Supplementary Material for :-

Bi- and Tri- Ferrocene Complexes Containing Silylenevinylenephenylene Bridges. Model Compounds for Poly{ferrocene(phenylene)bis(silylenevinylene)}s

Rajsapan Jain, Hojae Choi, Roger A. Lalancette and John B. Sheridan*

Table 1. Crystal Data and Structure Refinement for **3b (Pt)-**major and **4b (Pt)-**major
Table 2. Bond lengths for **3b (Pt).**
Table 3. Bond Angles for **3b (Pt).**
Table 4. Bond lengths for **4b (Pt).**
Table 5. Bond Angles for **4b (Pt).**
Figure 1 ^{1}H NMR spectrum of **3a (Pt)**
Figure 2 ^{1}H NMR spectrum of (major and minor isomers) **3b (Pt)**
Figure 3 ^{1}H NMR spectrum of **3c (Pt)**
Figure 4 ^{1}H NMR spectrum of **4a (Pt)**
Figure 5 ^{1}H NMR spectrum of **4c (Pt)**
Figure 6 ^{1}H NMR spectrum of model compound **4c (Rh)**
Figure 7 ^{29}Si NMR of **3a (Rh).**

Table 1. Crystal Data and Structure Refinement for **3b (Pt)-**major and **4b (Pt)-**major

	3b (Pt)-major	**4b (Pt)-major**
empirical formula	$C_{36}H_{50}FeSi_4$	$C_{40}H_{54}Fe_2Si_4$
formula weight	650.97	758.89
space group	*Pccn*	*P*-1
a (Å)	30.770 (18)	8.609 (2)
b (Å)	9.063 (5)	10.878 (3)
c (Å)	13.514 (10)	11.417 (3)
α (deg)	90.00	84.670 (10)
β (deg)	90.00	81.30 (2)
γ (deg)	90.00	89.85 (2)
V (Å^3)	3769 (4)	1052.2 (5)
Z	4	1
D_{calcd} (Mg/m^3)	1.147	1.198
cryst size	$0.52 \times 0.38 \times 0.14$	$0.60 \times 0.56 \times 0.32$
θ range (deg)	3.00-25.00	3.00-25.00
absorption coeff (mm^{-1})	0.549	0.828
F(000)	1392.0	402.0
Data/params	1891/186	3703/209
goodness of fit	1.08	1.04
R [$I > 2\sigma(I)$]	0.079	0.034
WR_2 (all data)	0.188	0.090

Table 2 Bond lengths for 3b (Pt). (Å)

Fe1—C5i	2.034 (6)
Fe1—C5	2.034 (6)
Fe1—C3i	2.037 (6)
Fe1—C3	2.037 (6)
Fe1—C4	2.043 (6)
Fe1—C4i	2.043 (6)
Fe1—C2i	2.044 (6)
Fe1—C2	2.044 (6)
Fe1—C1i	2.061 (5)
Fe1—C1	2.061 (5)
Si1—C8	1.846 (6)
Si1—C9	1.850 (6)
Si1—C1	1.855 (6)
Si1—C6	1.895 (6)
Si2—C16	1.855 (7)
Si2—C17	1.856 (7)
Si2—C18	1.867 (7)
Si2—C7	1.881 (6)
C1—C5	1.426 (8)
C1—C2	1.443 (7)
C2—C3	1.412 (8)
C3—C4	1.377 (9)
C4—C5	1.439 (8)
C6—C7	1.338 (7)
C6—C10	1.485 (8)
C10—C15	1.376 (8)
C10—C11	1.386 (8)
C11—C12	1.384 (9)
C12—C13	1.380 (9)
C13—C14	1.369 (10)
C14—C15	1.377 (8)

Table 3. Bond Angles for 3b (Pt) (˚)

C5i—Fe1—C5 123.8 (4)
C5i—Fe1—C3i 68.0 (3)
C5—Fe1—C3i 120.8 (2)
C5i—Fe1—C3 120.8 (2)
C5—Fe1—C3 68.0 (3)
C3i—Fe1—C3 163.1 (4)
C5i—Fe1—C4 106.9 (2)
C5—Fe1—C4 41.3 (2)
C3i—Fe1—C4 156.3 (3)
C3—Fe1—C4 39.4 (2)
C5i—Fe1—C4i 41.3 (2)
C5—Fe1—C4i 106.9 (2)
C3i—Fe1—C4i 39.4 (2)
C3—Fe1—C4i 156.3 (3)
C4—Fe1—C4i 121.6 (4)
C5i—Fe1—C2i 68.4 (3)
C5—Fe1—C2i 156.4 (2)
C3i—Fe1—C2i 40.5 (2)
C3—Fe1—C2i 126.1 (3)
C4—Fe1—C2i 161.3 (3)
C4i—Fe1—C2i 67.7 (3)
C5i—Fe1—C2 156.4 (2)
C5—Fe1—C2 68.4 (3)
C3i—Fe1—C2 126.1 (3)
C3—Fe1—C2 40.5 (2)
C4—Fe1—C2 67.7 (3)
C4i—Fe1—C2 161.3 (3)
C2i—Fe1—C2 108.9 (3)
C5i—Fe1—C1i 40.7 (2)
C5—Fe1—C1i 160.7 (2)
C3i—Fe1—C1i 68.7 (2)
C3—Fe1—C1i 107.8 (2)
C4—Fe1—C1i 123.6 (2)
C4i—Fe1—C1i 68.9 (2)
C2i—Fe1—C1i 41.1 (2)
C2—Fe1—C1i 121.5 (2)
C5i—Fe1—C1 160.7 (2)
C5—Fe1—C1 40.7 (2)
C3i—Fe1—C1 107.8 (2)
C3—Fe1—C1 68.7 (2)
C4—Fe1—C1 68.9 (2)
C4i—Fe1—C1 123.6 (2)
C2i—Fe1—C1 121.5 (2)
C2—Fe1—C1 41.1 (2)
C1i—Fe1—C1 157.2 (3)
C8—Si1—C9 112.9 (3)
C8—Si1—C1 108.7 (3)
C9—Si1—C1 110.2 (3)
C8—Si1—C6 110.3 (3)
C9—Si1—C6 105.7 (3)
C1—Si1—C6 109.0 (3)
C16—Si2—C17 109.6 (4)
C16—Si2—C18 109.8 (4)
C17—Si2—C18 108.5 (4)
C16—Si2—C7 113.6 (3)
C17—Si2—C7 109.8 (3)
C18—Si2—C7 105.4 (3)
C5—C1—C2 106.0 (5)
C5—C1—Si1 126.4 (4)
C2—C1—Si1 127.6 (4)
C5—C1—Fe1 68.6 (3)
C2—C1—Fe1 68.8 (3)
Si1—C1—Fe1 126.1 (3)
C3—C2—C1 108.2 (5)
C3—C2—Fe1 69.5 (3)
C1—C2—Fe1 70.1 (3)
C3—C2—H2 125.9 (4)
C1—C2—H2 125.9 (3)
Fe1—C2—H2 125.9 (2)
C4—C3—C2 109.4 (6)
C4—C3—Fe1 70.5 (4)
C2—C3—Fe1 70.0 (3)
C4—C3—H3 125.3 (4)
C2—C3—H3 125.3 (4)
Fe1—C3—H3 125.3 (2)
C3—C4—C5 108.0 (6)
C3—C4—Fe1 70.1 (4)
C5—C4—Fe1 69.0 (3)
C3—C4—H4 126.0 (4)
C5—C4—H4 126.0 (4)
Fe1—C4—H4 126.0 (2)
C1—C5—C4 108.3 (6)
C1—C5—Fe1 70.7 (3)
C4—C5—Fe1 69.7 (3)
C1—C5—H5 125.8 (3)
C4—C5—H5 125.8 (4)
Fe1—C5—H5 125.8 (2)
C7—C6—C10 121.7 (5)
C7—C6—Si1 122.2 (4)
C10—C6—Si1 116.0 (4)
C6—C7—Si2 130.5 (5)

