

Anhang

Angaben zu den Einkristallröntgenstrukturanalysen

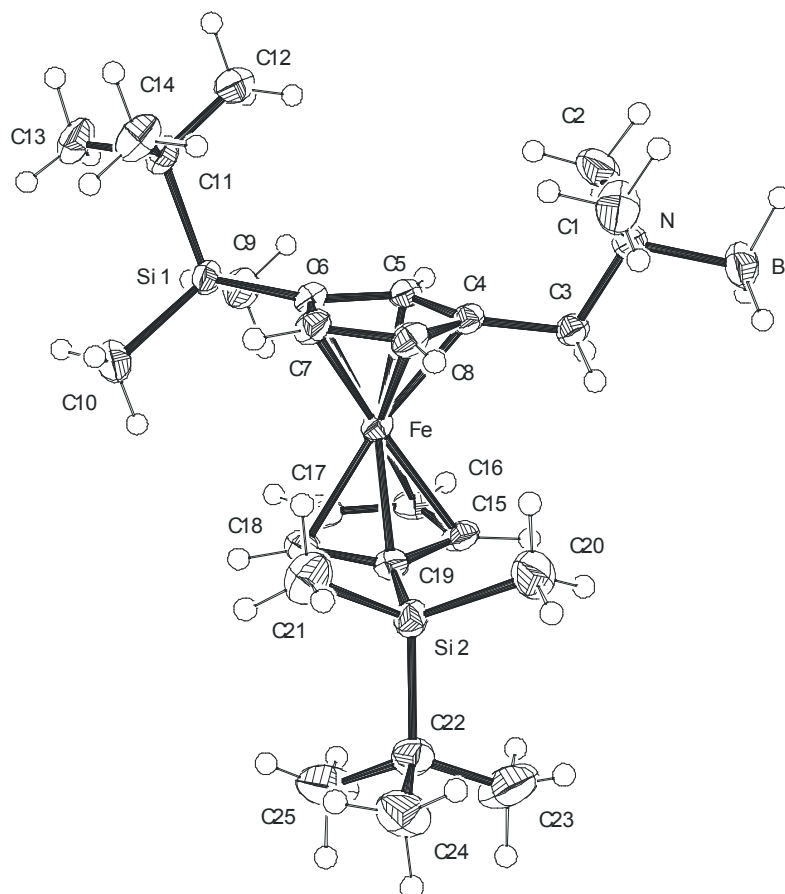
3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82)

Abbildung: Molekülstruktur von 3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_i Tensors.

	x	y	z	U(eq)
B	2234(3)	5965(2)	735(2)	36(1)
C(1)	1200(3)	4305(2)	1823(2)	51(1)
C(2)	2498(3)	3862(2)	474(2)	55(1)
C(3)	4242(2)	3933(2)	1505(1)	23(1)
C(4)	4703(2)	2560(2)	1895(1)	22(1)
C(5)	5599(2)	1599(2)	1468(1)	22(1)
C(6)	5922(2)	413(2)	2067(1)	24(1)
C(7)	5198(2)	669(2)	2872(1)	27(1)

Anhang

C(8)	4449(2)	1972(2)	2767(1)	26(1)
C(9)	8458(2)	-905(2)	843(1)	34(1)
C(10)	8438(3)	-2095(2)	2758(1)	43(1)
C(11)	5519(2)	-1953(2)	1772(1)	29(1)
C(12)	4484(3)	-1230(2)	1004(2)	44(1)
C(13)	6471(3)	-3272(2)	1665(1)	41(1)
C(14)	4310(3)	-2047(2)	2571(1)	42(1)
C(15)	8126(2)	2916(2)	2311(1)	27(1)
C(16)	8997(2)	2158(2)	1743(1)	33(1)
C(17)	9557(2)	916(2)	2232(1)	35(1)
C(18)	9020(2)	909(2)	3094(1)	30(1)
C(19)	8118(2)	2160(2)	3161(1)	26(1)
C(20)	5381(3)	4119(2)	3913(2)	45(1)
C(21)	6397(3)	1427(2)	4919(1)	43(1)
C(22)	8896(3)	2998(2)	4615(1)	32(1)
C(23)	9198(4)	4220(3)	4091(2)	66(1)
C(24)	8370(3)	3101(2)	5533(1)	46(1)
C(25)	10536(3)	1928(2)	4610(2)	53(1)
Fe	6968(1)	1602(1)	2382(1)	21(1)
N	2546(2)	4480(1)	1140(1)	28(1)
Si(1)	7107(1)	-1140(1)	1855(1)	26(1)
Si(2)	7192(1)	2668(1)	4152(1)	26(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung Verbindung 3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
B	30(1)	25(1)	45(1)	-4(1)	-3(1)	0(1)
C(1)	22(1)	38(1)	83(2)	-6(1)	10(1)	-9(1)
C(2)	52(1)	43(1)	75(2)	-32(1)	-40(1)	10(1)
C(3)	20(1)	22(1)	30(1)	-9(1)	-1(1)	-6(1)
C(4)	19(1)	23(1)	27(1)	-8(1)	0(1)	-9(1)
C(5)	22(1)	22(1)	24(1)	-8(1)	-2(1)	-8(1)
C(6)	26(1)	22(1)	28(1)	-7(1)	-4(1)	-11(1)
C(7)	31(1)	26(1)	27(1)	-5(1)	1(1)	-16(1)
C(8)	24(1)	27(1)	29(1)	-10(1)	3(1)	-12(1)

Anhang

C(9)	36(1)	29(1)	38(1)	-12(1)	1(1)	-7(1)
C(10)	55(1)	27(1)	46(1)	-4(1)	-22(1)	-5(1)
C(11)	42(1)	21(1)	28(1)	-6(1)	-3(1)	-13(1)
C(12)	54(1)	38(1)	47(1)	-2(1)	-19(1)	-24(1)
C(13)	60(1)	25(1)	45(1)	-14(1)	-2(1)	-16(1)
C(14)	52(1)	38(1)	43(1)	-12(1)	7(1)	-24(1)
C(15)	27(1)	29(1)	31(1)	-7(1)	-2(1)	-16(1)
C(16)	26(1)	49(1)	32(1)	-15(1)	4(1)	-21(1)
C(17)	23(1)	45(1)	42(1)	-24(1)	-3(1)	-5(1)
C(18)	29(1)	28(1)	35(1)	-11(1)	-10(1)	-2(1)
C(19)	26(1)	24(1)	28(1)	-8(1)	-6(1)	-7(1)
C(20)	46(1)	36(1)	50(1)	-21(1)	-12(1)	4(1)
C(21)	53(1)	40(1)	37(1)	-10(1)	6(1)	-19(1)
C(22)	40(1)	35(1)	26(1)	-10(1)	-4(1)	-12(1)
C(23)	105(2)	69(2)	47(2)	-5(1)	-15(1)	-61(2)
C(24)	48(1)	57(1)	33(1)	-22(1)	-8(1)	-5(1)
C(25)	34(1)	77(2)	54(2)	-37(1)	-6(1)	-7(1)
Fe	23(1)	20(1)	23(1)	-8(1)	-1(1)	-8(1)
N	21(1)	25(1)	40(1)	-12(1)	-3(1)	-4(1)
Si(1)	33(1)	17(1)	27(1)	-5(1)	-6(1)	-6(1)
Si(2)	31(1)	22(1)	26(1)	-8(1)	-3(1)	-5(1)

Anhang

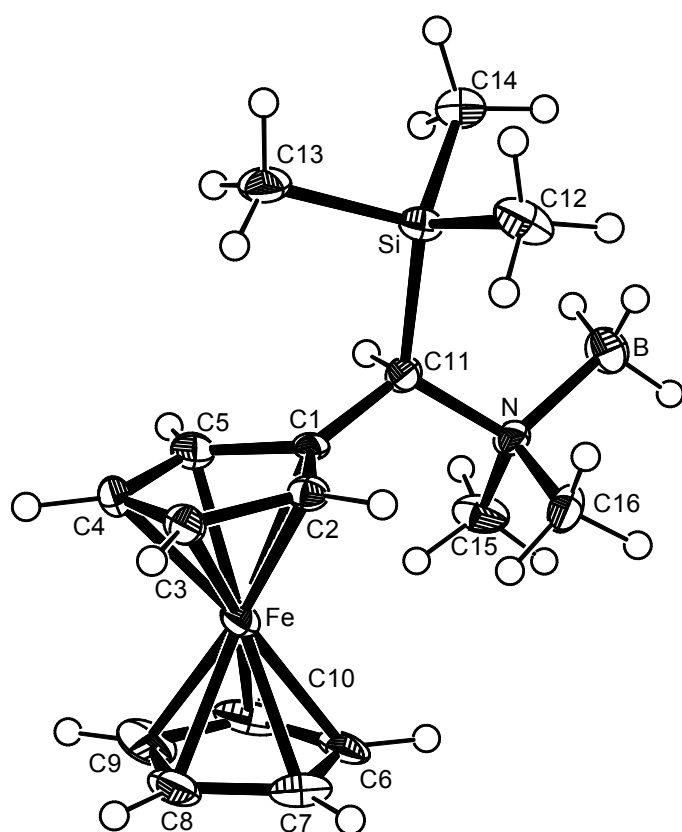
2-Trimethylsilyl-1-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (87)

Abbildung: Molekülstruktur von 2-Trimethylsilyl-1-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (87) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 2-Trimethylsilyl-1-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (87). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
B	-95(6)	4321(3)	4463(3)	34(1)
C(1)	2655(5)	5548(3)	2013(3)	16(1)
C(2)	4799(5)	5553(3)	2173(3)	18(1)
C(3)	5431(5)	6028(3)	1196(2)	23(1)
C(4)	3700(5)	6329(3)	422(2)	24(1)
C(5)	1977(5)	6054(3)	918(2)	24(1)
C(6)	3529(5)	8680(3)	3061(3)	32(1)
C(7)	5490(5)	8691(3)	2814(3)	32(1)
C(8)	5358(6)	9004(3)	1678(3)	37(1)
C(9)	3300(7)	9183(3)	1225(3)	47(1)
C(10)	2174(6)	8972(3)	2075(4)	40(1)
C(11)	1259(5)	4826(3)	2642(2)	19(1)

Anhang

C(12)	3923(4)	2361(4)	3387(2)	33(1)
C(13)	2259(4)	2906(3)	994(2)	31(1)
C(14)	-604(4)	2090(3)	2469(2)	31(1)
C(15)	34(5)	6516(3)	3708(3)	33(1)
C(16)	3161(4)	5494(3)	4476(2)	31(1)
Fe	3783(1)	7381(1)	1818(1)	21(1)
N	1132(4)	5302(2)	3804(2)	19(1)
Si	1720(1)	3042(1)	2449(1)	20(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 2-Trimethylsilyl-1-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (87). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
B	43(3)	37(3)	28(2)	-1(2)	20(2)	-16(2)
C(1)	22(2)	8(2)	18(2)	-3(1)	6(2)	-1(2)
C(2)	18(2)	14(2)	21(2)	-2(1)	5(2)	1(1)
C(3)	32(2)	18(2)	24(2)	-3(2)	16(2)	-2(2)
C(4)	39(2)	18(2)	16(2)	2(1)	9(2)	-2(2)
C(5)	32(2)	15(2)	26(2)	-1(1)	6(2)	0(2)
C(6)	49(2)	11(2)	43(2)	-4(2)	23(2)	-8(2)
C(7)	27(2)	20(2)	47(2)	-10(2)	2(2)	-6(2)
C(8)	51(3)	22(2)	44(3)	-7(2)	28(2)	-18(2)
C(9)	74(3)	13(2)	53(3)	14(2)	2(3)	0(2)
C(10)	28(2)	14(2)	76(3)	-1(2)	6(2)	-2(2)
C(11)	22(2)	17(2)	17(2)	-1(1)	1(2)	2(1)
C(12)	28(2)	23(2)	48(2)	9(2)	3(1)	-4(2)
C(13)	44(2)	17(2)	36(2)	-9(1)	17(2)	-5(2)
C(14)	36(2)	24(2)	33(2)	-3(1)	4(2)	-6(2)
C(15)	36(2)	20(2)	48(2)	-10(2)	26(2)	-2(2)
C(16)	40(2)	39(2)	14(2)	-3(1)	3(2)	-10(2)
Fe	28(1)	14(1)	23(1)	2(1)	7(1)	-1(1)
N	22(2)	20(2)	17(1)	-5(1)	7(1)	-3(1)
Si	21(1)	14(1)	25(1)	-1(1)	3(1)	0(1)

