
H(37B)	5198	6311	-78	77
H(37C)	5522	6511	346	77

Table 6S. Crystal data and structure refinement for 3.

Identification code	jia03r
Empirical formula	$C_{56}H_{82}N_6Si_6Zr_2$
Formula weight	1190.26
Temperature	223(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Triclinic
Space group	$P\bar{1}$
Unit cell dimensions	a = 11.6728(2) Å alpha = 75.9066(6)° b = 13.9372(2) Å beta = 76.7090(8)° c = 20.9042(2) Å gamma = 70.3894(9)°
Volume, Z	3066.02(7) $Å^3$, 2
Density (calculated)	1.289 g/cm^3
Absorption coefficient	0.497 mm^{-1}
F(000)	1248
Crystal size	0.35 x 0.20 x 0.05 mm
Crystal color	yellow plate
θ range for data collection	1.88 to 24.00°
Limiting indices	$-12 \le h \le 13$, $-15 \le k \le 15$, $0 \le l \le 23$
Reflections collected	15270
Independent reflections	9401 (R_{int} = 0.0905)
Absorption correction	empirical
Max. and min. transmission	1.0000 and 0.405
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	9401 / 0 / 639
Goodness-of-fit on F^2	1.994
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0883, wR2 = 0.2334
R indices (all data)	R1 = 0.1298, wR2 = 0.3000
Largest diff. peak and hole	1.440 and -1.732 $eÅ^{-3}$

© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 21

Table 7S. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for 3. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Zr(1A)	18711.8(9)	-3957.8(7)	5074.7(4)	29(1)
Zr(1B)	16275.3(9)	-655.7(7)	9515.9(4)	32(1)
Si(1A)	17173(3)	-1598(2)	5186(1)	37(1)
Si(1B)	18516(3)	-106(2)	8478(1)	40(1)
Si(2B)	19062(3)	-2067(2)	9620(2)	43(1)
Si(2A)	16460(3)	-2746(2)	4274(1)	35(1)
Si(3A)	15885(3)	-3342(2)	5834(1)	35(1)
Si(3B)	17771(3)	-2087(2)	8442(1)	43(1)
N(11A)	18455(8)	-2594(7)	5425(4)	39(2)
N(11B)	16909(8)	353(6)	8719(4)	37(2)
N(21B)	17741(8)	-1213(6)	10003(4)	35(2)
N(21A)	18064(8)	-3315(6)	4175(4)	35(2)
N(31A)	17200(8)	-4351(6)	5623(4)	36(2)
N(31B)	16451(9)	-1887(7)	9067(4)	46(2)
C(11A)	19780(11)	-3348(9)	6298(5)	48(3)
C(11B)	15125(11)	1560(9)	8205(5)	47(3)
C(12B)	14417(13)	2548(9)	7984(5)	54(3)
C(12A)	20522(11)	-3255(9)	6668(5)	49(3)
C(13B)	14765(11)	3411(8)	7983(5)	45(3)
C(13A)	20810(12)	-2332(11)	6609(7)	60(4)
C(14A)	20260(12)	-1492(10)	6155(6)	52(3)
C(14B)	15854(12)	3238(10)	8212(5)	51(3)
C(15A)	19490(10)	-1567(8)	5772(5)	42(3)
C(15B)	16595(11)	2233(9)	8455(5)	45(3)
C(16A)	19227(10)	-2504(8)	5828(5)	38(2)
C(16B)	16224(10)	1383(7)	8453(4)	34(2)
C(17B)	13993(13)	4480(9)	7752(6)	62(4)
C(17A)	21640(12)	-2229(12)	7033(7)	69(4)
C(21B)	17958(10)	-1443(8)	11179(5)	39(2)
C(21A)	18463(10)	-3811(9)	3064(5)	44(3)
C(22B)	17792(11)	-1039(9)	11754(5)	46(3)
C(22A)	19201(10)	-3938(9)	2450(5)	43(3)
C(23A)	20243(10)	-3591(8)	2246(5)	39(3)
C(23B)	17249(12)	23(10)	11746(5)	51(3)
C(24A)	20571(9)	-3187(9)	2703(5)	41(3)
C(24B)	16958(11)	610(9)	11162(6)	47(3)
C(25B)	17130(11)	220(8)	10584(5)	44(3)
C(25A)	19829(10)	-3075(9)	3326(5)	43(3)
C(26B)	17635(10)	-847(8)	10601(5)	39(3)
C(26A)	18787(9)	-3385(7)	3516(5)	31(2)
C(27A)	21027(11)	-3719(9)	1580(5)	50(3)
C(27B)	17084(14)	478(10)	12366(6)	66(4)
C(31A)	16997(9)	-6001(8)	6331(4)	31(2)
C(31B)	15523(12)	-2993(10)	8714(6)	58(3)
C(32A)	17168(9)	-7034(7)	6398(5)	37(2)
C(32B)	14733(12)	-3606(11)	8878(7)	66(4)
C(33A)	17701(11)	-7564(9)	5858(6)	48(3)