C6—C7—H7 114.8 (4)
Si2—C7—H7 114.8 (2)
Si1—C8—H8A 109.5 (2)
Si1—C8—H8B 109.5 (2)
H8A—C8—H8B 109.5
Si1—C8—H8C 109.5 (2)
H8A—C8—H8C 109.5
H8B—C8—H8C 109.5
Si1—C9—H9A 109.5 (2)
Si1—C9—H9B 109.5 (2)
H9A—C9—H9B 109.5
Si1—C9—H9C 109.5 (2)
H9A—C9—H9C 109.5
H9B—C9—H9C 109.5
C15—C10—C11 118.4 (6)
C15—C10—C6 120.0 (5)
C11—C10—C6 121.5 (6)
C12—C11—C10 120.6 (6)
C12—C11—H11 119.7 (4)
C10—C11—H11 119.7 (4)
C13—C12—C11 120.4 (7)
C13—C12—H12 119.8 (4)
C11—C12—H12 119.8 (4)
C14—C13—C12 118.7 (7)
C14—C13—H13 120.7 (4)
C12—C13—H13 120.7 (4)
C13—C14—C15 121.2 (7)
C13—C14—H14 119.4 (5)
C15—C14—H14 119.4 (4)
C10—C15—C14 120.7 (6)
C10—C15—H15 119.7 (4)
C14—C15—H15 119.7 (4)
Si2—C16—H16A 109.5 (3)
Si2—C16—H16B 109.5 (3)
H16A—C16—H16B 109.5
Si2—C16—H16C 109.5 (2)
H16A—C16—H16C 109.5
H16B—C16—H16C 109.5
Si2—C17—H17A 109.5 (3)
Si2—C17—H17B 109.5 (3)
H17A—C17—H17B 109.5
Si2—C17—H17C 109.5 (3)
H17A—C17—H17C 109.5
H17B—C17—H17C 109.5
Si2—C18—H18A 109.5 (3)
Si2—C18—H18B 109.5 (2)
H18A—C18—H18B 109.5
Si2—C18—H18C 109.5 (2)
H18A—C18—H18C 109.5
H18B—C18—H18C 109.5
C8—Si1—C1—C5 19.8 (6)
C9—Si1—C1—C5 143.9 (5)
C6—Si1—C1—C5 −100.5 (5)
C8—Si1—C1—C2 −158.6 (5)
C9—Si1—C1—C2 −34.4 (6)
C6—Si1—C1—C2 81.1 (5)
C8—Si1—C1—Fe1 −68.9 (4)
C9—Si1—C1—Fe1 55.3 (4)
C6—Si1—C1—Fe1 170.9 (3)
C5i—Fe1—C1—C5 −42.8 (10)
C5—Fe1—C1—C5 0.0
C3i—Fe1—C1—C5 −116.9 (4)
C3—Fe1—C1—C5 80.7 (4)
C4—Fe1—C1—C5 38.2 (4)
C4i—Fe1—C1—C5 −76.4 (4)
C2i—Fe1—C1—C5 −159.1 (3)
C2—Fe1—C1—C5 118.1 (5)
C1i—Fe1—C1—C5 165.9 (3)
C5i—Fe1—C1—C2 −160.8 (7)
C5—Fe1—C1—C2 −118.1 (5)
C3i—Fe1—C1—C2 125.0 (4)
C3—Fe1—C1—C2 −37.4 (3)
C4—Fe1—C1—C2 −79.8 (4)
C4i—Fe1—C1—C2 165.5 (4)
C2i—Fe1—C1—C2 82.8 (5)
C2—Fe1—C1—C2 0.0
C1i—Fe1—C1—C2 47.9 (3)
C5i—Fe1—C1—Si1 77.4 (9)
C5—Fe1—C1—Si1 120.2 (5)
C3i—Fe1—C1—Si1 3.3 (4)
C3—Fe1—C1—Si1 −159.2 (5)
C4—Fe1—C1—Si1 158.4 (5)
C4i—Fe1—C1—Si1 43.7 (5)
C2i—Fe1—C1—Si1 −39.0 (5)
C2—Fe1—C1—Si1 −121.8 (5)
C1i—Fe1—C1—Si1 −73.9 (3)
C5—C1—C2—C3 0.5 (6)
Si1—C1—C2—C3 179.1 (4)
Fe1—C1—C2—C3 59.3 (4)
C5—C1—C2—Fe1 −58.8 (4)
Si1—C1—C2—Fe1 119.9 (5)
Fe1—C1—C2—Fe1 0.0

C5i—Fe1—C2—C3 44.9 (7)
C5—Fe1—C2—C3 −81.1 (4)
C3i—Fe1—C2—C3 165.8 (3)
C3—Fe1—C2—C3 0.0
C4—Fe1—C2—C3 −36.4 (4)
C4i—Fe1—C2—C3 −159.9 (8)
C2i—Fe1—C2—C3 124.0 (4)
C1i—Fe1—C2—C3 80.3 (4)
C1—Fe1—C2—C3 −119.4 (5)
C5i—Fe1—C2—C1 164.3 (6)
C5—Fe1—C2—C1 38.3 (3)
C3i—Fe1—C2—C1 −74.9 (5)
C3—Fe1—C2—C1 119.4 (5)
C4—Fe1—C2—C1 83.0 (4)
C4i—Fe1—C2—C1 −40.6 (10)
C2i—Fe1—C2—C1 −116.7 (4)
C1i—Fe1—C2—C1 −160.3 (3)
C1—Fe1—C2—C1 0.0
C1—C2—C3—C4 0.1 (7)
Fe1—C2—C3—C4 59.7 (4)
C1—C2—C3—Fe1 −59.6 (4)
Fe1—C2—C3—Fe1 0.0
C5i—Fe1—C3—C4 79.0 (4)
C5—Fe1—C3—C4 −38.3 (4)
C3i—Fe1—C3—C4 −163.3 (4)
C4—Fe1—C3—C4 0.0
C4i—Fe1—C3—C4 43.8 (10)
C2i—Fe1—C3—C4 163.5 (4)
C2—Fe1—C3—C4 −120.3 (5)
C1i—Fe1—C3—C4 121.6 (4)
C1—Fe1—C3—C4 −82.3 (4)
C5i—Fe1—C3—C2 −160.7 (3)
C5—Fe1—C3—C2 82.0 (4)
C3i—Fe1—C3—C2 −43.0 (3)
C4—Fe1—C3—C2 120.3 (5)
C4i—Fe1—C3—C2 164.1 (6)
C2i—Fe1—C3—C2 −76.3 (5)
C2—Fe1—C3—C2 0.0
C1i—Fe1—C3—C2 −118.1 (4)
C1—Fe1—C3—C2 38.0 (3)
C2—C3—C4—C5 −0.6 (7)
Fe1—C3—C4—C5 58.7 (4)
C2—C3—C4—Fe1 −59.4 (4)
Fe1—C3—C4—Fe1 0.0
C5i—Fe1—C4—C3 −118.2 (4)
C5—Fe1—C4—C3 119.4 (6)
C3i—Fe1—C4—C3 168.0 (4)
C3—Fe1—C4—C3 0.0
C4i—Fe1—C4—C3 −161.0 (4)
C2i—Fe1—C4—C3 −45.8 (9)
C2—Fe1—C4—C3 37.3 (4)
C1i—Fe1—C4—C3 −76.7 (4)
C1—Fe1—C4—C3 81.7 (4)
C5i—Fe1—C4—C5 122.3 (5)
C5—Fe1—C4—C5 0.0
C3i—Fe1—C4—C5 48.5 (9)
C3—Fe1—C4—C5 −119.4 (6)
C4i—Fe1—C4—C5 79.6 (4)
C2i—Fe1—C4—C5 −165.2 (7)
C2—Fe1—C4—C5 −82.1 (4)
C1i—Fe1—C4—C5 163.9 (4)
C1—Fe1—C4—C5 −37.7 (4)
C2—C1—C5—C4 −0.9 (6)
Si1—C1—C5—C4 −179.5 (4)
Fe1—C1—C5—C4 −59.7 (4)
C2—C1—C5—Fe1 58.9 (4)
Si1—C1—C5—Fe1 −119.8 (4)
Fe1—C1—C5—Fe1 0.0
C3—C4—C5—C1 0.9 (7)
Fe1—C4—C5—C1 60.3 (4)
C3—C4—C5—Fe1 −59.4 (4)
Fe1—C4—C5—Fe1 0.0
C5i—Fe1—C5—C1 164.3 (4)
C3i—Fe1—C5—C1 81.4 (4)
C3—Fe1—C5—C1 −82.4 (4)
C4—Fe1—C5—C1 −119.0 (6)
C4i—Fe1—C5—C1 122.1 (4)
C2i—Fe1—C5—C1 49.2 (7)
C2—Fe1—C5—C1 −38.7 (3)
C1i—Fe1—C5—C1 −163.4 (5)
C1—Fe1—C5—C1 0.0
C5i—Fe1—C5—C4 −76.6 (4)
C3i—Fe1—C5—C4 −159.5 (5)
C3—Fe1—C5—C4 36.6 (4)
C4—Fe1—C5—C4 0.0
C4i—Fe1—C5—C4 −118.8 (5)
C2i—Fe1—C5—C4 168.2 (6)
C2—Fe1—C5—C4 80.4 (4)
C1i—Fe1—C5—C4 −44.4 (10)
C1—Fe1—C5—C4 119.0 (6)
C8—Si1—C6—C7 −0.5 (6)
C9—Si1—C6—C7 −122.8 (5)