Anhang

N,N-Dimethyl(aminomethyl)ferrocen (2) zum *N,N*-Dimethyl-(aminomethyl)ferrocenboran (73)

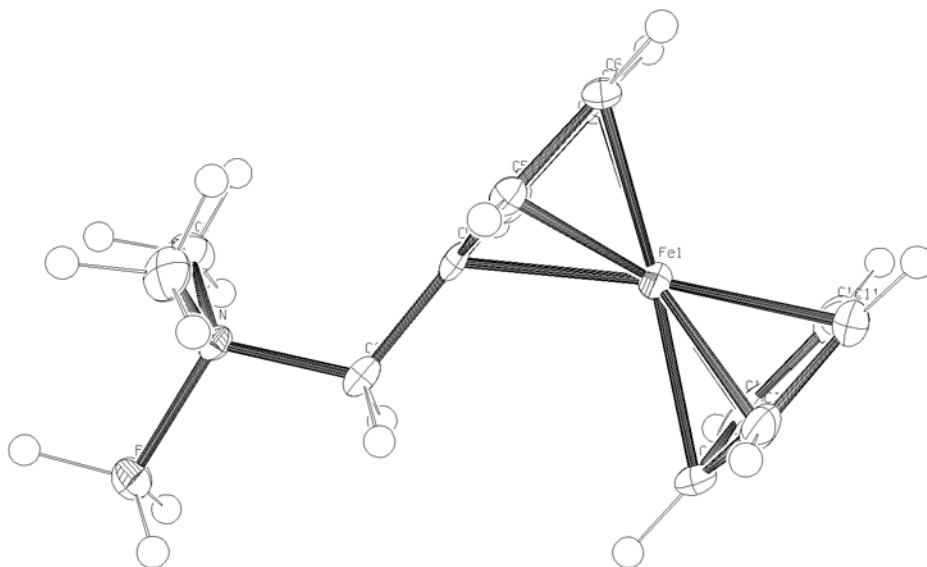


Abbildung: Molekülstruktur von *N,N*-Dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung *N,N*-Dimethyl-(aminomethyl)ferrocenboran. $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

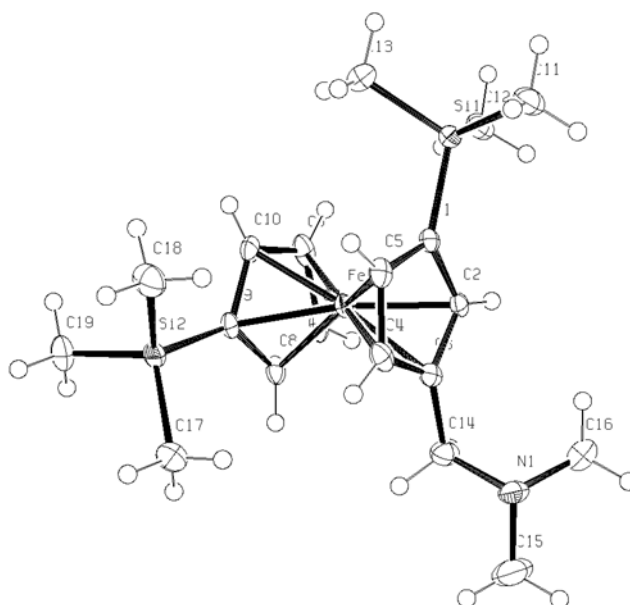
Anhang

Atom	x	y	z	U(eq)
B	6097(11)	8587(6)	10793(3)	22.2(13)
C1	9599(6)	9877(6)	10443.8(16)	23.3(10)
C2	6055(8)	11068(4)	10497(2)	22.5(11)
C3	6638(7)	9362(4)	9685.8(16)	15.5(10)
C4	7425(7)	10342(3)	9209.3(16)	14.1(9)
C5	9626(7)	10383(4)	8927.3(16)	14.7(10)
C6	9621(8)	11413(4)	8470.6(18)	19.4(10)
C7	7430(8)	12016(4)	8468.3(17)	22.3(10)
C8	6086(7)	11360(4)	8921.1(18)	18.4(10)
C9	5797(9)	8120(4)	8178.1(19)	29.8(12)
C10	7939(8)	8162(4)	7908.4(18)	24.1(10)
C11	7928(8)	9167(4)	7446.8(17)	23.1(10)
C12	5749(7)	9754(5)	7436.2(18)	25.4(12)
C13	4421(8)	9100(5)	7893(2)	31.5(12)
Fe1	7190.6(7)	9995.1(7)	8286.4(2)	15.38(14)
N	7108(5)	9749(3)	10345.5(12)	11.7(8)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung *N,N*-Dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran. Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2 a^* 2U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
B	27(4)	24(3)	15(3)	2(3)	3(3)	-8(3)
C1	13.5(18)	33(3)	23(2)	0(3)	-6.7(15)	-2(3)
C2	29(3)	16(3)	23(3)	-1(2)	6(2)	3(2)
C3	14(2)	16(2)	16(2)	-6.6(17)	-2.3(17)	0.3(19)
C4	15(2)	16(2)	11.8(16)	-5.6(16)	-5.3(15)	-1(2)
C5	15(2)	15(3)	14(2)	-2.4(16)	-2.4(16)	-1.1(18)
C6	22(2)	21(2)	16(2)	-0.9(18)	0.3(18)	-14(2)
C7	36(3)	13(2)	18(2)	-0.2(15)	-10(2)	1(2)
C8	19(2)	17(2)	19(2)	-7.1(18)	-5.4(19)	7(2)
C9	50(3)	19(3)	20(3)	-5(2)	5(2)	-20(3)
C10	40(3)	15(2)	17(2)	-5.1(18)	-5(2)	4(2)
C11	32(3)	23(2)	15(2)	-5.1(17)	4(2)	-5(3)
C12	39(3)	19(3)	18(2)	-4(2)	-11.5(19)	3(3)
C13	18(3)	41(3)	35(3)	-31(2)	-4(2)	-4(3)
Fe1	19.0(3)	14.4(2)	12.8(2)	-1.0(3)	-0.8(3)	-0.7(5)
N	11.8(14)	11(2)	12.4(14)	-3.3(12)	-0.8(13)	1.8(19)

3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82)

Anhang

Abbildung: Molekülstruktur von 3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	x	y	z	U(eq)
Fe1	-114.2(3)	9020.9(3)	5311.1(2)	14.65(10)
Si1	-635.5(7)	6877.3(7)	6744.7(4)	19.52(18)
Si2	-1083.5(7)	12124.3(7)	5185.5(4)	19.41(18)
N1	-957(2)	6868(2)	3290.7(12)	24.2(5)
C1	-901(2)	7498(2)	5800.2(14)	16.0(6)
C2	-262(2)	7178(2)	5130.2(13)	16.0(6)
C3	-784(3)	7844(2)	4528.2(14)	18.1(6)
C4	-1761(2)	8578(2)	4818.2(16)	21.0(6)
C5	-1833(3)	8370(2)	5592.2(16)	19.4(6)
C6	1440(3)	9525(3)	5894.5(18)	25.3(7)
C7	1698(3)	9493(2)	5127.5(17)	24.2(7)
C8	888(2)	10332(2)	4773.7(16)	19.9(6)
C9	109(2)	10910(2)	5311.3(14)	16.9(5)
C10	473(2)	10384(2)	6007.2(15)	20.4(6)
C11	-1799(3)	5635(3)	6925.2(16)	27.9(7)
C12	979(3)	6266(3)	6813.4(16)	25.9(7)
C13	-885(3)	8119(3)	7438.7(15)	36.0(8)
C14	-360(3)	7829(3)	3736.8(14)	24.9(7)
C15	-707(4)	7094(3)	2513.6(16)	46.4(10)
C16	-519(3)	5651(3)	3500.5(16)	30.8(8)
C17	-1742(3)	12087(3)	4233.1(16)	33.9(8)
C18	-2312(3)	11901(3)	5899.6(17)	32.3(8)
C19	-327(3)	13645(2)	5336.2(18)	31.2(7)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 3-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-bis(trimethylsilyl)ferrocen (82). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

Atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe1	13.89(19)	10.94(16)	19.11(17)	1.00(15)	-0.28(17)	-1.12(15)
Si1	26.9(4)	16.1(4)	15.6(4)	0.5(3)	1.4(3)	-3.8(3)
Si2	21.9(4)	15.4(4)	20.9(4)	1.5(3)	0.2(3)	5.1(3)
N1	26.7(14)	30.6(14)	15.3(11)	0.2(10)	-1.6(11)	-4.4(12)
C1	17.2(15)	12.8(13)	18.1(13)	0.7(10)	-0.1(12)	-4.8(11)
C2	16.8(14)	11.2(12)	20.0(13)	0.8(10)	-1.9(11)	-2.3(10)
C3	19.3(15)	16.4(13)	18.8(14)	2.1(10)	-3.6(12)	-9.7(11)
C4	17.4(14)	16.7(13)	28.9(17)	4.6(11)	-5.3(13)	-4.6(11)
C5	14.7(15)	16.7(15)	26.7(15)	-1.1(11)	2.6(12)	-5.3(11)
C6	20.3(16)	15.4(14)	40.3(18)	3.1(13)	-12.7(14)	-5.4(11)
C7	14.6(14)	13.1(13)	45(2)	-3.6(12)	4.3(14)	-2.2(11)
C8	19.8(15)	12.5(13)	27.4(15)	-0.2(11)	7.6(14)	-3.7(11)
C9	16.9(12)	11.1(10)	22.8(11)	0.3(11)	-1.1(13)	-3.1(11)
C10	24.7(17)	13.2(14)	23.4(14)	-3.1(11)	-4.3(12)	-4.3(12)
C11	31.4(17)	27.7(17)	24.8(16)	7.1(12)	0.2(14)	-4.8(13)
C12	28.4(17)	24.0(16)	25.3(15)	6.3(12)	0.2(14)	-4.3(13)
C13	58(2)	28.3(17)	21.8(15)	-5.2(13)	5.9(16)	-2.3(17)
C14	27.0(18)	27.8(17)	19.8(13)	3.4(12)	-1.7(13)	-7.7(13)
C15	60(3)	58(3)	21.0(16)	-3.9(16)	-2.9(17)	-14(2)
C16	32.0(18)	31.9(18)	28.5(16)	-8.4(13)	-0.1(14)	0.0(14)
C17	44(2)	28.9(18)	28.6(17)	3.1(14)	-7.8(16)	8.5(16)
C18	30.8(18)	31.9(18)	34.4(18)	5.5(15)	5.6(15)	11.8(15)
C19	35.2(18)	17.5(13)	40.9(17)	-0.8(13)	-0.4(16)	7.0(12)