C(33B)	14047(13)	-3778(10)	9501(7)	66(4)
C(34A)	18023(9)	-6989(8)	5258(5)	38(2)
C(34B)	14219(12)	-3330(10)	9980(6)	57(3)
C(35A)	17842(9)	-5933(8)	5177(5)	35(2)
C(35B)	15019(11)	-2727(8)	9849(6)	47(3)
C(36A)	17350(10)	-5419(8)	5713(5)	38(2)
C(36B)	15662(11)	-2543(9)	9211(5)	46(3)
C(37A)	17849(14)	-8700(9)	5915(7)	66(4)
C(37B)	13166(13)	-4426(11)	9665(9)	81(5)
C(52B)	19371(12)	407(10)	8903(6)	58(3)
C(52A)	17627(12)	-740(9)	4410(6)	57(3)
C(51A)	16378(12)	-759(9)	5835(6)	56(3)
C(51B)	19009(11)	285(10)	7572(6)	58(3)
C(56A)	15913(11)	-3079(8)	6668(5)	46(3)
C(56B)	17342(13)	-1389(11)	7597(5)	64(4)
C(55A)	14427(9)	-3664(9)	5903(6)	44(3)
C(55B)	18518(15)	-3475(10)	8391(7)	77(5)
C(54A)	15628(11)	-3680(10)	4272(6)	53(3)
C(54B)	19081(11)	-3462(9)	9934(6)	53(3)
C(53A)	16009(12)	-1635(9)	3572(5)	52(3)
C(53B)	20499(12)	-1951(11)	9775(6)	59(3)
C(40B)	18863(10)	-1579(8)	8714(5)	39(2)
C(40A)	16070(10)	-2268(8)	5096(5)	36(2)

Table 8. Bond lengths [Å] and angles [°] for 3.