C1—Si1—C6—C7 118.8 (5)
C8—Si1—C6—C10 176.5 (4)
C9—Si1—C6—C10 54.2 (5)
C1—Si1—C6—C10 −64.2 (5)
C10—C6—C7—Si2 −0.7 (9)
Si1—C6—C7—Si2 176.1 (3)
C16—Si2—C7—C6 29.7 (7)
C17—Si2—C7—C6 −93.4 (7)
C18—Si2—C7—C6 149.9 (6)
C7—C6—C10—C15 79.6 (8)
Si1—C6—C10—C15 −97.4 (6)
C7—C6—C10—C11 −104.5 (7)
Si1—C6—C10—C11 78.5 (7)
C15—C10—C11—C12 −3.0 (9)
C6—C10—C11—C12 −179.0 (6)
C10—C11—C12—C13 1.2 (10)
C11—C12—C13—C14 1.5 (11)
C12—C13—C14—C15 −2.4 (12)
C11—C10—C15—C14 2.0 (10)
C6—C10—C15—C14 178.1 (6)
C13—C14—C15—C10 0.7 (11)

Table 4. Bond lengths for **4b(Pt)** (Å)

Fe1—C4 2.024 (3)	C13—C15i 1.383 (3)
Fe1—C20 2.027 (3)	C13—C14 1.387 (3)
Fe1—C40 2.032 (3)	C14—C15 1.393 (3)
Fe1—C30 2.034 (3)	C15—C13i 1.383 (3)
Fe1—C10 2.035 (3)	
Fe1—C3 2.038 (3)	
Fe1—C50 2.038 (3)	
Fe1—C2 2.043 (2)	
Fe1—C5 2.045 (3)	
Fe1—C1 2.061 (2)	
Si1—C1 1.852 (2)	
Si1—C9 1.859 (3)	
Si1—C8 1.868 (3)	
Si1—C6 1.886 (2)	
Si2—C10 1.856 (3)	
Si2—C11 1.859 (3)	
Si2—C12 1.871 (3)	
Si2—C7 1.882 (2)	
C1—C2 1.427 (4)	
C1—C5 1.427 (3)	
C2—C3 1.396 (5)	
C3—C4 1.386 (6)	
C4—C5 1.431 (5)	
C10—C50 1.379 (5)	
C10—C20 1.392 (5)	
C20—C30 1.397 (5)	
C30—C40 1.407 (5)	
C40—C50 1.397 (5)	
C6—C7 1.344 (3)	
C6—C13 1.501 (3)	

Table 5. Bond angles for **4b(Pt)** (˚)

C4—Fe1—C20 155.3 (2)	C1—Si1—C9 108.98 (13)
C4—Fe1—C40 107.30 (14)	C1—Si1—C8 109.81 (13)
C20—Fe1—C40 67.42 (13)	C9—Si1—C8 111.2 (2)
C4—Fe1—C30 119.92 (14)	C1—Si1—C6 109.10 (9)
C20—Fe1—C30 40.24 (14)	C9—Si1—C6 107.93 (12)
C40—Fe1—C30 40.50 (15)	C8—Si1—C6 109.79 (11)
C4—Fe1—C10 162.2 (2)	C10—Si2—C11 110.0 (2)
C20—Fe1—C10 40.07 (14)	C10—Si2—C12 109.8 (2)
C40—Fe1—C10 66.87 (13)	C11—Si2—C12 108.6 (2)
C30—Fe1—C10 67.45 (14)	C10—Si2—C7 111.28 (13)
C4—Fe1—C3 39.9 (2)	C11—Si2—C7 111.62 (12)
C20—Fe1—C3 121.2 (2)	C12—Si2—C7 105.36 (15)
C40—Fe1—C3 123.3 (2)	C2—C1—C5 106.0 (2)
C30—Fe1—C3 106.23 (15)	C2—C1—Si1 127.3 (2)
C10—Fe1—C3 157.5 (2)	C5—C1—Si1 126.7 (2)
C4—Fe1—C50 125.2 (2)	C2—C1—Fe1 69.00 (13)
C20—Fe1—C50 67.34 (15)	C5—C1—Fe1 69.04 (13)
C40—Fe1—C50 40.15 (14)	Si1—C1—Fe1 128.12 (11)
C30—Fe1—C50 67.9 (2)	C3—C2—C1 109.6 (3)
C10—Fe1—C50 39.58 (13)	C3—C2—Fe1 69.8 (2)
C3—Fe1—C50 160.2 (2)	C1—C2—Fe1 70.32 (13)
C4—Fe1—C2 67.3 (2)	C3—C2—H2A 125.2 (2)
C20—Fe1—C2 108.77 (14)	C1—C2—H2A 125.2 (2)
C40—Fe1—C2 159.59 (15)	Fe1—C2—H2A 125.20 (10)
C30—Fe1—C2 123.54 (14)	C4—C3—C2 108.2 (3)
C10—Fe1—C2 124.09 (13)	C4—C3—Fe1 69.5 (2)
C3—Fe1—C2 39.99 (14)	C2—C3—Fe1 70.2 (2)
C50—Fe1—C2 158.89 (14)	C4—C3—H3A 125.9 (2)
C4—Fe1—C5 41.17 (14)	C2—C3—H3A 125.9 (2)
C20—Fe1—C5 162.24 (14)	Fe1—C3—H3A 125.91 (11)
C40—Fe1—C5 122.06 (13)	C3—C4—C5 108.6 (3)
C30—Fe1—C5 156.44 (14)	C3—C4—Fe1 70.6 (2)
C10—Fe1—C5 126.23 (15)	C5—C4—Fe1 70.2 (2)
C3—Fe1—C5 68.2 (2)	C3—C4—H4A 125.7 (2)
C50—Fe1—C5 109.19 (14)	C5—C4—H4A 125.7 (2)
C2—Fe1—C5 67.77 (13)	Fe1—C4—H4A 125.67 (10)
C4—Fe1—C1 68.74 (11)	C1—C5—C4 107.6 (3)
C20—Fe1—C1 125.31 (12)	C1—C5—Fe1 70.28 (14)
C40—Fe1—C1 157.90 (14)	C4—C5—Fe1 68.7 (2)
C30—Fe1—C1 160.65 (14)	C1—C5—H5A 126.2 (2)
C10—Fe1—C1 109.90 (11)	C4—C5—H5A 126.2 (2)
C3—Fe1—C1 68.48 (11)	Fe1—C5—H5A 126.19 (9)
C50—Fe1—C1 123.21 (13)	C50—C10—C20 108.9 (3)
C2—Fe1—C1 40.69 (10)	C50—C10—Fe1 70.3 (2)
C5—Fe1—C1 40.68 (10)	C20—C10—Fe1 69.7 (2)
	C50—C10—H10A 125.6 (2)