Anhang

Lithierte Kristalle (100)

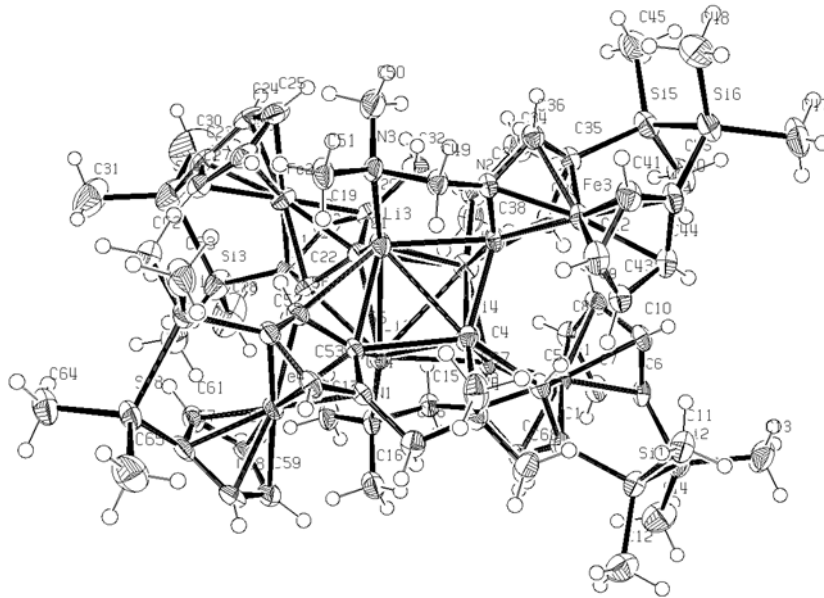


Abbildung: Molekülstruktur von den lithierten Kristalle (100) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die lithierten Kristalle (100). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

Atom	x	y	z	U(eq)
Fe1	3334.6(2)	9032.5(2)	8440.6(2)	21.81(10)
Fe2	5807.0(3)	6547.1(2)	6921.9(2)	28.16(11)
Fe3	1373.9(3)	7649.8(2)	5080.2(2)	23.3(1)
Fe4	3198.6(3)	4572.7(2)	7744.8(2)	23.39(10)
Si1	1448.1(5)	8649.1(4)	8640.6(5)	28.7(2)
Si2	2204.3(6)	10032.6(5)	9143.1(5)	32.5(2)
Si3	7198.3(6)	6443.9(6)	8751.4(5)	44.1(2)
Si4	7777.0(6)	6155.6(6)	7799.2(6)	53.0(3)
Si5	2248.4(6)	9403.8(5)	4715.1(5)	35.0(2)
Si6	712.4(6)	9025.2(5)	3920.2(5)	38.7(2)
Si7	2984.6(6)	3245.3(4)	6217.4(5)	29.2(2)
Si8	3157.9(6)	2604.2(4)	7364.6(5)	32.6(2)
N1	4765.6(14)	7116.4(12)	9388.9(13)	25.5(5)
N2	4943.4(14)	8862.3(12)	6838.8(14)	29.0(6)
N3	2840.9(15)	5780.8(12)	4922.8(13)	25.2(5)
N4	1116.4(14)	5962.1(12)	6979.6(13)	26.1(5)
C1	2329.1(17)	8195.7(14)	8527.0(16)	23.8(6)
C2	3176.5(17)	8220.7(14)	9177.0(16)	23.9(6)
C3	3756.0(17)	8018.1(13)	8834.7(15)	20.9(6)
C4	3315.8(17)	7835.3(13)	7949.8(15)	21.5(6)
C5	2440.6(17)	7962.1(13)	7796.7(16)	22.7(6)
C6	3057.0(18)	10125.1(14)	8711.2(17)	26.8(7)
C7	3979.7(19)	10144.6(14)	9172.7(18)	30.1(7)
C8	4387.7(19)	10014.9(14)	8641.1(17)	30.3(7)
C9	3726.2(18)	9903.8(14)	7831.1(17)	27.2(7)

Anhang

C10	2919.0(19)	9978.0(14)	7872.8(17)	27.9(7)
C11	522.6(18)	8575.1(16)	7613.3(17)	37.7(8)
C12	1022(2)	8104.8(18)	9325.1(19)	47.0(9)
C13	1481(2)	10765.6(17)	8802(2)	49.0(9)
C14	2819(2)	10261.6(19)	10282.0(18)	53.6(9)
C15	4696.5(17)	7979.0(14)	9318.5(15)	24.5(6)
C16	4284(2)	6783.1(16)	9868.4(17)	35.0(7)
C17	5709.1(18)	7124.6(16)	9831.9(17)	35.4(8)
C18	6274.8(18)	6916.2(16)	8149.1(16)	29.5(7)
C19	6359.5(19)	7600.7(16)	7732.4(17)	33.8(7)
C20	5498.3(18)	7620.8(15)	7150.5(16)	27.7(7)
C21	4815.0(17)	6974.2(14)	7181.9(15)	23.7(6)
C22	5328.5(17)	6549.7(15)	7802.9(15)	24.8(6)
C23	6757.5(19)	5991.4(17)	6827.1(18)	34.7(7)
C24	6557(2)	6561.8(18)	6267.6(19)	40.6(8)
C25	5640(2)	6333.0(18)	5728.3(18)	37.9(8)
C26	5254(2)	5610.5(17)	5935.8(17)	34.0(7)
C27	5934.0(19)	5400.7(17)	6613.8(17)	33.9(7)
C28	8002(2)	7137(2)	9734(2)	79.7(13)
C29	6697(2)	5452.0(19)	8986(2)	56.1(10)
C30	8616(2)	7044(2)	7760(3)	92.6(15)
C31	8253(3)	5236(2)	7918(2)	83.8(13)
C32	5301.4(18)	8220.8(15)	6564.4(17)	30.7(7)
C33	5639.3(19)	9365.6(16)	7598.8(18)	40.4(8)
C34	4706(2)	9390.7(17)	6208.4(19)	43.4(8)
C35	2468.8(17)	8413.5(14)	5076.9(16)	25.2(7)

Anhang

C36	2236.6(17)	7648.4(14)	4561.4(16)	25.0(6)
C37	2267.5(17)	7007.3(14)	5047.4(15)	22.0(6)
C38	2544.2(16)	7326.6(14)	5893.4(15)	21.1(6)
C39	2646.1(16)	8206.2(14)	5876.8(16)	23.2(6)
C40	366.5(18)	8194.0(16)	4445.6(17)	31.2(7)
C41	133.5(18)	7330.9(16)	4143.5(17)	33.1(7)
C42	144.9(17)	6884.7(16)	4777.9(17)	32.7(7)
C43	384.9(17)	7451.7(15)	5491.3(17)	27.9(7)
C44	520.9(18)	8250.4(16)	5292.6(17)	30.3(7)
C45	2945(2)	9799.3(19)	4162(2)	58.2(10)
C46	2498(2)	10199.4(17)	5610.1(18)	52.8(10)
C47	138(2)	9879.0(18)	3910(2)	59.4(10)
C48	439(2)	8556(2)	2841.8(18)	56.8(10)
C49	2035.0(17)	6097.5(14)	4729.5(16)	25.2(7)
C50	3326(2)	6132.7(16)	4458.1(18)	38.3(8)
C51	2559.7(19)	4879.7(14)	4675.6(16)	34.7(8)
C52	2736.6(18)	4229.6(14)	6511.3(15)	23.7(6)
C53	2037.8(18)	4305.8(14)	6745.9(15)	24.8(7)
C54	2215.4(17)	5133.9(14)	7142.0(15)	21.1(6)
C55	3028.1(17)	5625.9(14)	7159.3(15)	21.3(6)
C56	3334.8(18)	5036.6(14)	6774.0(15)	23.6(6)
C57	3511(2)	3521.5(16)	8175.2(17)	31.0(7)
C58	2974(2)	3826.5(16)	8520.4(17)	34.7(8)
C59	3414(2)	4635.1(17)	8954.5(16)	35.2(8)
C60	4236(2)	4847.4(16)	8889.6(16)	34.5(8)
C61	4299.1(19)	4171.5(15)	8412.0(16)	30.3(7)

Anhang

C62	4087(2)	3495.4(17)	6156.8(19)	43.3(8)
C63	2107(2)	2667.1(16)	5212.9(17)	48.3(9)
C64	4049(2)	2025.8(16)	7635.2(18)	44.4(9)
C65	2092(2)	1931.5(17)	7274(2)	54.7(10)
C66	1651.2(18)	5450.4(15)	7501.2(17)	28.1(7)
C67	465.1(18)	5443.4(15)	6206.1(18)	36.4(8)
C68	638.0(19)	6301.5(16)	7397.5(19)	38.1(8)
Li1	4010(3)	6705(2)	8015(3)	26.0(11)
Li2	3886(3)	7931(2)	7051(3)	30.0(11)
Li3	3480(3)	6335(2)	6261(3)	27.7(11)
Li4	2342(3)	6759(2)	6886(3)	26.5(11)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die lithiierten Kristalle (100). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe1	23.3(2)	15.60(19)	22.0(2)	-0.90(16)	5.24(18)	4.98(16)
Fe2	23.3(2)	34.5(2)	26.8(2)	0.10(18)	11.8(2)	5.91(18)
Fe3	24.3(2)	19.0(2)	21.6(2)	1.43(16)	3.44(18)	8.04(16)
Fe4	29.9(2)	18.2(2)	22.4(2)	5.14(16)	9.92(19)	7.64(17)
Si1	26.1(5)	29.1(4)	30.6(5)	0.9(3)	11.1(4)	9.0(3)
Si2	34.1(5)	29.6(4)	30.9(5)	-4.0(4)	10.1(4)	11.9(4)
Si3	30.4(5)	62.3(6)	32.5(5)	-2.2(4)	3.3(4)	20.5(4)
Si4	28.0(5)	78.2(7)	50.9(6)	-2.0(5)	14.3(5)	17.3(5)
Si5	41.1(5)	28.3(4)	34.7(5)	11.4(4)	12.3(4)	11.4(4)
Si6	41.8(6)	40.6(5)	36.0(5)	16.2(4)	11.9(4)	20.5(4)
Si7	39.0(5)	19.9(4)	29.5(5)	2.7(3)	13.4(4)	10.8(4)
Si8	40.7(5)	19.3(4)	38.6(5)	9.3(4)	15.4(4)	9.6(4)
N1	27.6(14)	22.0(12)	22.7(13)	2.4(10)	3.2(11)	12.6(10)
N2	27.4(14)	26.3(13)	32.3(14)	7.7(11)	12.2(12)	3.4(10)
N3	33.6(14)	19.6(12)	24.2(13)	1.4(10)	11.5(12)	12.3(10)
N4	26.2(14)	18.3(11)	34.5(14)	3.5(10)	13.3(12)	6(1)
C1	23.8(16)	17.8(13)	26.9(16)	1.1(11)	8.5(13)	3.8(11)
C2	28.3(17)	19.1(14)	23.8(15)	3.9(11)	9.3(13)	7.5(12)
C3	24.6(16)	13.5(13)	22.4(15)	1.7(11)	6.9(13)	6.2(11)
C4	25.5(16)	10.2(13)	24.5(15)	-1.1(11)	7.1(13)	3.6(11)
C5	23.7(16)	11.7(13)	25.1(15)	-1.6(11)	4.8(13)	0.5(11)
C6	33.3(18)	9.7(13)	36.1(18)	-1.1(12)	12.7(15)	7.8(12)
C7	36.0(18)	15.1(14)	31.8(17)	-4.8(12)	9.2(15)	3.4(12)
C8	27.0(17)	18.5(14)	38.2(18)	-0.8(13)	10.5(15)	-1.8(12)
C9	35.1(18)	14.7(14)	31.5(17)	6.5(12)	14.0(15)	3.9(12)
C10	33.0(18)	14.7(14)	31.4(17)	5.0(12)	8.4(14)	5.6(12)
C11	34.8(19)	37.5(17)	39.7(19)	0.8(14)	12.2(16)	15.3(14)
C12	39(2)	59(2)	45(2)	5.4(16)	21.2(17)	10.2(16)
C13	58(2)	39.4(18)	64(2)	4.9(16)	35(2)	23.7(16)