Zr(1A)-N(31A)	2.034(8)	Zr(1A)-N(21A)	2.071(8)
Zr(1A)-N(11A)	2.105(8)	Zr(1A)-H(1)	2.14(7)
Zr(1A)-Si(2A)	3.199(3)	Zr(1A)-Si(1A)	3.212(3)
Zr(1A)-Si(3A)	3.240(3)	Zr(1A)-Zr(1A)#1	3.4243(19)
Zr(1B)-N(21B)	2.023(8)	Zr(1B)-H(1A)	2.05(8)
Zr(1B)-N(11B)	2.071(8)	Zr(1B)-N(31B)	2.081(8)
Zr(1B)-Si(1B)	3.172(3)	Zr(1B)-Si(3B)	3.179(3)
Zr(1B)-Si(2B)	3.212(4)	Zr(1B)-Zr(1B)#2	3.4175(18)
Si(1A)-N(11A)	1.740(10)	Si(1A)-C(52A)	1.852(12)
Si(1A)-C(51A)	1.880(11)	Si(1A)-C(40A)	1.891(10)
Si(1B)-N(11B)	1.760(9)	Si(1B)-C(51B)	1.850(11)
Si(1B)-C(52B)	1.869(12)	Si(1B)-C(40B)	1.913(10)
Si(2B)-N(21B)	1.760(8)	Si(2B)-C(53B)	1.844(12)
Si(2B)-C(54B)	1.889(12)	Si(2B)-C(40B)	1.890(11)
Si(2A)-N(21A)	1.756(9)	Si(2A)-C(54A)	1.868(11)
Si(2A)-C(53A)	1.878(12)	Si(2A)-C(40A)	1.896(10)
Si(3A)-N(31A)	1.752(9)	Si(3A)-C(55A)	1.867(10)
Si(3A)-C(56A)	1.877(10)	Si(3A)-C(40A)	1.899(10)
Si(3B)-N(31B)	1.767(9)	Si(3B)-C(55B)	1.855(13)
Si(3B)-C(56B)	1.887(13)	Si(3B)-C(40B)	1.893(11)
N(11A)-C(16A)	1.419(13)	N(11B)-C(16B)	1.434(13)
N(21B)-C(26B)	1.425(12)	N(21A)-C(26A)	1.448(11)
N(31A)-C(36A)	1.409(12)	N(31B)-C(36B)	1.442(13)
C(11A)-C(12A)	1.340(16)	C(11A)-C(16A)	1.408(16)
C(11B)-C(12B)	1.376(17)	C(11B)-C(16B)	1.416(15)
C(12B)-C(13B)	1.392(15)	C(12A)-C(13A)	1.407(17)
C(13B)-C(14B)	1.386(17)	C(13B)-C(17B)	1.487(17)
C(13A)-C(14A)	1.385(19)	C(13A)-C(17A)	1.515(16)
C(14A)-C(15A)	1.375(16)	C(14B)-C(15B)	1.418(17)
C(15A)-C(16A)	1.412(14)	C(15B)-C(16B)	1.392(13)
C(21B)-C(26B)	1.343(14)	C(21B)-C(22B)	1.395(14)
C(21A)-C(22A)	1.387(14)	C(21A)-C(26A)	1.406(13)
C(22B)-C(23B)	1.400(16)	C(22A)-C(23A)	1.396(14)
C(23A)-C(24A)	1.397(14)	C(23A)-C(27A)	1.495(13)
C(23B)-C(24B)	1.338(16)	C(23B)-C(27B)	1.523(15)
C(24A)-C(25A)	1.400(13)	C(24B)-C(25B)	1.391(14)
C(25B)-C(26B)	1.398(15)	C(25A)-C(26A)	1.368(13)
C(31A)-C(32A)	1.362(13)	C(31A)-C(36A)	1.402(13)
C(31B)-C(32B)	1.393(16)	C(31B)-C(36B)	1.400(14)
C(32A)-C(33A)	1.407(14)	C(32B)-C(33B)	1.376(19)
C(33A)-C(34A)	1.361(15)	C(33A)-C(37A)	1.512(15)
C(33B)-C(34B)	1.383(16)	C(33B)-C(37B)	1.517(16)
C(34A)-C(35A)	1.387(14)	C(34B)-C(35B)	1.396(15)
C(35A)-C(36A)	1.385(13)	C(35B)-C(36B)	1.381(15)

N(31A)-Zr(1A)-N(21A)	98.7(3)	N(31A)-Zr(1A)-N(11A)	99.2(3)
N(21A)-Zr(1A)-N(11A)	99.6(3)	N(31A)-Zr(1A)-H(1)	125.8(19)
N(21A)-Zr(1A)-H(1)	86.1(18)	N(11A)-Zr(1A)-H(1)	133.4(18)
N(31A)-Zr(1A)-Si(2A)	72.5(3)	N(21A)-Zr(1A)-Si(2A)	30.3(2)
N(11A)-Zr(1A)-Si(2A)	88.9(3)	H(1)-Zr(1A)-Si(2A)	113.6(18)
N(31A)-Zr(1A)-Si(1A)	87.0(2)	N(21A)-Zr(1A)-Si(1A)	74.5(2)
N(11A)-Zr(1A)-Si(1A)	29.9(3)	H(1)-Zr(1A)-Si(1A)	144.5(18)
Si(2A)-Zr(1A)-Si(1A)	59.13(7)	N(31A)-Zr(1A)-Si(3A)	28.7(2)
N(21A)-Zr(1A)-Si(3A)	88.5(2)	N(11A)-Zr(1A)-Si(3A)	74.6(2)