C20—C10—H10A 125.6 (2)
Fe1—C10—H10A 125.56 (9)
C10—C20—C30 108.2 (3)
C10—C20—Fe1 70.3 (2)
C30—C20—Fe1 70.2 (2)
C10—C20—H20A 125.9 (2)
C30—C20—H20A 125.9 (2)
Fe1—C20—H20A 125.89 (10)
C20—C30—C40 106.9 (3)
C20—C30—Fe1 69.6 (2)
C40—C30—Fe1 69.7 (2)
C20—C30—H30A 126.6 (2)
C40—C30—H30A 126.6 (2)
Fe1—C30—H30A 126.56 (11)
C50—C40—C30 108.4 (3)
C50—C40—Fe1 70.2 (2)
C30—C40—Fe1 69.8 (2)
C50—C40—H40A 125.8 (2)
C30—C40—H40A 125.8 (2)
Fe1—C40—H40A 125.81 (9)
C10—C50—C40 107.6 (3)
C10—C50—Fe1 70.1 (2)
C40—C50—Fe1 69.7 (2)
C10—C50—H50A 126.2 (2)
C40—C50—H50A 126.2 (2)
Fe1—C50—H50A 126.18 (10)
C7—C6—C13 121.3 (2)
C7—C6—Si1 123.3 (2)
C13—C6—Si1 115.40 (14)
C6—C7—Si2 130.3 (2)
C6—C7—H7A 114.86 (12)
Si2—C7—H7A 114.86 (7)
Si1—C8—H8A 109.47 (11)
Si1—C8—H8B 109.47 (9)
H8A—C8—H8B 109.5
Si1—C8—H8C 109.47 (12)
H8A—C8—H8C 109.5
H8B—C8—H8C 109.5
Si1—C9—H9A 109.47 (10)
Si1—C9—H9B 109.47 (11)
H9A—C9—H9B 109.5
Si1—C9—H9C 109.47 (9)
H9A—C9—H9C 109.5
H9B—C9—H9C 109.5
Si2—C10—H10A 109.47 (14)
Si2—C10—H10B 109.47 (14)
H10A—C10—H10B 109.5
Si2—C10—H10C 109.47 (11)
H10A—C10—H10C 109.5
H10B—C10—H10C 109.5
Si2—C11—H11A 109.47 (12)
Si2—C11—H11B 109.47 (10)
H11A—C11—H11B 109.5
Si2—C11—H11C 109.47 (12)
H11A—C11—H11C 109.5
H11B—C11—H11C 109.5
Si2—C12—H12A 109.47 (14)
Si2—C12—H12B 109.47 (14)
H12A—C12—H12B 109.5
Si2—C12—H12C 109.47 (13)
H12A—C12—H12C 109.5
H12B—C12—H12C 109.5
C15i—C13—C14 118.1 (2)
C15i—C13—C6 120.7 (2)
C14—C13—C6 121.2 (2)
C13—C14—C15 121.0 (2)
C13—C14—H14 119.50 (12)
C15—C14—H14 119.50 (13)
C13i—C15—C14 120.9 (2)
C13i—C15—H15 119.55 (12)
C14—C15—H15 119.55 (13)
C9—Si1—C1—C2 −29.4 (2)
C8—Si1—C1—C2 −151.4 (2)
C6—Si1—C1—C2 88.3 (2)
C9—Si1—C1—C5 153.1 (2)
C8—Si1—C1—C5 31.1 (2)
C6—Si1—C1—C5 −89.3 (2)
C9—Si1—C1—Fe1 62.1 (2)
C8—Si1—C1—Fe1 −59.9 (2)
C6—Si1—C1—Fe1 179.71 (13)
C4—Fe1—C1—C2 −79.4 (2)
C20—Fe1—C1—C2 77.4 (2)
C40—Fe1—C1—C2 −163.1 (3)
C30—Fe1—C1—C2 41.1 (4)
C10—Fe1—C1—C2 119.5 (2)
C3—Fe1—C1—C2 −36.4 (2)
C50—Fe1—C1—C2 161.6 (2)
C2—Fe1—C1—C2 0.0
C5—Fe1—C1—C2 −117.6 (2)
C4—Fe1—C1—C5 38.1 (2)
C20—Fe1—C1—C5 −165.1 (2)
C40—Fe1—C1—C5 −45.5 (4)

C30—Fe1—C1—C5 158.6 (4)
C10—Fe1—C1—C5 −122.9 (2)
C3—Fe1—C1—C5 81.1 (2)
C50—Fe1—C1—C5 −80.9 (2)
C2—Fe1—C1—C5 117.6 (2)
C5—Fe1—C1—C5 0.0
C4—Fe1—C1—Si1 159.0 (2)
C20—Fe1—C1—Si1 −44.3 (2)
C40—Fe1—C1—Si1 75.3 (4)
C30—Fe1—C1—Si1 −80.5 (4)
C10—Fe1—C1—Si1 −2.1 (2)
C3—Fe1—C1—Si1 −158.1 (2)
C50—Fe1—C1—Si1 40.0 (2)
C2—Fe1—C1—Si1 −121.6 (2)
C5—Fe1—C1—Si1 120.8 (2)
C5—C1—C2—C3 −0.6 (3)
Si1—C1—C2—C3 −178.5 (2)
Fe1—C1—C2—C3 58.9 (2)
C5—C1—C2—Fe1 −59.4 (2)
Si1—C1—C2—Fe1 122.6 (2)
Fe1—C1—C2—Fe1 0.0
C4—Fe1—C2—C3 −37.4 (2)
C20—Fe1—C2—C3 116.5 (3)
C40—Fe1—C2—C3 41.0 (5)
C30—Fe1—C2—C3 74.4 (3)
C10—Fe1—C2—C3 158.3 (3)
C3—Fe1—C2—C3 0.0
C50—Fe1—C2—C3 −167.9 (4)
C5—Fe1—C2—C3 −82.1 (3)
C1—Fe1—C2—C3 −120.7 (3)
C4—Fe1—C2—C1 83.4 (2)
C20—Fe1—C2—C1 −122.8 (2)
C40—Fe1—C2—C1 161.7 (3)
C30—Fe1—C2—C1 −164.9 (2)
C10—Fe1—C2—C1 −81.0 (2)
C3—Fe1—C2—C1 120.7 (3)
C50—Fe1—C2—C1 −47.2 (4)
C5—Fe1—C2—C1 38.6 (2)
C1—Fe1—C2—C1 0.0
C1—C2—C3—C4 0.2 (3)
Fe1—C2—C3—C4 59.4 (2)
C1—C2—C3—Fe1 −59.2 (2)
Fe1—C2—C3—Fe1 0.0
C4—Fe1—C3—C4 0.000 (2)
C20—Fe1—C3—C4 158.6 (2)
C40—Fe1—C3—C4 76.7 (2)
C30—Fe1—C3—C4 117.5 (2)
C10—Fe1—C3—C4 −172.4 (3)
C50—Fe1—C3—C4 47.9 (5)
C2—Fe1—C3—C4 −119.2 (3)
C5—Fe1—C3—C4 −38.2 (2)
C1—Fe1—C3—C4 −82.2 (2)
C4—Fe1—C3—C2 119.2 (3)
C20—Fe1—C3—C2 −82.1 (2)
C40—Fe1—C3—C2 −164.1 (2)
C30—Fe1—C3—C2 −123.3 (2)
C10—Fe1—C3—C2 −53.2 (4)
C50—Fe1—C3—C2 167.1 (4)
C2—Fe1—C3—C2 0.0
C5—Fe1—C3—C2 81.0 (2)
C1—Fe1—C3—C2 37.0 (2)
C2—C3—C4—C5 0.3 (4)
Fe1—C3—C4—C5 60.1 (2)
C2—C3—C4—Fe1 −59.8 (2)
Fe1—C3—C4—Fe1 0.0
C20—Fe1—C4—C3 −48.2 (4)
C40—Fe1—C4—C3 −121.6 (2)
C30—Fe1—C4—C3 −79.3 (2)
C10—Fe1—C4—C3 170.5 (3)
C3—Fe1—C4—C3 0.000 (1)
C50—Fe1—C4—C3 −162.1 (2)
C2—Fe1—C4—C3 37.5 (2)
C5—Fe1—C4—C3 119.2 (3)
C1—Fe1—C4—C3 81.5 (2)
C20—Fe1—C4—C5 −167.4 (3)
C40—Fe1—C4—C5 119.2 (2)
C30—Fe1—C4—C5 161.5 (2)
C10—Fe1—C4—C5 51.3 (5)
C3—Fe1—C4—C5 −119.2 (3)
C50—Fe1—C4—C5 78.7 (2)
C2—Fe1—C4—C5 −81.7 (2)
C5—Fe1—C4—C5 0.0
C1—Fe1—C4—C5 −37.7 (2)
C2—C1—C5—C4 0.7 (3)
Si1—C1—C5—C4 178.7 (2)
Fe1—C1—C5—C4 −58.7 (2)
C2—C1—C5—Fe1 59.4 (2)
Si1—C1—C5—Fe1 −122.6 (2)
Fe1—C1—C5—Fe1 0.0
C3—C4—C5—C1 −0.6 (3)
Fe1—C4—C5—C1 59.7 (2)
C3—C4—C5—Fe1 −60.3 (2)