Anhang

C14	53(2)	62(2)	39(2)	-8.3(16)	17.6(18)	8.0(18)
C15	26.9(16)	22.5(14)	19.8(15)	0.2(11)	4.8(13)	7.8(12)
C16	45(2)	28.1(16)	31.1(17)	6.1(13)	12.3(16)	13.8(14)
C17	34.8(19)	38.2(17)	28.2(17)	1.7(13)	3.2(15)	20.3(14)
C18	22.8(17)	39.3(17)	22.8(16)	-1.3(13)	5.7(13)	10.1(13)
C19	26.0(17)	35.7(17)	33.2(18)	-7.8(14)	10.3(15)	1.8(13)
C20	27.0(17)	29.7(16)	26.8(16)	0.5(13)	13.2(14)	4.9(13)
C21	24.8(16)	23.5(14)	23.2(15)	2.3(12)	10.5(13)	5.9(12)
C22	24.5(16)	30.6(15)	23.2(15)	-0.2(12)	14.6(13)	7.0(12)
C23	27.1(18)	44.2(18)	37.9(19)	-1.2(15)	18.7(15)	11.6(14)
C24	39(2)	49.8(19)	46(2)	2.9(16)	33.8(18)	7.2(16)
C25	41(2)	51(2)	28.1(18)	2.4(15)	20.2(16)	14.1(16)
C26	36.0(19)	41.3(18)	24.5(17)	-5.8(14)	13.6(15)	10.7(14)
C27	41(2)	37.1(17)	30.6(18)	4.2(14)	19.1(16)	16.2(15)
C28	48(2)	108(3)	52(2)	-21(2)	-12(2)	34(2)
C29	61(2)	72(2)	49(2)	21.4(18)	24(2)	41(2)
C30	42(3)	127(4)	88(3)	-6(3)	24(2)	-10(2)
C31	64(3)	136(4)	60(3)	7(2)	17(2)	65(3)
C32	27.9(17)	29.1(16)	33.1(17)	4.3(13)	13.9(14)	-0.4(13)
C33	37(2)	31.8(17)	47(2)	0.1(14)	14.1(17)	6.8(14)
C34	46(2)	36.5(17)	52(2)	17.3(16)	23.7(18)	7.8(15)
C35	26.9(16)	22.4(14)	25.1(16)	6.8(12)	7.6(13)	9.1(12)
C36	24.0(16)	24.6(15)	22.4(15)	3.2(12)	5.2(13)	6.9(12)
C37	22.2(15)	19.1(14)	21.7(15)	2.8(11)	5.2(13)	6.8(11)
C38	16.9(15)	18.5(14)	22.5(15)	1.9(11)	2.3(12)	5.1(11)
C39	22.0(15)	19.3(14)	22.2(15)	1.3(11)	2.9(13)	5.8(11)
C40	27.1(17)	31.3(16)	31.9(18)	8.2(13)	4.6(14)	15.2(13)
C41	27.7(17)	38.5(17)	25.0(16)	1.8(14)	1.2(14)	12.3(13)
C42	24.3(17)	26.3(15)	36.3(18)	0.6(14)	2.7(14)	4.1(12)
C43	26.2(17)	27.1(15)	28.9(17)	5.2(13)	8.1(14)	9.7(12)

Anhang

C44	26.6(17)	28.1(16)	34.6(18)	2.9(13)	8.7(14)	12.2(13)
C45	58(2)	58(2)	65(3)	30.7(19)	28(2)	14.8(18)
C46	72(3)	34.8(18)	44(2)	9.0(15)	11.3(19)	22.3(17)
C47	65(3)	52(2)	74(3)	32.3(19)	27(2)	37.7(19)
C48	57(2)	76(2)	36(2)	15.8(18)	11.8(18)	26.0(19)
C49	28.2(17)	21.8(14)	23.1(15)	0.8(11)	7.0(13)	9.7(12)
C50	43(2)	38.8(17)	34.9(18)	2.6(14)	15.1(16)	18.1(15)
C51	47(2)	24.6(15)	27.6(17)	0.0(12)	7.2(15)	17.9(14)
C52	29.2(17)	21.4(14)	20.2(15)	4.8(11)	8.4(13)	8.6(12)
C53	27.0(17)	15.6(14)	24.5(16)	4.3(11)	4.2(13)	2.4(12)
C54	22.4(16)	18.8(14)	19.9(15)	6.4(11)	5.8(12)	5.2(11)
C55	24.3(16)	19.3(14)	19.6(15)	7.2(11)	6.6(13)	7.9(11)
C56	27.5(16)	22.8(14)	19.3(15)	5.6(11)	7.8(13)	6.8(12)
C57	43(2)	26.7(16)	26.8(16)	16.6(13)	12.4(15)	15.3(14)
C58	49(2)	33.2(17)	30.8(17)	19.3(14)	21.5(16)	13.9(15)
C59	55(2)	36.5(18)	24.8(17)	12.2(13)	20.4(16)	24.5(15)
C60	47(2)	29.6(16)	21.6(16)	6.0(13)	5.8(15)	14.5(14)
C61	35.3(18)	30.8(16)	24.6(16)	9.1(13)	7.7(14)	16.1(14)
C62	58(2)	38.7(18)	48(2)	12.1(15)	31.9(18)	24.1(16)
C63	72(3)	27.9(17)	38(2)	-1.1(14)	13.3(18)	17.5(16)
C64	54(2)	28.1(16)	44(2)	5.2(14)	10.6(17)	15.5(15)
C65	56(2)	39.7(19)	66(3)	14.7(17)	25(2)	3.2(17)
C66	24.2(16)	21.9(15)	36.3(17)	3.8(13)	12.3(14)	2.4(12)
C67	28.0(18)	24.7(15)	49(2)	4.0(14)	8.1(16)	6.4(13)
C68	36.3(19)	29.0(16)	59(2)	6.5(15)	28.5(17)	10.1(14)
Li1	26(3)	21(2)	26(3)	-0.4(19)	6(2)	5.9(19)
Li2	30(3)	26(2)	26(3)	1(2)	6(2)	2(2)
Li3	33(3)	22(2)	26(3)	1.7(19)	9(2)	10(2)
Li4	31(3)	20(2)	27(3)	-1.0(19)	12(2)	7.5(19)

Anhang

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylmethoxyphenylsila)ferrocen (139)

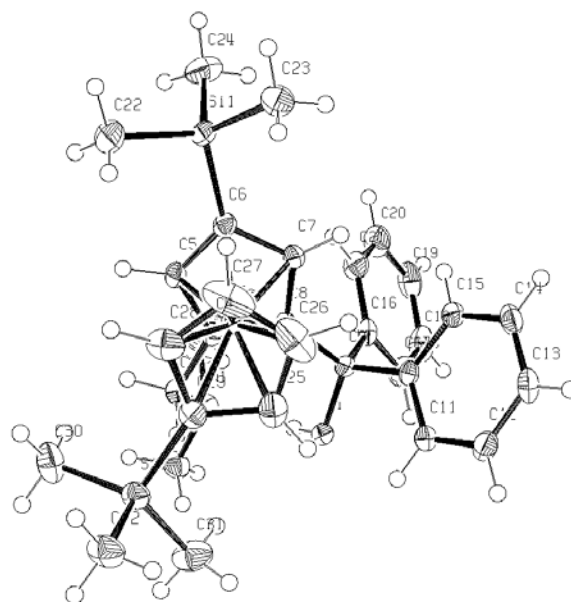


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylmethoxyphenylsila)ferrocen (139) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylmethoxyphenylsila)ferrocen (139). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	$U(\text{eq})$
O1	5794.5(16)	10742.3(15)	3527.4(9)	23.4(3)
C1	6917(3)	8240(2)	5266.2(13)	30.7(5)
C2	8998(2)	8414(3)	4399.6(14)	31.8(5)
C3	6966(2)	7731(2)	3917.3(12)	21.2(4)
C4	7317(2)	8149.0(19)	3018.7(12)	18.2(4)
C5	7981(2)	7181(2)	2516.9(12)	20.6(4)
C6	8223(2)	7890(2)	1706.3(12)	20.8(4)
C7	7677(2)	9335(2)	1711.7(12)	20.0(4)
C8	7122(2)	9513.5(19)	2510.7(12)	18.3(4)
C9	6637(2)	10915.2(19)	2791.6(12)	19.5(4)
C10	5723(2)	11956.2(19)	2162.1(12)	20.0(4)
C11	4285(2)	12323(2)	2322.5(13)	24.0(4)
C12	3438(2)	13221(2)	1741.8(14)	28.5(5)
C13	4024(2)	13746(2)	990.7(14)	29.5(5)
C14	5456(2)	13415(2)	831.8(14)	28.6(5)
C15	6311(2)	12549(2)	1417.0(13)	23.8(4)
C16	7941(2)	11533(2)	2933.9(12)	22.0(4)
C17	7754(3)	12553(2)	3426.9(14)	30.4(5)