H(1)-Zr(1A)-Si(3A)	152.0(18)	Si(2A)-Zr(1A)-Si(3A)	58.26(7)
Si(1A)-Zr(1A)-Si(3A)	58.43(7)	N(31A)-Zr(1A)-Zr(1A)#1	113.3(2)
N(21A)-Zr(1A)-Zr(1A)#1	111.8(2)	N(11A)-Zr(1A)-Zr(1A)#1	129.4(2)
H(1)-Zr(1A)-Zr(1A)#1	26.4(18)	Si(2A)-Zr(1A)-Zr(1A)#1	136.41(6)
Si(1A)-Zr(1A)-Zr(1A)#1	156.47(7)	Si(3A)-Zr(1A)-Zr(1A)#1	141.50(7)
N(21B)-Zr(1B)-H(1A)	93(2)	N(21B)-Zr(1B)-N(11B)	100.0(3)
H(1A)-Zr(1B)-N(11B)	145(2)	N(21B)-Zr(1B)-N(31B)	102.1(4)
H(1A)-Zr(1B)-N(31B)	106(2)	N(11B)-Zr(1B)-N(31B)	101.9(3)
N(21B)-Zr(1B)-Si(1B)	73.9(2)	H(1A)-Zr(1B)-Si(1B)	160(2)
N(11B)-Zr(1B)-Si(1B)	31.1(3)	N(31B)-Zr(1B)-Si(1B)	91.1(2)
N(21B)-Zr(1B)-Si(3B)	89.1(2)	H(1A)-Zr(1B)-Si(3B)	136(2)
N(11B)-Zr(1B)-Si(3B)	76.4(2)	N(31B)-Zr(1B)-Si(3B)	31.2(2)
Si(1B)-Zr(1B)-Si(3B)	60.13(8)	N(21B)-Zr(1B)-Si(2B)	29.5(2)
H(1A)-Zr(1B)-Si(2B)	115(2)	N(11B)-Zr(1B)-Si(2B)	90.1(3)
N(31B)-Zr(1B)-Si(2B)	77.1(3)	Si(1B)-Zr(1B)-Si(2B)	59.14(8)
Si(3B)-Zr(1B)-Si(2B)	59.65(8)	N(21B)-Zr(1B)-Zr(1B)#2	110.8(2)
H(1A)-Zr(1B)-Zr(1B)#2	35(2)	N(11B)-Zr(1B)-Zr(1B)#2	110.8(2)
N(31B)-Zr(1B)-Zr(1B)#2	127.5(3)	Si(1B)-Zr(1B)-Zr(1B)#2	136.21(7)
Si(3B)-Zr(1B)-Zr(1B)#2	156.40(8)	Si(2B)-Zr(1B)-Zr(1B)#2	139.80(7)
N(11A)-Si(1A)-C(52A)	110.4(5)	N(11A)-Si(1A)-C(51A)	112.9(5)
C(52A)-Si(1A)-C(51A)	106.9(6)	N(11A)-Si(1A)-C(40A)	105.1(4)
C(52A)-Si(1A)-C(40A)	113.7(5)	C(51A)-Si(1A)-C(40A)	107.9(5)
N(11A)-Si(1A)-Zr(1A)	37.1(3)	C(52A)-Si(1A)-Zr(1A)	109.0(4)
C(51A)-Si(1A)-Zr(1A)	140.3(4)	C(40A)-Si(1A)-Zr(1A)	72.2(3)
N(11B)-Si(1B)-C(51B)	112.6(5)	N(11B)-Si(1B)-C(52B)	112.2(5)
C(51B)-Si(1B)-C(52B)	105.5(6)	N(11B)-Si(1B)-C(40B)	103.5(4)
C(51B)-Si(1B)-C(40B)	110.6(5)	C(52B)-Si(1B)-C(40B)	112.7(5)
N(11B)-Si(1B)-Zr(1B)	37.4(3)	C(51B)-Si(1B)-Zr(1B)	141.5(4)
C(52B)-Si(1B)-Zr(1B)	109.1(4)	C(40B)-Si(1B)-Zr(1B)	70.7(3)