Fe1—C4—C5—Fe1 0.0
C4—Fe1—C5—C1 −119.0 (3)
C20—Fe1—C5—C1 43.5 (5)
C40—Fe1—C5—C1 161.5 (2)
C30—Fe1—C5—C1 −162.4 (3)
C10—Fe1—C5—C1 78.2 (2)
C3—Fe1—C5—C1 −81.9 (2)
C50—Fe1—C5—C1 119.0 (2)
C2—Fe1—C5—C1 −38.64 (15)
C1—Fe1—C5—C1 0.0
C4—Fe1—C5—C4 0.0
C20—Fe1—C5—C4 162.5 (4)
C40—Fe1—C5—C4 −79.4 (3)
C30—Fe1—C5—C4 −43.4 (5)
C10—Fe1—C5—C4 −162.8 (2)
C3—Fe1—C5—C4 37.1 (2)
C50—Fe1—C5—C4 −122.0 (3)
C2—Fe1—C5—C4 80.4 (3)
C1—Fe1—C5—C4 119.0 (3)
C4—Fe1—C10—C50 36.1 (5)
C20—Fe1—C10—C50 −119.9 (3)
C40—Fe1—C10—C50 −38.0 (2)
C30—Fe1—C10—C50 −82.1 (2)
C3—Fe1—C10—C50 −159.9 (3)
C50—Fe1—C10—C50 0.000 (1)
C2—Fe1—C10—C50 161.7 (2)
C5—Fe1—C10—C50 75.7 (2)
C1—Fe1—C10—C50 118.4 (2)
C4—Fe1—C10—C20 156.1 (4)
C20—Fe1—C10—C20 0.000 (1)
C40—Fe1—C10—C20 81.9 (2)
C30—Fe1—C10—C20 37.8 (2)
C3—Fe1—C10—C20 −40.0 (4)
C50—Fe1—C10—C20 119.9 (3)
C2—Fe1—C10—C20 −78.4 (2)
C5—Fe1—C10—C20 −164.4 (2)
C1—Fe1—C10—C20 −121.6 (2)
C50—C10—C20—C30 −0.5 (3)
Fe1—C10—C20—C30 −60.1 (2)
C50—C10—C20—Fe1 59.6 (2)
Fe1—C10—C20—Fe1 0.0
C4—Fe1—C20—C10 −162.7 (3)
C40—Fe1—C20—C10 −80.4 (2)
C30—Fe1—C20—C10 −118.9 (3)
C10—Fe1—C20—C10 0.000 (1)
C3—Fe1—C20—C10 163.3 (2)
C50—Fe1—C20—C10 −36.8 (2)
C2—Fe1—C20—C10 121.0 (2)
C5—Fe1—C20—C10 45.4 (5)
C1—Fe1—C20—C10 78.8 (2)
C4—Fe1—C20—C30 −43.9 (5)
C40—Fe1—C20—C30 38.4 (2)
C30—Fe1—C20—C30 0.0
C10—Fe1—C20—C30 118.9 (3)
C3—Fe1—C20—C30 −77.9 (3)
C50—Fe1—C20—C30 82.1 (2)
C2—Fe1—C20—C30 −120.1 (2)
C5—Fe1—C20—C30 164.3 (4)
C1—Fe1—C20—C30 −162.3 (2)
C10—C20—C30—C40 0.2 (3)
Fe1—C20—C30—C40 −60.0 (2)
C10—C20—C30—Fe1 60.2 (2)
Fe1—C20—C30—Fe1 0.0
C4—Fe1—C30—C20 160.5 (3)
C20—Fe1—C30—C20 0.0
C40—Fe1—C30—C20 −117.9 (3)
C10—Fe1—C30—C20 −37.6 (2)
C3—Fe1—C30—C20 119.4 (3)
C50—Fe1—C30—C20 −80.6 (3)
C2—Fe1—C30—C20 79.3 (3)
C5—Fe1—C30—C20 −168.1 (3)
C1—Fe1—C30—C20 48.4 (5)
C4—Fe1—C30—C40 −81.6 (3)
C20—Fe1—C30—C40 117.9 (3)
C40—Fe1—C30—C40 0.0
C10—Fe1—C30—C40 80.3 (2)
C3—Fe1—C30—C40 −122.6 (3)
C50—Fe1—C30—C40 37.4 (2)
C2—Fe1—C30—C40 −162.8 (2)
C5—Fe1—C30—C40 −50.2 (4)
C1—Fe1—C30—C40 166.3 (3)
C20—C30—C40—C50 0.2 (3)
Fe1—C30—C40—C50 −59.8 (2)
C20—C30—C40—Fe1 59.9 (2)
Fe1—C30—C40—Fe1 0.0
C4—Fe1—C40—C50 −124.6 (2)
C20—Fe1—C40—C50 81.1 (2)
C30—Fe1—C40—C50 119.3 (3)
C10—Fe1—C40—C50 37.5 (2)
C3—Fe1—C40—C50 −165.4 (2)
C50—Fe1—C40—C50 0.0
C2—Fe1—C40—C50 164.3 (3)

C5—Fe1—C40—C50 −81.9 (2)
C1—Fe1—C40—C50 −48.6 (4)
C4—Fe1—C40—C30 116.1 (3)
C20—Fe1—C40—C30 −38.2 (2)
C30—Fe1—C40—C30 0.0
C10—Fe1—C40—C30 −81.8 (2)
C3—Fe1—C40—C30 75.3 (3)
C50—Fe1—C40—C30 −119.3 (3)
C2—Fe1—C40—C30 45.0 (5)
C5—Fe1—C40—C30 158.8 (2)
C1—Fe1—C40—C30 −167.9 (3)
C20—C10—C50—C40 0.6 (3)
Fe1—C10—C50—C40 59.8 (2)
C20—C10—C50—Fe1 −59.2 (2)
Fe1—C10—C50—Fe1 0.0
C30—C40—C50—C10 −0.5 (3)
Fe1—C40—C50—C10 −60.1 (2)
C30—C40—C50—Fe1 59.6 (2)
Fe1—C40—C50—Fe1 0.0
C4—Fe1—C50—C10 −167.3 (2)
C20—Fe1—C50—C10 37.2 (2)
C40—Fe1—C50—C10 118.5 (3)
C30—Fe1—C50—C10 80.9 (2)
C10—Fe1—C50—C10 0.0
C3—Fe1—C50—C10 157.1 (4)
C2—Fe1—C50—C10 −46.3 (5)
C5—Fe1—C50—C10 −124.1 (2)
C1—Fe1—C50—C10 −81.2 (2)
C4—Fe1—C50—C40 74.2 (3)
C20—Fe1—C50—C40 −81.3 (2)
C40—Fe1—C50—C40 0.0
C30—Fe1—C50—C40 −37.7 (2)
C10—Fe1—C50—C40 −118.5 (3)
C3—Fe1—C50—C40 38.6 (6)
C2—Fe1—C50—C40 −164.9 (3)
C5—Fe1—C50—C40 117.3 (2)
C1—Fe1—C50—C40 160.3 (2)
C1—Si1—C6—C7 127.2 (2)
C9—Si1—C6—C7 −114.5 (2)
C8—Si1—C6—C7 6.8 (2)
C1—Si1—C6—C13 −55.1 (2)
C9—Si1—C6—C13 63.2 (2)
C8—Si1—C6—C13 −175.4 (2)
C13—C6—C7—Si2 0.0 (3)
Si1—C6—C7—Si2 177.58 (12)
C10—Si2—C7—C6 52.5 (3)
C11—Si2—C7—C6 −70.8 (3)
C12—Si2—C7—C6 171.4 (2)
C7—C6—C13—C15i −101.3 (3)
Si1—C6—C13—C15i 80.9 (2)
C7—C6—C13—C14 80.4 (3)
Si1—C6—C13—C14 −97.4 (2)
C15i—C13—C14—C15 1.3 (4)
C6—C13—C14—C15 179.7 (2)
C13—C14—C15—C13i −1.3 (4)