Anhang

C18	8878(3)	13159(2)	3567.2(15)	38.0(6)
C19	10204(3)	12769(2)	3225.0(16)	37.8(6)
C20	10401(3)	11759(2)	2739.9(16)	37.5(6)
C21	9274(2)	11154(2)	2593.4(14)	29.6(5)
C22	8785(3)	5287(2)	975.1(16)	44.9(7)
C23	8563(3)	8188(3)	-155.2(14)	38.0(6)
C24	11084(3)	7099(3)	871.2(16)	42.7(6)
C25	3988(2)	8989(2)	2010.6(16)	34.9(5)
C26	4597(3)	9089(3)	1213.1(17)	50.0(8)
C27	5168(3)	7732(4)	1084.1(15)	49.6(8)
C28	4919(2)	6786(3)	1811.2(15)	35.2(5)
C29	4166(2)	7554(2)	2401.4(13)	25.4(4)
C30	4582(3)	5227(3)	3873.5(17)	42.5(6)
C31	2929(3)	8189(3)	4044.1(17)	44.0(6)
C32	1708(3)	6232(3)	3202.8(16)	39.7(6)
Fe1	6101.3(3)	8202.5(3)	2034.1(2)	19.99(10)
N1	7466.3(18)	8582.3(17)	4428.2(10)	21.8(4)
Si1	9150.3(6)	7110.5(6)	840.0(3)	24.43(14)
Si2	3372.3(6)	6811.7(6)	3395.7(4)	26.75(15)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylmethoxyphenylsila)ferrocen (139). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
O1	24.8(8)	20.3(7)	21.9(8)	-1.8(6)	3.9(6)	0.4(6)
C1	40.3(13)	30.8(12)	21.3(11)	-4.9(9)	1.3(9)	-8(1)
C2	26.6(12)	39.1(13)	32.2(12)	-6.8(10)	-6.1(9)	-9.8(10)
C3	23.9(10)	17.9(9)	22.3(10)	-2.4(8)	-2.3(8)	-5.1(8)
C4	16.9(9)	16.5(9)	22.1(10)	-3.3(7)	-2.9(7)	-4.3(7)
C5	21.3(10)	15.5(9)	25.7(10)	-4.3(8)	-3.5(8)	-3.4(8)
C6	19.9(10)	18.2(9)	25.6(10)	-6.5(8)	-0.3(8)	-4.1(8)
C7	21(1)	17.7(9)	21.8(10)	-2.8(7)	1.0(8)	-5.7(8)
C8	16.3(9)	16.1(9)	23.3(10)	-3.0(7)	0.1(7)	-5.3(7)
C9	20.6(10)	16.0(9)	21.5(10)	-3.9(7)	2.7(8)	-2.8(8)
C10	24.4(10)	12.5(9)	24.2(10)	-5.1(7)	-0.6(8)	-4.4(8)
C11	26.4(11)	17.7(9)	26.7(11)	-2.3(8)	2.1(8)	-4.1(8)
C12	23.4(11)	21.2(10)	39.6(13)	-2.9(9)	-3.6(9)	-1.7(9)
C13	34.3(12)	18.1(10)	34.3(12)	4.0(9)	-9.9(10)	-5.2(9)
C14	37.3(13)	18.7(10)	28.7(11)	1.4(8)	-0.1(9)	-8.3(9)
C15	24.3(11)	17.6(9)	29.7(11)	-4.1(8)	2.1(8)	-5.2(8)
C16	27.6(11)	14.8(9)	23.5(10)	-0.8(7)	-5.1(8)	-4.2(8)
C17	35.8(12)	23.3(11)	33.6(12)	-9.5(9)	-7.1(10)	-1.8(9)
C18	56.2(16)	23.8(11)	38.6(13)	-8.9(10)	-16.4(12)	-9.3(11)
C19	42.9(14)	26.4(12)	47.4(15)	3.2(10)	-19.5(12)	-18.2(11)
C20	27.9(12)	29.8(12)	55.2(16)	-2.5(11)	-3.7(11)	-10.7(10)
C21	29.4(12)	22.2(11)	40.3(13)	-8.9(9)	-0.2(10)	-9.4(9)
C22	69.5(19)	26.3(12)	41.7(15)	-16.6(11)	13.5(13)	-10.8(12)
C23	45.7(15)	39.7(14)	26.8(12)	-5.2(10)	1.3(10)	-4.4(11)
C24	31.8(13)	51.2(16)	43.3(15)	-15.5(12)	4.8(11)	2.8(12)

Anhang

C25	20.3(11)	30.7(12)	51.6(15)	2.7(10)	-10.8(10)	-5.7(9)
C26	33.4(14)	71(2)	42.1(15)	19.4(14)	-20.9(12)	-21.9(14)
C27	41.0(15)	93(2)	26.4(13)	-14.3(13)	-4.9(11)	-36.1(16)
C28	31.4(12)	45.9(14)	38.8(13)	-20.8(11)	1.4(10)	-21.3(11)
C29	20.5(10)	25.1(11)	33.8(12)	-7.9(9)	-2.7(8)	-9.0(8)
C30	48.1(16)	29.9(13)	50.3(16)	3.0(11)	-11.5(12)	-15.1(11)
C31	35.7(14)	52.0(16)	53.1(16)	-29.5(13)	5.7(11)	-12.4(12)
C32	34.2(13)	44.5(14)	48.5(15)	-16.9(12)	6.1(11)	-22.1(11)
Fe1	20.67(16)	19.58(16)	21.01(16)	-2.96(11)	-2.44(11)	-6.90(12)
N1	24.5(9)	22.8(8)	19.5(8)	-5.0(7)	-1.8(7)	-6.3(7)
Si1	30.0(3)	19.4(3)	24.1(3)	-8.0(2)	2.8(2)	-2.1(2)
Si2	25.3(3)	25.9(3)	32.9(3)	-9.6(2)	2.8(2)	-11.5(2)

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocen (140)

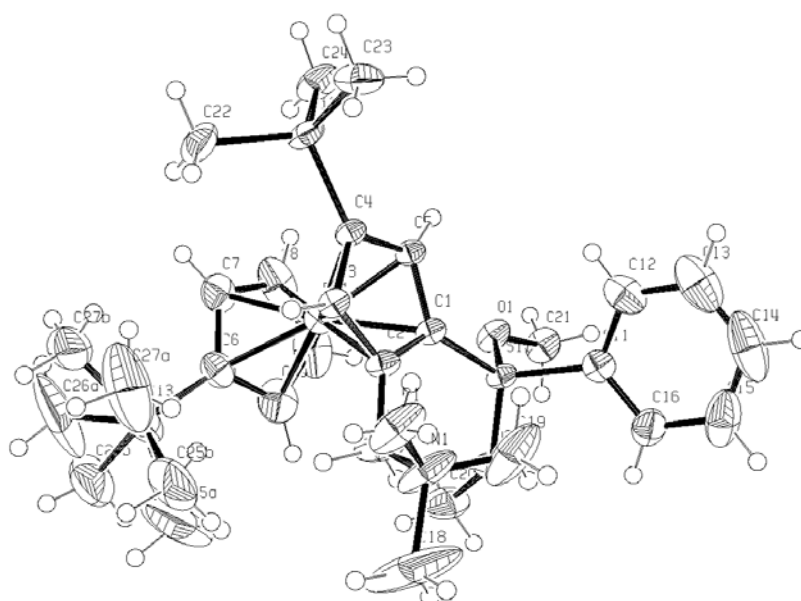


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocen (140) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Anhang

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocen (140). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

Atom	x	y	z	U(eq)
Fe1	3719.2(3)	914.7(2)	6896.6(3)	27.33(10)
Si1	1468.9(6)	903.0(2)	4324.3(5)	25.20(14)
Si2	2277.4(7)	521.4(2)	9219.1(5)	33.08(17)
Si3	6576.3(10)	1697.0(4)	7994.1(11)	68.1(3)
O1	1943.8(18)	325.1(6)	4138.3(13)	33.4(4)
O2	2135.7(17)	1310.1(7)	3584.0(14)	35.4(4)
N1	1536(4)	2357.2(8)	5891.9(19)	65.1(9)
C1	1906(2)	1016.3(8)	5871.4(18)	24.4(4)
C2	2349(2)	1472.9(8)	6487.5(18)	26.9(5)
C3	2543(2)	1368.2(8)	7671.9(18)	24.8(4)
C4	2240(2)	850.8(8)	7841.0(18)	24.5(4)
C5	1848(2)	639.4(8)	6719.7(18)	24.1(4)
C6	5699(3)	1128.6(11)	7305(2)	41.6(6)
C7	5468(3)	663.0(11)	7843(3)	45.2(7)
C8	4947(3)	307.0(12)	6975(4)	60.7(10)
C9	4840(3)	548.6(16)	5926(3)	68.1(11)
C10	5300(3)	1038.0(15)	6125(3)	57.6(9)
C11	-338(2)	985.8(8)	3798(2)	30.8(5)
C12	-1241(3)	751.4(12)	4362(3)	47.2(7)
C13	-2580(4)	817.8(17)	4030(4)	71.9(11)
C14	-3058(3)	1125.7(17)	3119(5)	84.8(15)
C15	-2198(4)	1359.4(13)	2529(4)	71.2(12)
C16	-841(3)	1285.9(10)	2856(3)	44.9(7)
C17	2628(3)	1974.9(9)	6001(2)	45.7(7)
C18	2057(9)	2868.8(15)	5361(4)	174(4)

Anhang

C19	337(5)	2162.5(13)	5133(3)	85.4(15)
C20	3396(3)	1303.7(13)	3291(3)	55.0(8)
C21	1589(3)	62.7(10)	3081(2)	39.5(6)
C22	3650(3)	773.8(12)	10325(2)	51.1(8)
C23	675(3)	640.8(11)	9672(2)	49.4(7)
C24	2484(3)	-168.8(10)	9014(3)	51.0(8)
C25A	6587(10)	2142(4)	6771(14)	143(6)
C25B	5733(12)	2310(3)	7697(11)	103(5)
C26A	8275(9)	1507(4)	8539(18)	176(10)
C26B	8249(10)	1727(6)	7556(9)	104(5)
C27A	5733(11)	1990(4)	9052(11)	139(6)
C27B	6927(10)	1589(3)	9576(6)	76(3)
B1	1255(7)	2476.2(17)	7008(3)	60.3(13)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocen (140). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

Atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe1	29.99(18)	23.14(17)	29.94(18)	-4.88(13)	8.42(13)	2.62(13)
Si1	35.6(3)	21.9(3)	19.1(3)	0.8(2)	7.9(2)	1.7(2)
Si2	53.7(4)	22.9(3)	21.3(3)	4.4(2)	3.8(3)	0.3(3)
Si3	50.5(5)	50.4(5)	98.5(8)	0.1(5)	2.1(5)	-19.1(4)
O1	49.7(10)	27.6(8)	22.2(8)	-5.0(7)	5.3(7)	7.5(7)
O2	42.9(10)	35.1(9)	32.0(9)	4.0(7)	16.7(7)	-3.5(8)
N1	144(3)	19.2(11)	26.7(11)	1.7(9)	2.8(14)	23.1(14)
C1	31.5(11)	20.5(10)	22.2(10)	0.1(8)	7.4(9)	3.1(8)
C2	38.8(13)	18.8(10)	24.7(11)	0.0(9)	10.2(9)	3.2(9)
C3	32.5(12)	20.6(10)	22(1)	-2.1(8)	6.9(9)	4.4(9)
C4	30.7(11)	21(1)	22.5(10)	1.7(8)	6.6(8)	4.5(9)
C5	30.6(11)	19.1(10)	23.2(10)	1.4(8)	6.7(9)	2.6(8)
C6	31.5(13)	44.0(15)	50.5(16)	-2.7(13)	10.6(12)	-1.2(11)
C7	29.3(13)	43.4(15)	61.2(18)	5.1(14)	4.3(12)	9.3(11)
C8	31.9(15)	36.4(15)	111(3)	-19.1(18)	7.4(17)	12.5(12)
C9	43.1(17)	91(3)	72(2)	-42(2)	14.3(16)	16.6(18)
C10	39.0(16)	89(3)	50.2(18)	-6.0(18)	22.8(13)	4.4(16)
C11	36.9(13)	22.7(11)	33.2(12)	-6.6(9)	7.7(10)	1.5(9)
C12	49.8(17)	50.1(17)	47.5(16)	-15.2(14)	23.8(13)	-10.2(13)
C13	48(2)	83(3)	92(3)	-40(2)	33(2)	-11.0(19)
C14	33.8(18)	80(3)	136(4)	-57(3)	5(2)	6.8(18)
C15	62(2)	41.1(17)	93(3)	-13.3(18)	-28(2)	16.0(16)
C16	48.8(16)	29.7(13)	50.2(16)	1.0(12)	-5.8(13)	0.3(12)
C17	93(2)	20.0(12)	27.7(12)	-0.3(10)	21.9(13)	-6.2(13)
C18	427(12)	27.3(19)	55(3)	11.9(18)	15(4)	-23(4)