N(21B)-Si(2B)-C(53B)	112.3(5)	N(21B)-Si(2B)-C(54B)	111.6(5)
C(53B)-Si(2B)-C(54B)	107.2(6)	N(21B)-Si(2B)-C(40B)	100.1(4)
C(53B)-Si(2B)-C(40B)	111.8(5)	C(54B)-Si(2B)-C(40B)	114.0(5)
N(21B)-Si(2B)-Zr(1B)	34.5(3)	C(53B)-Si(2B)-Zr(1B)	138.8(5)
C(54B)-Si(2B)-Zr(1B)	109.0(4)	C(40B)-Si(2B)-Zr(1B)	69.8(3)
N(21A)-Si(2A)-C(54A)	112.1(5)	N(21A)-Si(2A)-C(53A)	111.3(5)
C(54A)-Si(2A)-C(53A)	106.2(6)	N(21A)-Si(2A)-C(40A)	103.9(4)
C(54A)-Si(2A)-C(40A)	112.9(5)	C(53A)-Si(2A)-C(40A)	110.5(5)
N(21A)-Si(2A)-Zr(1A)	36.5(3)	C(54A)-Si(2A)-Zr(1A)	108.2(4)
C(53A)-Si(2A)-Zr(1A)	140.7(4)	C(40A)-Si(2A)-Zr(1A)	72.4(3)
N(31A)-Si(3A)-C(55A)	112.5(4)	N(31A)-Si(3A)-C(56A)	109.3(5)
C(55A)-Si(3A)-C(56A)	107.3(5)	N(31A)-Si(3A)-C(40A)	100.8(4)
C(55A)-Si(3A)-C(40A)	111.8(5)	C(56A)-Si(3A)-C(40A)	115.2(5)
N(31A)-Si(3A)-Zr(1A)	33.9(3)	C(55A)-Si(3A)-Zr(1A)	139.4(3)
C(56A)-Si(3A)-Zr(1A)	106.9(4)	C(40A)-Si(3A)-Zr(1A)	71.4(3)
N(31B)-Si(3B)-C(55B)	112.6(6)	N(31B)-Si(3B)-C(56B)	110.2(5)
C(55B)-Si(3B)-C(56B)	107.5(6)	N(31B)-Si(3B)-C(40B)	104.3(4)
C(55B)-Si(3B)-C(40B)	109.0(6)	C(56B)-Si(3B)-C(40B)	113.3(5)
N(31B)-Si(3B)-Zr(1B)	37.6(3)	C(55B)-Si(3B)-Zr(1B)	140.0(5)
C(56B)-Si(3B)-Zr(1B)	108.8(4)	C(40B)-Si(3B)-Zr(1B)	70.6(3)
C(16A)-N(11A)-Si(1A)	123.5(7)	C(16A)-N(11A)-Zr(1A)	123.6(7)
Si(1A)-N(11A)-Zr(1A)	112.9(4)	C(16B)-N(11B)-Si(1B)	121.0(6)
C(16B)-N(11B)-Zr(1B)	126.6(6)	Si(1B)-N(11B)-Zr(1B)	111.5(5)
C(26B)-N(21B)-Si(2B)	126.2(7)	C(26B)-N(21B)-Zr(1B)	117.7(6)
Si(2B)-N(21B)-Zr(1B)	116.1(4)	C(26A)-N(21A)-Si(2A)	120.6(7)
C(26A)-N(21A)-Zr(1A)	126.0(7)	Si(2A)-N(21A)-Zr(1A)	113.2(4)
C(36A)-N(31A)-Si(3A)	129.5(7)	C(36A)-N(31A)-Zr(1A)	112.6(7)
Si(3A)-N(31A)-Zr(1A)	117.5(4)	C(36B)-N(31B)-Si(3B)	120.5(7)
C(36B)-N(31B)-Zr(1B)	128.3(7)	Si(3B)-N(31B)-Zr(1B)	111.2(4)
C(12A)-C(11A)-C(16A)	121.0(10)	C(12B)-C(11B)-C(16B)	121.3(10)