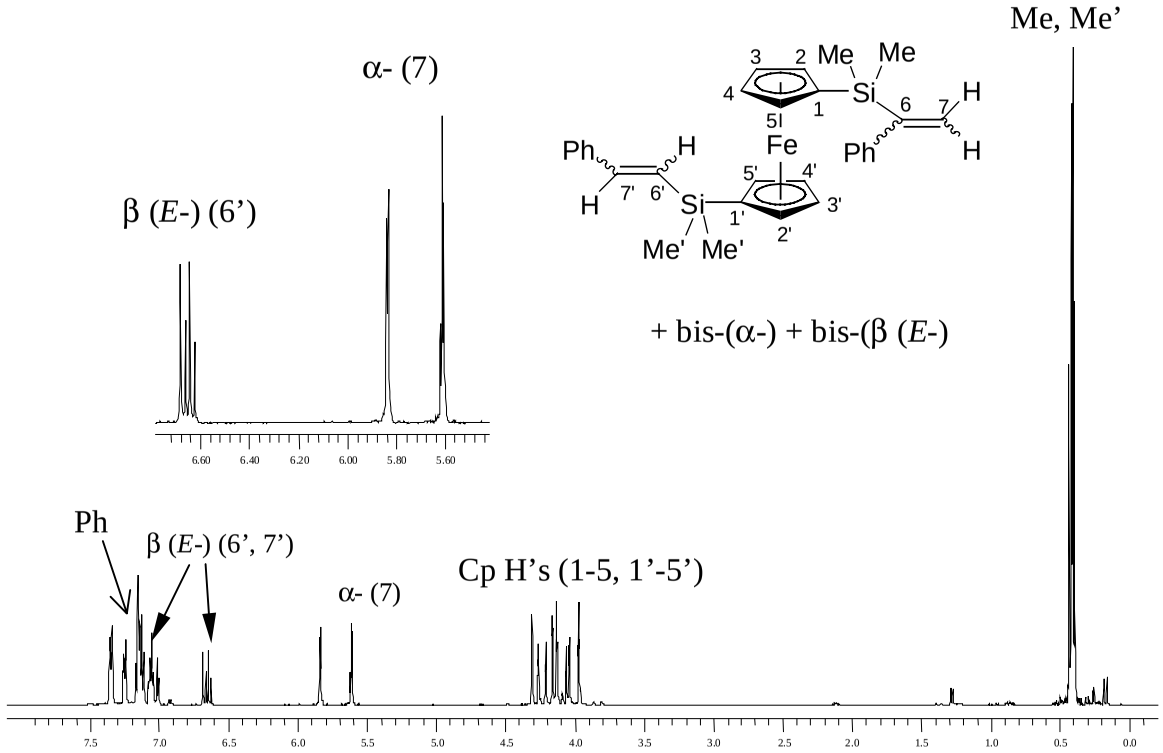

Figure 1 ^{1}H NMR spectrum of **3a (Pt)**

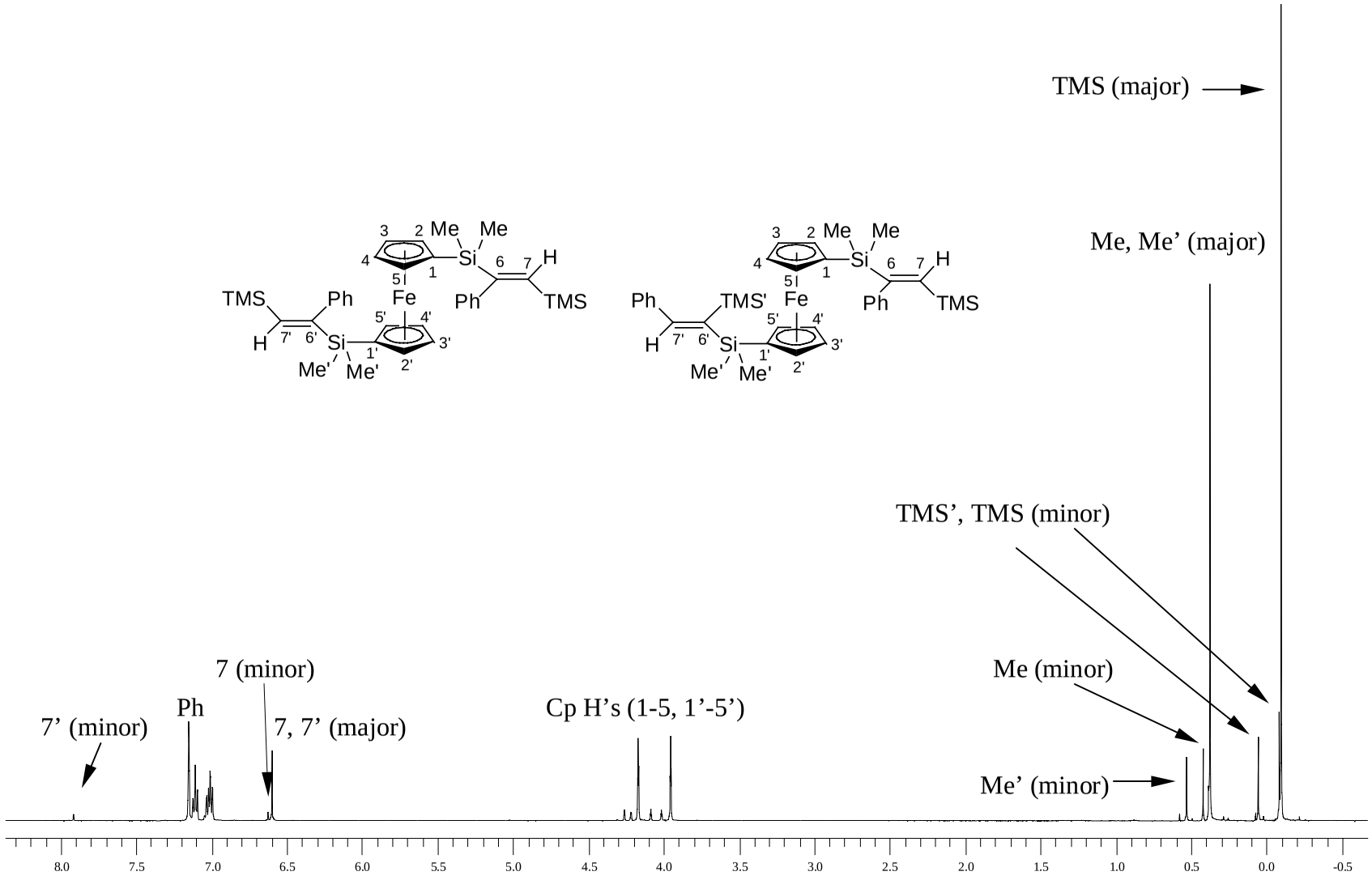

Figure 2 ^{1}H NMR spectrum of (major and minor isomers) **3b (Pt)**