Anhang

C19	138(4)	47.4(19)	55(2)	-5.1(16)	-23(2)	49(2)
C20	61.5(19)	60(2)	51.9(18)	15.5(16)	32.9(15)	6.6(16)
C21	53.4(16)	37.6(14)	27.9(12)	-11.5(11)	8.6(11)	2.8(12)
C22	69(2)	52.4(17)	26.3(13)	1.4(12)	-5.6(13)	-2.5(15)
C23	76(2)	38.7(15)	40.0(15)	-0.4(12)	27.1(14)	-12.1(14)
C24	80(2)	25.6(13)	43.0(15)	9.4(12)	1.6(15)	8.7(13)
C25A	82(7)	65(6)	282(18)	58(9)	33(9)	-23(5)
C25B	104(8)	42(4)	145(11)	3(5)	-22(7)	-34(5)
C26A	50(5)	78(7)	360(30)	-16(10)	-68(10)	-14(5)
C26B	73(6)	164(13)	78(6)	-5(7)	21(5)	-58(8)
C27A	114(8)	116(9)	170(12)	-100(9)	-14(8)	-25(7)
C27B	107(7)	64(5)	54(4)	-13(4)	7(4)	-40(5)
B1	109(4)	34(2)	35.4(19)	-2.5(17)	8(2)	36(2)

Anhang

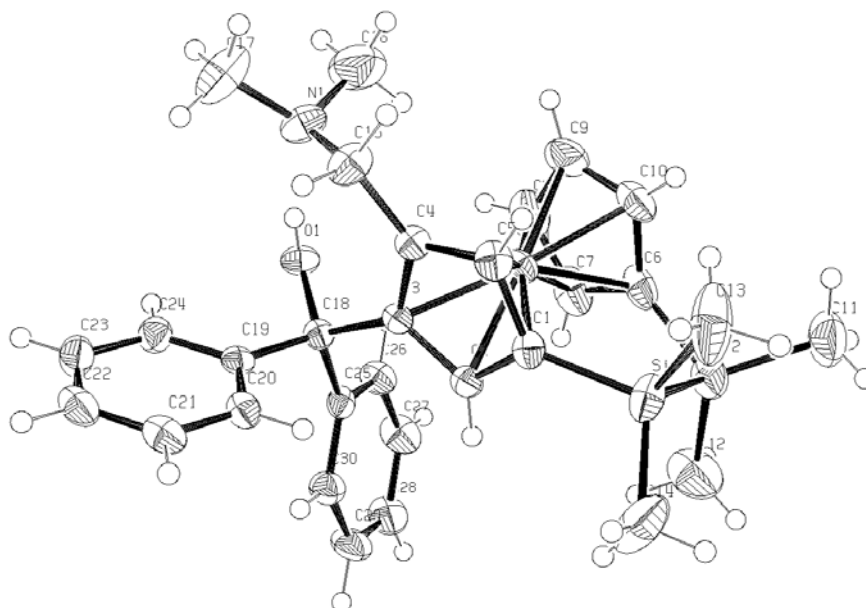
4-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1-[2]-tetramethyldisila-3-(diphenyl-1-carbinol)ferrocenophan (157)

Abbildung: Molekülstruktur von 4-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1-[2]-tetramethyldisila-3-(diphenyl-1-carbinol)ferrocenophan (157) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die 4-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1-[2]-tetramethyldisila-3-(diphenyl-1-carbinol)ferrocenophan (157). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	$U(\text{eq})$	
Fe1	6652.8(3)		4374.0(3)	1558.2(2)	26.04(14)
Si1	6223.3(7)		2547.8(5)	1093.9(5)	38.8(3)
Si2	7094.8(7)		2550.0(6)	2030.2(5)	42.1(3)
O1	7642.8(15)		6155.6(12)	1031.1(10)	28.4(5)
N1	5748.5(18)		6417.6(16)	879.7(13)	37.6(7)
C1	6323(2)	3602.5(17)		887.0(13)	26.3(7)
C2	7181(2)	4019.4(17)		858.5(13)	24.3(7)
C3	7006.6(19)		4841.5(17)	816.4(12)	21.7(6)
C4	6009.8(19)		4949.2(17)	812.2(13)	25.8(7)
C5	5610(2)	4198.2(18)		860.8(14)	30.3(8)
C6	7016(2)	3605(2)	2232.1(14)		37.3(8)
C7	7701(3)	4221(2)	2262.5(15)		44.3(9)
C8	7256(3)	4949(2)	2299.6(15)		48.8(10)

Anhang

C9	6284(3)	4808(2)	2297.5(15)	49.8(10)	
C10	6134(2)	3987(2)	2255.8(15)	42.5(9)	
C11	6533(3)	1943(2)	2533.9(19)	61.5(12)	
C12	8367(3)	2279(3)	2049(2)	70.6(14)	
C13	4946(3)	2317(3)	1096(2)	77.5(16)	
C14	6712(3)	1891(2)	590(2)	71.1(14)	
C15	5397(2)	5660.6(18)	653.5(17)	38.1(8)	
C16	5673(4)	6544(3)	1471(2)	75.7(14)	
C17	5269(3)	7049(2)	526(2)	65.0(13)	
C18	7715.0(19)	5467.5(17)	702.3(13)	23.2(7)	
C19	7511.7(18)	5665.5(17)	54.5(13)	23.7(7)	
C20	7170(2)	5112.5(19)	-361.6(14)	29.0(7)	
C21	6986(2)	5305(2)	-938.6(14)	34.5(8)	
C22	7121(2)	6060(2)	-1112.3(15)	38.9(9)	
C23	7461(2)	6616(2)	-706.2(16)	40.2(9)	
C24	7658(2)	6418.3(18)	-125.3(14)	31.4(8)	
C25	8733.4(19)	5165.6(17)	902.4(14)	24.6(7)	
C26	9175(2)	5287.1(19)	1466.7(15)	32.0(8)	
C27	10077(2)	4989(2)	1671.4(16)	41.2(9)	
C28	10541(2)	4565(2)	1307.8(17)	44.6(10)	
C29	10117(2)	4449(2)	746.5(16)	42.3(9)	
C30	9211(2)	4746.6(19)	542.3(15)	33.7(8)	

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 4-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1-[2]-tetramethyldisila-3-(diphenyl-1-carbinol)ferrocenophan (157). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^2U^{11} + \dots + 2hkab^*U^{12}]$.

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe1	19.4(2)	36.1(3)	22.7(3)	1.5(2)	3.99(17)	-1.5(2)
Si1	37.1(5)	29.8(5)	46.1(7)	9.1(5)	-1.5(5)	-5.0(4)
Si2	32.6(5)	51.7(7)	41.5(7)	19.5(5)	5.6(5)	7.3(5)
O1	20.9(12)	31.3(13)	32.2(14)	-7(1)	2.6(10)	1.6(10)
N1	31.1(15)	35.6(17)	41.2(19)	-6.0(14)	-6.0(13)	6.5(12)
C1	24.7(16)	29.5(18)	22.7(17)	3.1(14)	-0.8(13)	-2.3(13)

Anhang

C2	21.9(15)	29.4(17)	21.2(17)	1.7(13)	3.2(13)	2.7(13)
C3	19.0(14)	26.9(17)	18.9(16)	0.6(13)	2.6(12)	0.6(12)
C4	19.8(15)	30.4(18)	25.5(18)	0.3(14)	-0.2(13)	0.1(13)
C5	19.0(15)	37.0(19)	33(2)	1.9(15)	-1.4(14)	-3.9(13)
C6	30.5(18)	56(2)	24.5(19)	13.1(17)	3.2(15)	-4.7(16)
C7	35(2)	67(3)	25(2)	11.2(18)	-7.2(15)	-7.0(18)
C8	63(3)	57(3)	24(2)	-3.9(18)	1.1(18)	-14(2)
C9	64(3)	62(3)	28(2)	0.5(19)	20.6(19)	13(2)
C10	39(2)	60(3)	31(2)	7.0(18)	15.1(17)	0.1(18)
C11	65(3)	59(3)	62(3)	30(2)	15(2)	2(2)
C12	44(2)	105(4)	62(3)	21(3)	10(2)	25(2)
C13	51(3)	73(3)	99(4)	44(3)	-13(3)	-30(2)
C14	105(4)	35(2)	66(3)	-4(2)	-5(3)	11(2)
C15	23.3(17)	36(2)	51(2)	0.3(17)	-5.3(16)	0.1(15)
C16	97(4)	69(3)	64(3)	-8(3)	24(3)	27(3)
C17	60(3)	37(2)	87(4)	5(2)	-17(2)	5(2)
C18	20.1(15)	26.0(17)	23.1(17)	1.3(13)	3.1(13)	0.1(12)
C19	14.0(14)	29.5(17)	28.8(18)	1.0(14)	6.7(12)	2.7(13)
C20	26.8(16)	33.5(19)	27.2(19)	2.6(15)	6.2(14)	-1.5(14)
C21	25.7(17)	50(2)	27.3(19)	-2.8(16)	4.1(14)	1.1(15)
C22	26.2(17)	64(3)	27(2)	9.9(18)	6.7(15)	10.9(17)
C23	37(2)	42(2)	43(2)	15.3(18)	11.5(17)	6.9(16)
C24	28.5(17)	31.7(19)	34(2)	4.6(15)	6.1(15)	1.1(14)
C25	18.4(15)	24.4(17)	31.1(19)	5.0(14)	4.9(13)	-2.7(12)
C26	23.3(16)	42(2)	31(2)	-1.1(16)	3.6(14)	-0.3(14)
C27	22.1(17)	63(2)	36(2)	2.4(18)	-0.7(15)	-0.6(16)
C28	22.8(17)	60(3)	52(3)	14(2)	9.0(17)	11.3(16)
C29	29.5(18)	57(2)	44(2)	4.9(19)	16.6(17)	12.5(17)
C30	31.3(18)	38(2)	33(2)	2.5(16)	8.3(15)	6.0(15)

Anhang

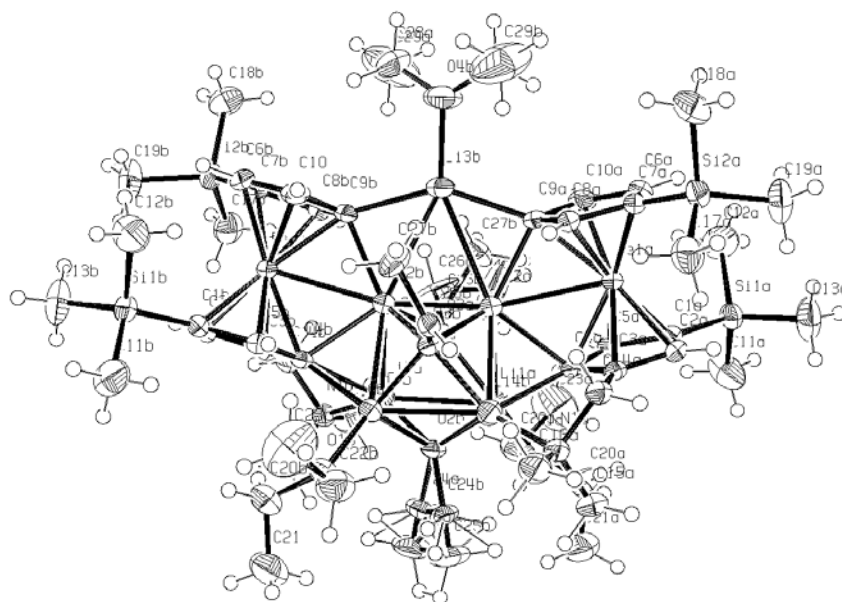


Abbildung: Molekülstruktur von der lithiierten Struktur 101. (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für die lithiierte Struktur 101. $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	$U(\text{eq})$	
Fe1	7050.4(2)		5138.0(2)	9017.1(2)	24.66(9)
Si2	8567.8(4)		4267.7(3)	8895.1(4)	39.07(16)
Si1	7888.5(4)		5500.3(3)	10907.8(3)	33.79(15)
O3	4637.9(8)		5757.8(5)	8027.6(7)	27.4(3)
O2	5000	6820.2(8)	7500		35.2(5)
O1	5432.2(9)		6928.0(7)	9286.0(8)	41.7(4)
N1	7122.5(10)		6654.4(7)	7752.2(9)	33.0(4)
O4	5000	3438.2(10)	7500		78.2(10)
C8	6876.2(11)		4568.5(8)	8175.4(11)	28.7(4)
C1	7487.4(12)		5677.1(8)	9922.7(11)	27.5(4)
C4	6552.1(12)		5995.2(8)	8740.7(11)	27.2(4)
C3	7338.4(12)		5961.9(8)	8765.7(11)	27.4(4)
C7	7554.2(12)		4389.3(8)	8811.3(11)	30.1(4)
C14	7541.8(13)		6112.6(8)	8136.1(11)	31.9(5)
C5	6682.8(12)		5812.9(8)	9467.9(11)	27.6(4)
C9	6159.6(12)		4576.1(8)	8286.2(12)	31.2(5)