C(11B)-C(12B)-C(13B)	121.3(12)	C(11A)-C(12A)-C(13A)	122.9(12)
C(14B)-C(13B)-C(12B)	117.4(12)	C(14B)-C(13B)-C(17B)	121.1(11)
C(12B)-C(13B)-C(17B)	121.4(12)	C(14A)-C(13A)-C(12A)	116.6(11)
C(14A)-C(13A)-C(17A)	120.6(12)	C(12A)-C(13A)-C(17A)	122.7(14)
C(15A)-C(14A)-C(13A)	121.5(11)	C(13B)-C(14B)-C(15B)	122.8(10)
C(14A)-C(15A)-C(16A)	121.2(11)	C(16B)-C(15B)-C(14B)	118.6(10)
C(11A)-C(16A)-C(15A)	116.7(10)	C(11A)-C(16A)-N(11A)	121.7(9)
C(15A)-C(16A)-N(11A)	121.6(10)	C(15B)-C(16B)-C(11B)	118.5(10)
C(15B)-C(16B)-N(11B)	120.9(10)	C(11B)-C(16B)-N(11B)	120.5(9)
C(26B)-C(21B)-C(22B)	122.7(10)	C(22A)-C(21A)-C(26A)	120.6(10)
C(21B)-C(22B)-C(23B)	120.0(10)	C(21A)-C(22A)-C(23A)	121.2(9)
C(22A)-C(23A)-C(24A)	117.7(9)	C(22A)-C(23A)-C(27A)	120.9(9)
C(24A)-C(23A)-C(27A)	121.3(10)	C(24B)-C(23B)-C(22B)	116.6(10)
C(24B)-C(23B)-C(27B)	122.6(11)	C(22B)-C(23B)-C(27B)	120.6(11)
C(23A)-C(24A)-C(25A)	120.6(9)	C(23B)-C(24B)-C(25B)	123.9(11)
C(24B)-C(25B)-C(26B)	119.2(10)	C(26A)-C(25A)-C(24A)	121.5(9)
C(21B)-C(26B)-C(25B)	117.5(9)	C(21B)-C(26B)-N(21B)	125.5(10)
C(25B)-C(26B)-N(21B)	117.0(9)	C(25A)-C(26A)-C(21A)	118.2(9)
C(25A)-C(26A)-N(21A)	120.9(8)	C(21A)-C(26A)-N(21A)	120.8(8)
C(32A)-C(31A)-C(36A)	120.8(9)	C(32B)-C(31B)-C(36B)	118.8(11)
C(31A)-C(32A)-C(33A)	122.1(9)	C(33B)-C(32B)-C(31B)	123.7(11)
C(34A)-C(33A)-C(32A)	116.7(10)	C(34A)-C(33A)-C(37A)	120.3(10)
C(32A)-C(33A)-C(37A)	122.9(10)	C(32B)-C(33B)-C(34B)	115.7(11)
C(32B)-C(33B)-C(37B)	122.9(12)	C(34B)-C(33B)-C(37B)	121.4(13)
C(33A)-C(34A)-C(35A)	122.1(10)	C(33B)-C(34B)-C(35B)	123.1(11)
C(36A)-C(35A)-C(34A)	121.1(9)	C(36B)-C(35B)-C(34B)	119.5(10)
C(35A)-C(36A)-C(31A)	117.2(9)	C(35A)-C(36A)-N(31A)	120.1(9)
C(31A)-C(36A)-N(31A)	122.7(9)	C(35B)-C(36B)-C(31B)	119.1(10)
C(35B)-C(36B)-N(31B)	119.7(9)	C(31B)-C(36B)-N(31B)	121.2(10)
Si(2B)-C(40B)-Si(3B)	114.3(5)	Si(2B)-C(40B)-Si(1B)	111.9(5)
Si(3B)-C(40B)-Si(1B)	113.4(6)	Si(1A)-C(40A)-Si(2A)	113.3(5)
Si(1A)-C(40A)-Si(3A)	112.4(5)	Si(2A)-C(40A)-Si(3A)	111.3(5)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+4,-y-1,-z+1 #2 -x+3,-y,-z+2

© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 26

Table 9S. Anisotropic displacement parameters [$Å^2 \times 10^3$] for 3.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \ldots + 2hka^*b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Zr(1A)	43(1)	29(1)	23(1)	-12(1)	2(1)	-19(1)
Zr(1B)	48(1)	33(1)	23(1)	-12(1)	6(1)	-24(1)
Si(1A)	53(2)	31(2)	35(2)	-12(1)	0(1)	-22(1)
Si(1B)	49(2)	42(2)	33(2)	-11(1)	10(1)	-26(1)
Si(2B)	59(2)	40(2)	34(2)	-9(1)	0(1)	-22(2)
Si(2A)	46(2)	37(2)	27(1)	-12(1)	-2(1)	-16(1)
Si(3A)	46(2)	35(2)	29(1)	-13(1)	3(1)	-21(1)
Si(3B)	62(2)	42(2)	32(2)	-22(1)	7(1)	-24(2)
N(11A)	45(5)	57(6)	31(4)	-23(4)	9(4)	-37(5)
N(11B)	54(5)	40(5)	28(4)	-17(4)	7(4)	-29(4)
N(21B)	38(5)	28(4)	33(4)	-8(4)	-5(4)	-1(4)
N(21A)	53(5)	41(5)	25(4)	-16(4)	6(4)	-32(4)
N(31A)	58(6)	32(5)	29(4)	-12(4)	3(4)	-28(4)
N(31B)	69(6)	56(6)	33(5)	-20(4)	9(4)	-46(5)
C(11A)	66(8)	55(7)	42(6)	-35(6)	13(6)	-38(6)
C(11B)	63(8)	57(8)	41(6)	-12(5)	1(5)	-47(6)
C(12B)	94(10)	49(7)	37(6)	-6(5)	-8(6)	-48(7)
C(12A)	56(7)	51(7)	36(6)	-20(5)	-2(5)	-7(6)
C(13B)	69(8)	42(6)	28(5)	-5(5)	10(5)	-36(6)
C(13A)	61(8)	80(10)	61(8)	-49(8)	14(6)	-40(7)
C(14A)	70(8)	55(8)	52(7)	-38(6)	11(6)	-39(7)
C(14B)	78(9)	54(7)	40(6)	-9(5)	-1(6)	-48(7)
C(15A)	58(7)	33(6)	42(6)	-24(5)	2(5)	-19(5)
C(15B)	71(8)	56(7)	29(5)	-10(5)	1(5)	-49(7)
C(16A)	50(6)	38(6)	33(5)	-19(5)	9(5)	-23(5)
C(16B)	58(7)	25(5)	18(5)	-1(4)	3(4)	-19(5)
C(17B)	88(10)	45(7)	57(8)	-18(6)	2(7)	-29(7)
C(17A)	58(8)	89(10)	73(9)	-58(8)	-24(7)	4(7)
C(21B)	46(6)	43(6)	28(5)	-6(5)	3(4)	-21(5)
C(21A)	57(7)	65(8)	29(5)	-22(5)	3(5)	-40(6)
C(22B)	62(7)	59(7)	26(5)	-7(5)	0(5)	-35(6)
C(22A)	61(7)	56(7)	32(6)	-26(5)	-2(5)	-32(6)
C(23A)	61(7)	39(6)	24(5)	-10(4)	3(5)	-27(5)
C(23B)	74(8)	61(8)	34(6)	-17(6)	5(6)	-45(7)
C(24A)	31(5)	66(7)	39(6)	-20(5)	4(4)	-30(5)
C(24B)	56(7)	40(6)	51(7)	-17(5)	-8(6)	-17(5)
C(25B)	58(7)	35(6)	39(6)	-9(5)	-9(5)	-13(5)
C(25A)	62(7)	60(7)	26(5)	-17(5)	5(5)	-44(6)
C(26B)	54(7)	48(6)	28(5)	-11(5)	6(5)	-38(6)
C(26A)	36(5)	35(5)	28(5)	-12(4)	4(4)	-20(4)
C(27A)	70(8)	55(7)	34(6)	-16(5)	5(5)	-33(6)
C(27B)	110(11)	63(8)	47(7)	-16(6)	-24(7)	-44(8)
C(31A)	50(6)	37(6)	15(4)	-4(4)	-7(4)	-23(5)
C(31B)	72(9)	75(9)	52(7)	-33(7)	9(6)	-52(7)
C(32A)	47(6)	28(5)	37(6)	-2(4)	-9(5)	-16(5)
C(32B)	65(8)	83(10)	80(10)	-55(8)	5(7)	-44(8)
C(33A)	70(8)	42(6)	43(6)	-13(5)	2(6)	-36(6)

C(33B)	79(10)	63(9)	85(10)	-37(8)	-1(8)	-48(8)
C(34A)	33(6)	35(6)	51(6)	-22(5)	-6(5)	-5(4)
C(34B)	74(9)	65(8)	46(7)	-7(6)	2(6)	-47(7)
C(35A)	35(5)	35(6)	33(5)	-6(4)	5(4)	-17(4)
C(35B)	72(8)	39(6)	42(6)	-5(5)	-9(6)	-31(6)
C(36A)	57(7)	28(5)	35(6)	-9(4)	-7(5)	-19(5)
C(36B)	64(7)	55(7)	38(6)	-23(5)	5(5)	-42(6)
C(37A)	89(10)	38(7)	78(9)	-19(6)	-7(8)	-28(7)
C(37B)	64(9)	60(9)	132(14)	-37(9)	7(9)	-39(8)
C(52B)	58(8)	63(8)	65(8)	-14(7)	-4(6)	-34(7)
C(52A)	66(8)	41(7)	64(8)	0(6)	-6(6)	-27(6)
C(51A)	75(9)	44(7)	64(8)	-36(6)	4(6)	-30(6)
C(51B)	59(8)	68(8)	43(7)	-17(6)	26(6)	-34(7)
C(56A)	68(8)	37(6)	30(6)	-13(5)	9(5)	-17(6)
C(56B)	79(9)	104(11)	33(6)	-31(7)	11(6)	-56(9)
C(55A)	35(6)	49(7)	54(7)	-22(6)	7(5)	-20(5)
C(55B)	109(12)	54(8)	73(9)	-42(7)	19(8)	-34(8)
C(54A)	63(8)	75(9)	39(6)	-25(6)	-1(5)	-40(7)
C(54B)	56(8)	37(6)	59(8)	-1(6)	-19(6)	-3(5)
C(53A)	67(8)	57(7)	32(6)	-14(5)	-7(5)	-14(6)
C(53B)	62(8)	81(10)	44(7)	-15(6)	-7(6)	-32(7)
C(40B)	54(7)	35(6)	30(5)	-18(4)	10(5)	-19(5)
C(40A)	45(6)	36(6)	34(5)	-16(4)	8(4)	-24(5)