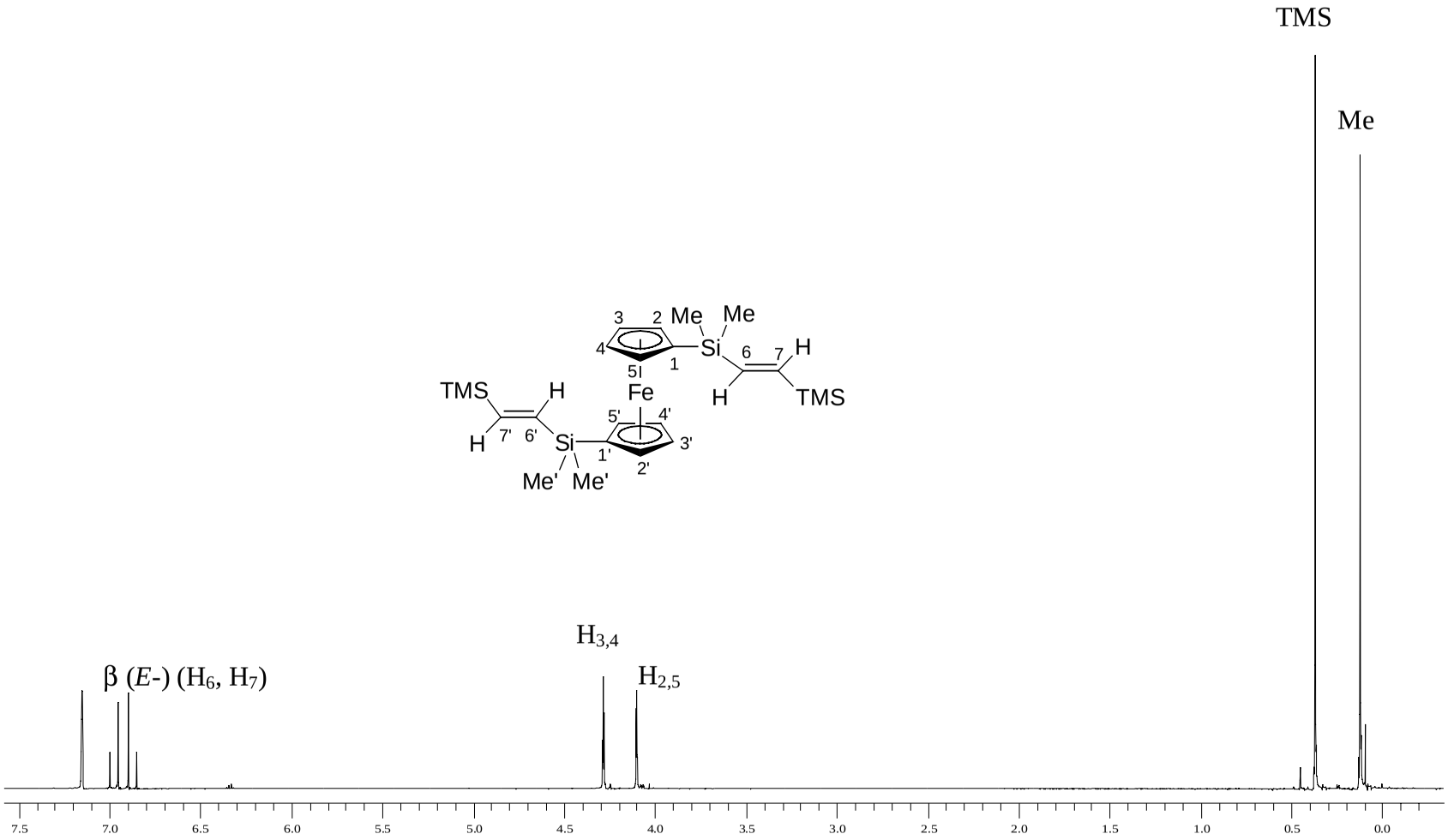

Figure 3 ^{1}H NMR spectrum of **3c (Pt)**

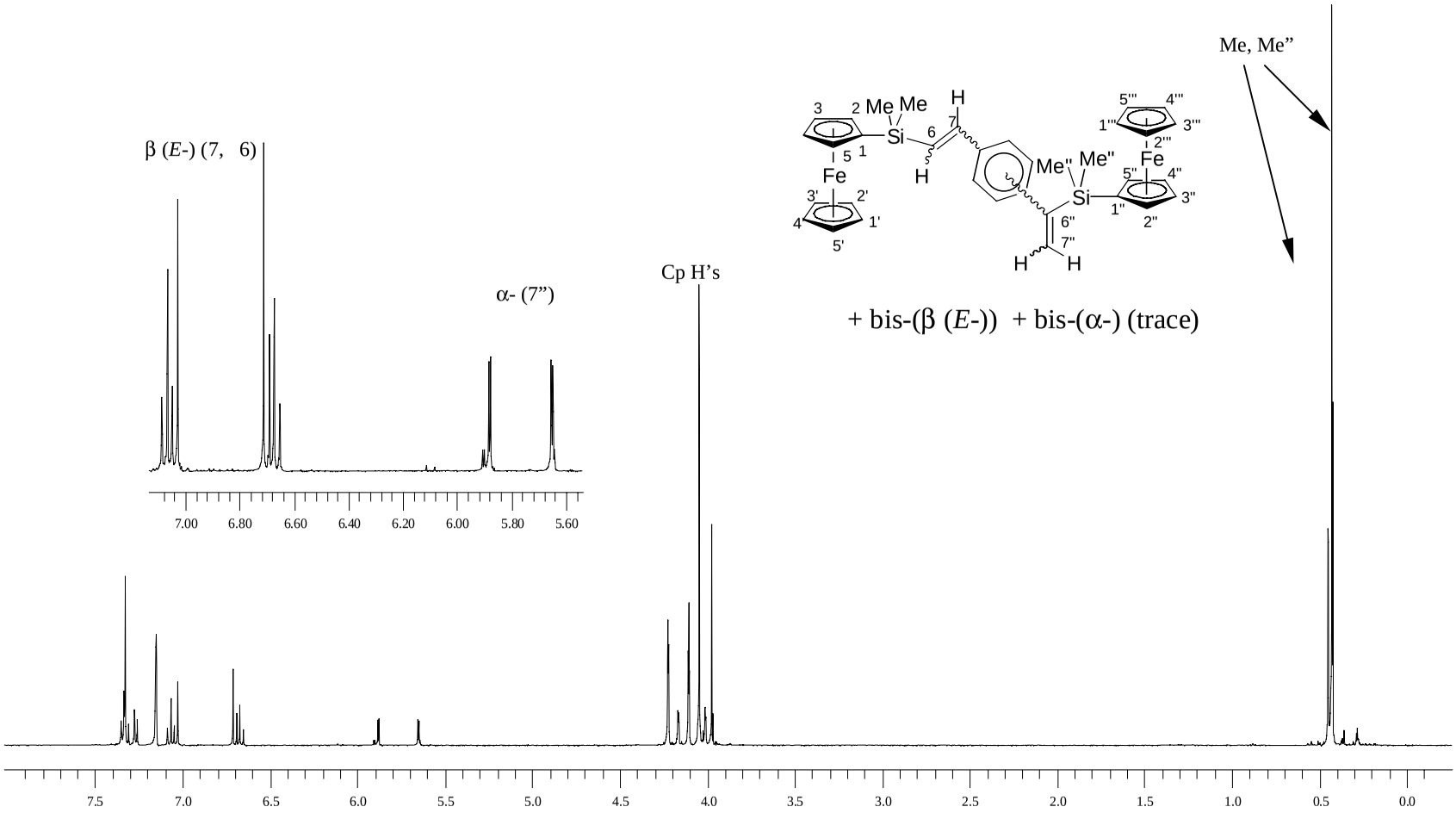

Figure 4 ^{1}H NMR spectrum of **4a (Pt)**

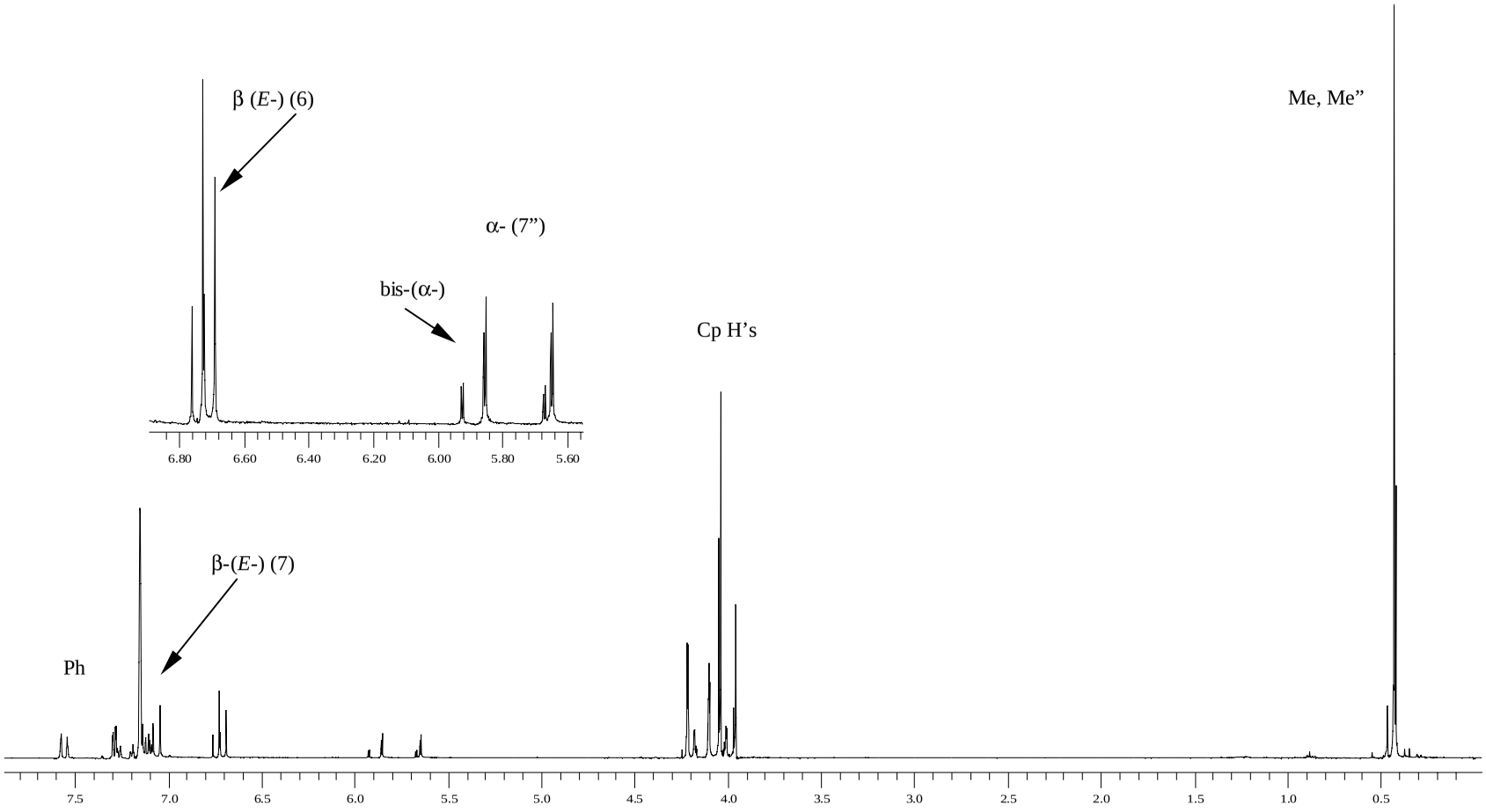