Anhang

C2	7896.3(12)	5775.0(8)	9466.2(11)	28.5(4)
C10	6438.0(13)	4389.8(8)	9035.2(13)	35.2(5)
C6	7263.7(13)	4276.2(8)	9348.2(12)	34.7(5)
C26	4264(3)	5535(2)	8436(3)	28.0(11)
C15	7408.4(14)	7170.8(9)	8236.5(13)	41.4(5)
C16	7279.0(15)	6745.9(10)	7105.3(13)	46.1(6)
C20	6169.5(17)	7227.0(11)	9693.3(15)	56.1(7)
C12	7517.7(19)	4786.8(12)	11103.9(15)	61.3(8)
C13	8982.0(15)	5482.3(14)	11304.0(14)	63.3(8)
C17	8822.5(15)	4806.6(11)	8325.7(15)	51.8(6)
C18	8635.9(17)	3503.8(11)	8578.5(17)	63.1(8)
C19	9291.8(15)	4325.5(14)	9864.7(15)	67.0(8)
C28	4298(2)	3123.0(12)	7154.7(18)	76.8(10)
C11	7555(2)	6095.6(13)	11355.2(15)	72.4(9)
C27	4590(3)	4964.1(19)	8824(3)	42.0(14)
C22	4860.4(18)	6974.7(12)	9577.0(16)	59.0(7)
C21	6124(2)	7876.2(13)	9646.8(18)	82.8(10)
Li1	5359(2)	6410.7(14)	8463.3(19)	32.7(8)
Li2	5617.9(19)	5428.5(14)	7989.9(18)	27.9(7)
C29	3837(2)	3132.1(17)	7571(3)	126.0(19)
C24	4746(3)	7431.2(17)	7504(3)	34.1(10)
C23	5063(3)	6598.2(19)	10238(2)	111.2(14)
Li4	4028(2)	6392.0(15)	7383.5(19)	35.1(8)
Li3	5000	4300(2)	7500	49.2(15)
C25	4610(3)	7818(2)	7499(4)	60.5(16)
C26A	4167(11)	5355(6)	8328(9)	64(5)
C27A	4645(9)	5341(13)	9147(8)	125(9)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Atom U_{11} U_{22} U_{33} U_{23} U_{13} U_{12}

Anhang

Fe1	24.92(15)	18.30(14)	25.48(16)	1.12(11)	5.26(12)	-1.18(11)
Si2	28.4(3)	37.4(3)	40.7(4)	-1.0(3)	3.8(3)	7.7(3)
Si1	34.4(3)	35.6(3)	25.5(3)	2.2(2)	6.6(3)	2.4(3)
O3	29.8(7)	23.3(7)	27.1(7)	1.8(6)	10.1(6)	1.9(6)
O2	48.0(13)	14.9(9)	30.9(11)	0	4.8(10)	0
O1	49.4(10)	34.8(8)	35.5(9)	-9.6(7)	12.3(8)	0.9(7)
N1	36.3(10)	26.1(8)	30.8(10)	5.0(7)	8.1(8)	-5.9(8)
O4	40.2(15)	24.6(12)	150(3)	0	20.0(17)	0
C8	28.5(11)	20.7(9)	28.9(11)	-3.0(8)	4.2(9)	0.3(8)
C1	30.5(11)	22.6(9)	24.1(10)	-1.4(8)	6.1(9)	-1.8(8)
C4	35.6(11)	15.3(8)	26(1)	-1.8(8)	8.1(9)	-2.4(8)
C3	32.6(11)	18.7(9)	25.2(10)	-0.7(8)	6.5(9)	-5.0(8)
C7	27.8(10)	19.1(9)	33.0(12)	-2.8(8)	2.4(9)	1.9(8)
C14	35.1(12)	26(1)	32.1(12)	1.4(9)	11.6(10)	-4.1(9)
C5	28.4(10)	21.3(9)	29.2(11)	-0.8(8)	8.3(9)	0.1(8)
C9	28.1(11)	15.5(8)	41.7(13)	-1.2(9)	6.3(9)	-3.1(8)
C2	26.6(10)	23.0(9)	29.0(11)	-2.2(8)	4.9(9)	-5.8(8)
C10	35.7(12)	21.4(9)	47.9(14)	4.8(9)	16.8(11)	-3.8(9)
C6	36.3(12)	21.2(9)	35.8(12)	7.7(9)	4.2(10)	1.3(9)
C26	23.8(17)	26(2)	29(2)	0.0(19)	5.6(15)	-5.0(18)
C15	45.8(14)	26.7(10)	49.3(15)	-2(1)	17.4(12)	-9.6(10)
C16	53.5(15)	43.9(13)	39.7(14)	9.0(11)	18.2(12)	-8.2(12)
C20	65.4(18)	42.9(14)	46.9(16)	-15.1(12)	10.3(14)	-4.5(13)
C12	82(2)	61.1(17)	43.0(16)	6.6(13)	28.5(15)	-14.7(15)
C13	38.6(14)	101(2)	37.2(15)	13.8(15)	2.6(12)	-2.6(15)
C17	38.2(14)	57.3(16)	58.7(17)	1.7(13)	19.1(13)	4.8(12)
C18	58.9(18)	46.9(15)	78(2)	0.6(15)	22.7(16)	21.8(14)
C19	39.1(15)	93(2)	47.3(17)	5.6(16)	-3.8(13)	2.6(15)
C28	88(2)	36.9(15)	74(2)	-4.7(15)	2.6(19)	-21.9(16)

Anhang

C11	109(3)	67.9(19)	31.2(15)	-2.2(13)	20.8(16)	32.7(18)
C27	41(2)	42(2)	43(3)	20.9(18)	18(2)	10.6(17)
C22	65.9(18)	47.4(15)	66(2)	-4.2(14)	29.3(16)	7.4(14)
C21	111(3)	46.4(17)	66(2)	-8.0(16)	12(2)	-15.8(18)
Li1	37(2)	27.2(17)	27.2(19)	-5.3(15)	6.4(15)	3.8(15)
Li2	28.4(17)	21.7(15)	29.2(18)	-0.4(14)	7.7(15)	-1.5(14)
C29	104(3)	81(3)	221(6)	68(3)	94(4)	19(2)
C24	43(3)	20.3(18)	37(2)	6(2)	15(2)	8.1(18)
C23	128(4)	134(4)	94(3)	38(3)	69(3)	14(3)
Li4	40(2)	33.0(18)	28.4(19)	-3.9(15)	10.2(16)	5.9(16)
Li3	40(3)	21(2)	70(4)	0	6(3)	0
C25	71(4)	23(2)	90(5)	7(3)	37(4)	15(3)
C26A	126(12)	39(7)	58(8)	-32(6)	68(8)	-58(7)
C27A	87(10)	220(20)	51(8)	-9(11)	15(7)	-103(12)

Anhang

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocenboran (145)

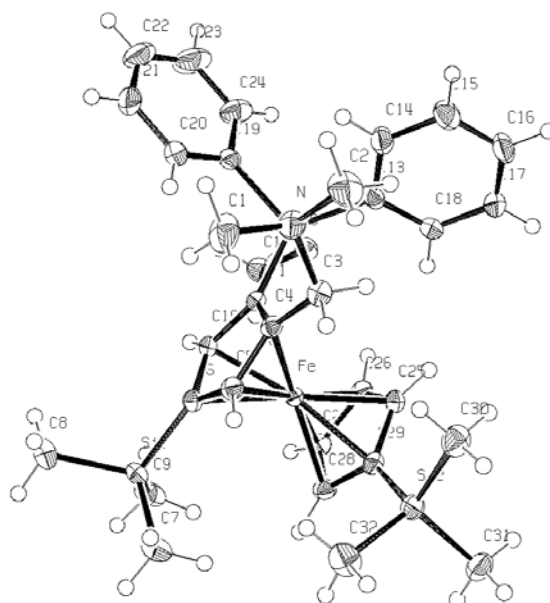


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocenboran (145) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocenboran (145). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	U(eq)
C1	1289(2)	1556(3)	2939.4(15)	46.1(6)
C2	648(2)	2512(3)	1693.4(15)	41.9(5)
C3	3093.7(19)	3107.6(18)	2431.0(11)	22.7(4)
C4	4252.6(18)	2619.9(17)	2876.5(11)	18.5(3)
C5	5010.0(19)	3021.3(18)	3748.0(11)	21.0(4)
C6	5992.1(19)	2307.4(17)	3964.5(11)	20.6(4)
C7	7642(2)	4139(2)	5649.4(12)	33.7(5)
C8	6683(3)	1116(2)	5619.6(14)	49.5(6)
C9	8986(2)	2370(2)	4779.8(13)	36.3(5)
C10	5803.2(18)	1442.7(17)	3196.1(10)	18.8(4)
C11	4741.6(18)	1623.6(16)	2513.7(10)	17.8(3)
C12	6586(2)	65(2)	1486.6(12)	29.9(4)
C13	3418.3(19)	1642.3(17)	583.1(10)	20.9(4)
C14	1954(2)	1250(2)	238.3(12)	28.8(4)
C15	1373(2)	1873(2)	-398.8(13)	35.0(5)
C16	2252(2)	2903(2)	-706.4(12)	32.9(5)
C17	3699(2)	3303.9(19)	-379.5(12)	31.3(5)