© 2000 American Chemical Society, Organometallics, Jia om991023t Supporting Info Page 28

Table 10S. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for 3.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	19627	-3986	6352	57
H(11B)	14874	992	8191	57
H(12A)	13684	2642	7830	65
H(12B)	20864	-3833	6981	58
H(14A)	20416	-857	6107	63
H(14B)	16112	3811	8207	62
H(15A)	19133	-983	5468	50
H(15B)	17322	2142	8614	54
H(17A)	13273	4449	7611	93
H(17B)	14469	4822	7380	93
H(17C)	13734	4866	8115	93
H(17D)	21719	-1534	6914	104
H(17E)	22448	-2726	6955	104
H(17F)	21287	-2361	7501	104
H(21A)	18309	-2160	11198	46
H(21B)	17738	-4011	3180	52
H(22A)	18045	-1482	12147	55
H(22B)	18998	-4264	2166	52
H(24A)	21297	-2988	2591	49
H(24B)	16617	1329	11142	56
H(25A)	16909	667	10186	52
H(25B)	20053	-2781	3620	52
H(27A)	21706	-3437	1525	76
H(27B)	20535	-3353	1230	76
H(27C)	21348	-4448	1553	76
H(27D)	16695	1220	12272	98
H(27E)	17883	342	12490	98
H(27F)	16570	161	12731	98
H(31A)	16637	-5674	6703	38
H(31B)	15955	-2882	8277	69
H(32A)	16922	-7405	6818	44
H(32B)	14665	-3921	8544	79
H(34A)	18381	-7318	4887	46
H(34B)	13776	-3436	10414	69
H(35A)	18055	-5560	4751	41
H(35B)	15119	-2449	10192	57
H(37A)	18239	-8909	5488	99
H(37B)	17046	-8814	6042	99
H(37C)	18359	-9105	6251	99
H(37D)	13162	-4666	9267	121
H(37E)	12343	-4010	9821	121
H(37F)	13431	-5018	10011	121
H(52A)	20058	576	8588	88
H(52B)	19679	-114	9275	88
H(52C)	18821	1025	9066	88
H(52D)	17166	-25	4440	85
H(52E)	17452	-920	4031	85
H(52F)	18502	-824	4353	85

H(51A)	16021	-54	5617	83
H(51B)	16971	-768	6096	83
H(51C)	15731	-1021	6128	83
H(51D)	19826	365	7496	86
H(51E)	18434	938	7406	86
H(51F)	19025	-242	7338	86
H(56A)	15079	-2891	6912	69
H(56B)	16262	-2515	6603	69
H(56C)	16412	-3696	6921	69
H(56D)	17794	-1819	7265	96
H(56E)	17547	-742	7477	96
H(56F)	16464	-1247	7614	96
H(55A)	13782	-3269	6204	66
H(55B)	14557	-4399	6074	66
H(55C)	14186	-3493	5465	66
H(55D)	18882	-3541	7932	115
H(55E)	17907	-3846	8545	115
H(55F)	19156	-3764	8670	115
H(54A)	14940	-3327	4031	79
H(54B)	15323	-3954	4729	79
H(54C)	16187	-4243	4056	79
H(54D)	19920	-3893	9967	80
H(54E)	18760	-3685	9625	80
H(54F)	18573	-3524	10371	80
H(53A)	15184	-1558	3506	79
H(53B)	16584	-1771	3165	79
H(53C)	16025	-1004	3682	79
H(53D)	21141	-2606	9758	88
H(53E)	20362	-1773	10213	88
H(53F)	20749	-1414	9436	88
H(40A)	19681	-1864	8453	47
H(40B)	15253	-1740	5096	43
H(1)	20240(60)	-4930(50)	4520(30)	0(16)
H(1A)	15030(70)	-780(60)	10380(40)	20(20)