Figure 5 ^{1}H NMR spectrum of **4c (Pt)**

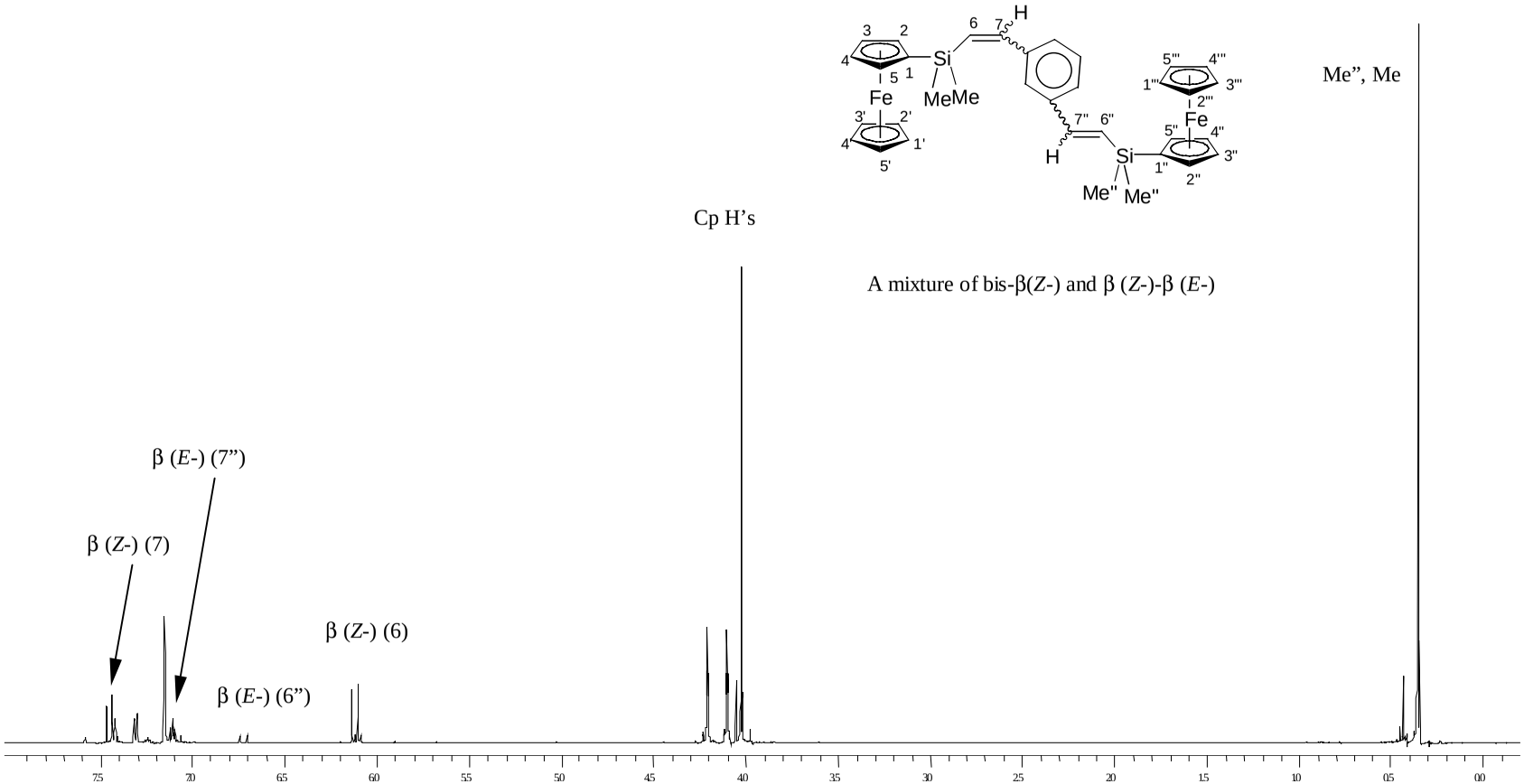

Figure 6 ^{1}H NMR spectrum of model compound **4c (Rh)**

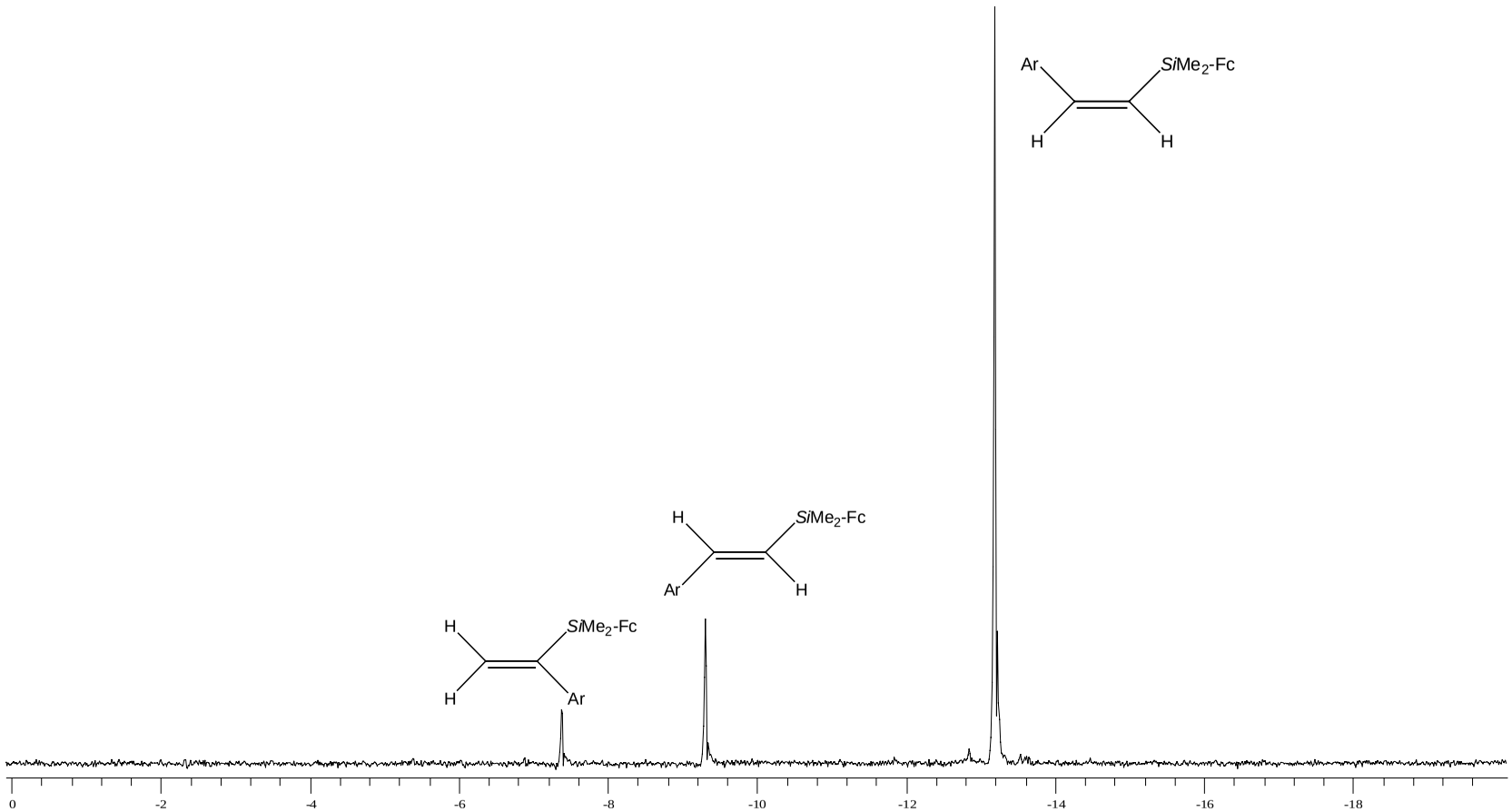

Figure 7 ^{29}Si NMR of **3a (Rh).**