Anhang

C18	4280(2)	2681.1(18)	257.1(11)	25.6(4)
C19	3005.9(19)	-1020.8(18)	1317.5(11)	23.1(4)
C20	2270(2)	-1443(2)	1922.7(13)	32.1(5)
C21	1388(2)	-2785(2)	1846.5(15)	43.5(6)
C22	1244(3)	-3705(2)	1163.0(18)	50.7(7)
C23	1952(3)	-3309(2)	553.5(17)	51.2(7)
C24	2826(2)	-1975(2)	628.9(14)	36.9(5)
C25	6765.4(19)	4736.2(17)	2153.2(11)	20.7(4)
C26	7499.7(19)	3807.7(18)	2087.6(11)	22.8(4)
C27	8453.1(18)	3942.2(18)	2889.6(11)	22.2(4)
C28	8308.4(18)	4962.5(17)	3447.0(11)	20.9(4)
C29	7257.8(19)	5484.6(17)	2995.5(11)	20.2(4)
C30	5049(2)	6906(2)	2690.3(14)	34.8(5)
C31	8210(2)	8508.1(19)	3209.1(14)	34.3(5)
C32	6803(3)	7061(2)	4494.5(13)	38.0(5)
Fe	6402.1(2)	3411.4(2)	2997.7(2)	15.71(7)
N	1713.0(16)	2023.5(16)	2191.4(10)	28.7(4)
O	5634.4(13)	711.6(12)	1096.7(7)	23.6(3)
Si1	7311.8(6)	2489.5(5)	4994.1(3)	25.26(12)
Si2	6805.3(6)	6973.2(5)	3354.2(3)	23.56(12)
Si3	4220.6(5)	755.2(5)	1397.2(3)	18.36(11)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(dimethoxyphenylsila)ferrocenboran (145). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C1	27.0(12)	57.0(15)	58.3(15)	29.8(12)	19.2(11)	9.6(11)
C2	23.9(11)	55.8(14)	49.6(14)	14.7(11)	8.1(10)	17.9(11)
C3	22.1(9)	23.3(9)	25.2(9)	4.7(7)	8.9(8)	8.8(8)
C4	16.7(9)	18.5(8)	20.2(8)	4.0(7)	8.1(7)	3.1(7)
C5	22.0(9)	21.9(9)	18.6(8)	3.4(7)	10.0(7)	3.7(7)
C6	22.2(9)	21.2(9)	16.4(8)	5.2(7)	6.2(7)	3.3(7)
C7	37.2(12)	36.2(11)	21.8(10)	-2.3(8)	2.2(9)	9.7(10)
C8	64.2(17)	41.1(13)	28.6(11)	16.2(10)	-1.2(11)	4.9(12)
C9	34.7(12)	40.2(12)	29.5(11)	-1.7(9)	-6.6(9)	18.3(10)
C10	20.0(9)	16.8(8)	18.0(8)	5.6(6)	4.1(7)	3.9(7)
C11	17.4(9)	16.2(8)	17.2(8)	3.7(6)	4.1(7)	2.1(7)

Anhang

C12	27.2(11)	33.1(11)	29.4(10)	0.7(8)	3.8(8)	13.7(9)
C13	27.4(10)	20.3(9)	15.0(8)	1.5(7)	3.3(7)	9.7(8)
C14	26.2(11)	30.1(10)	30.5(10)	12.2(8)	5.7(8)	9.7(9)
C15	26.9(11)	42.2(12)	35.9(11)	14.2(9)	2.1(9)	14.2(10)
C16	41.6(12)	32.5(11)	26.4(10)	11.7(8)	3.5(9)	17.4(10)
C17	38.8(12)	26(1)	23.2(10)	8.1(8)	4.3(9)	4.6(9)
C18	28.5(10)	24.6(9)	17.7(9)	1.1(7)	0.0(7)	5.4(8)
C19	21.5(9)	19.5(9)	23.6(9)	4.0(7)	-3.1(7)	6.5(7)
C20	32.7(11)	28.2(10)	28.5(10)	10.1(8)	-1.7(9)	6.2(9)
C21	34.5(13)	37.9(12)	45.9(13)	23.5(11)	-3.3(10)	1.4(10)
C22	37.5(14)	20.9(10)	73.1(18)	11.8(11)	-13.1(12)	-0.3(10)
C23	48.7(15)	26.3(11)	62.6(16)	-12.1(11)	-1.5(13)	5.9(11)
C24	35.2(12)	27.1(10)	41.6(12)	-5.8(9)	4.6(10)	7.4(9)
C25	22.8(9)	21.0(9)	17.7(8)	6.4(7)	6.6(7)	5.0(7)
C26	24.5(10)	23.3(9)	21.1(9)	3.1(7)	12.4(8)	4.1(8)
C27	16.1(9)	24.0(9)	27.4(9)	3.6(7)	8.5(7)	6.1(7)
C28	17.0(9)	20.9(9)	21.4(9)	1.2(7)	3.6(7)	2.9(7)
C29	20.8(9)	17.5(8)	21.7(9)	5.1(7)	7.1(7)	4.0(7)
C30	30.7(11)	30.6(11)	44.8(12)	10.1(9)	6.4(9)	14.4(9)
C31	34.6(12)	21.9(10)	41.5(12)	6.6(8)	3.0(9)	7.3(9)
C32	50.6(14)	40.1(12)	31.7(11)	2.3(9)	13.1(10)	26.2(11)
Fe	16.31(13)	16.28(13)	14.06(12)	2.38(9)	4.02(9)	4.77(10)
N	16.8(8)	32.7(9)	36.6(9)	11.9(7)	7.0(7)	6.9(7)
O	26.3(7)	25.1(6)	20.3(6)	1.9(5)	4.9(5)	11.2(6)
Si1	31.5(3)	24.7(3)	15.0(2)	3.18(19)	0.4(2)	7.2(2)
Si2	26.9(3)	19.3(2)	25.6(3)	3.7(2)	6.1(2)	9.7(2)
Si3	20.2(3)	17.3(2)	15.1(2)	2.30(18)	1.13(19)	5.3(2)

Anhang

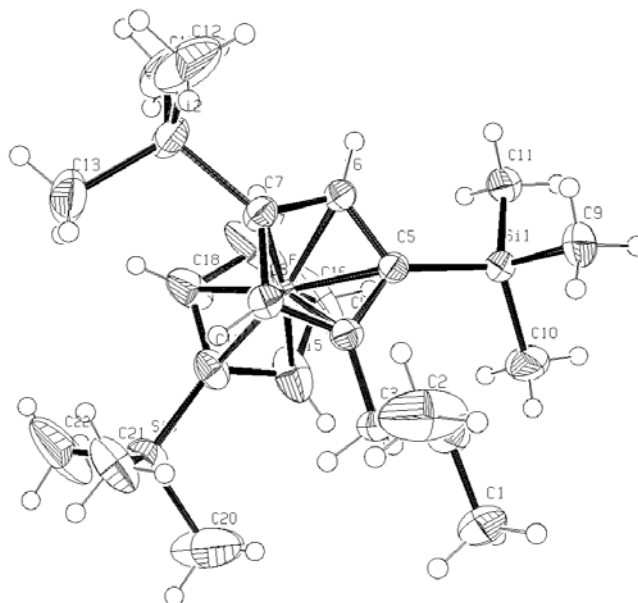
5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125)

Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	U(eq)
C1	9167(4)	7592(2)	5643(4)	89.2(15)
C2	9767(5)	7282(3)	7515(4)	112(2)
C3	8403(2)	6550.9(14)	6493(2)	37.1(5)
C4	7921.3(19)	6255.8(13)	7468.6(18)	28.1(4)
C5	6977.0(19)	6545.8(12)	7881.4(17)	27.6(4)
C6	6817.2(18)	6074.3(13)	8793.9(18)	28.6(4)
C7	7636.6(19)	5506.7(14)	8960(2)	32.2(5)
C8	8320.3(18)	5633.9(13)	8130.6(19)	29.7(5)
C9	6786(3)	8240.4(16)	8136(3)	58.1(8)
C10	5936(3)	7539(2)	5950(2)	59.9(9)
C11	4766(2)	7241.2(16)	7910(2)	45.5(6)

Anhang

C12	8461(4)	5223(3)	11332(3)	91.0(15)
C13	8622(4)	3991(2)	9682(4)	93.2(16)
C14	6424(3)	4433(3)	10303(4)	79.9(13)
C15	6171(3)	5262.9(19)	5816(3)	59.3(9)
C16	5336(3)	5394(3)	6448(4)	87.1(17)
C17	5382(3)	4835(3)	7247(4)	85.2(17)
C18	6275(3)	4347.4(17)	7124(3)	58.4(9)
C19	6777(2)	4609.8(14)	6220(2)	39.3(6)
C20	7892(4)	4641(4)	4212(4)	113(2)
C21	9228(3)	4246(2)	6307(3)	70.7(11)
C22	7503(4)	3155(2)	5343(6)	134(3)
Fe	6778.7(3)	5433.5(2)	7416.4(3)	30.41(11)
N	8863(3)	7296.9(14)	6676(3)	65.3(9)
Si1	6125.6(6)	7384.9(4)	7455.4(6)	37.14(17)
Si2	7775.1(6)	4780.1(5)	10054.6(7)	49.4(2)
Si3	7858.6(6)	4150.9(5)	5551.5(6)	42.67(19)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C1	126(4)	53(2)	107(3)	17(2)	83(3)	-6(2)
C2	139(4)	126(4)	81(3)	-48(3)	48(3)	-101(4)
C3	46.8(14)	35.8(13)	31.2(12)	-0.2(10)	14.7(10)	-2.4(11)
C4	34.3(11)	25.4(10)	24.8(10)	-4.0(8)	4.5(9)	-5.9(9)
C5	36.6(12)	24(1)	22.2(10)	-1.7(8)	3.1(8)	-1.9(9)
C6	31.4(11)	27.7(11)	26.8(11)	1.1(9)	4.5(9)	-0.4(9)
C7	30.4(11)	32.7(12)	33.9(12)	7.2(9)	5.6(9)	0.0(9)
C8	26.3(11)	30.8(11)	31.8(12)	-0.4(9)	3.2(9)	-1.8(9)
C9	86(2)	26.5(13)	67(2)	-4.0(13)	27.9(18)	-1.1(14)

Anhang

C10	77(2)	69(2)	36.4(15)	20.2(14)	16.8(15)	29.0(18)
C11	53.8(16)	42.7(15)	42.0(15)	6.1(12)	14.3(12)	16.0(13)
C12	88(3)	126(4)	56(2)	43(2)	-6(2)	6(3)
C13	96(3)	67(2)	130(4)	54(3)	65(3)	47(2)
C14	56(2)	91(3)	100(3)	51(2)	37(2)	5.5(19)
C15	58.3(19)	50.5(17)	60.6(19)	-26.3(15)	-26.1(15)	11.9(14)
C16	36.3(17)	86(3)	129(4)	-74(3)	-25(2)	14.0(18)
C17	39.4(17)	85(3)	139(4)	-82(3)	42(2)	-33.8(19)
C18	62.1(19)	38.1(15)	83(2)	-29.0(15)	39.3(17)	-24.9(14)
C19	35.8(13)	31.6(12)	50.3(15)	-14.0(11)	4.9(11)	-4.5(10)
C20	78(3)	199(6)	69(3)	44(3)	31(2)	31(3)
C21	51.6(19)	71(2)	90(3)	-26(2)	8.4(18)	20.9(17)
C22	110(4)	59(3)	253(8)	-81(4)	106(5)	-26(2)
Fe	25.24(17)	25.39(17)	40.5(2)	-8.65(13)	3.87(13)	-1.53(12)
N	101(2)	32.4(12)	75.1(19)	-6.6(12)	60.5(18)	-19.2(13)
Si1	55.3(4)	28.3(3)	30.1(3)	5.6(3)	13.9(3)	10.0(3)
Si2	40.3(4)	52.5(5)	59.4(5)	32.0(4)	21.5(4)	16.3(3)
Si3	44.0(4)	44.1(4)	42.1(4)	-11.2(3)	14.1(3)	-1.3(3)

Anhang

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylphenylsilanol)ferrocen (146)

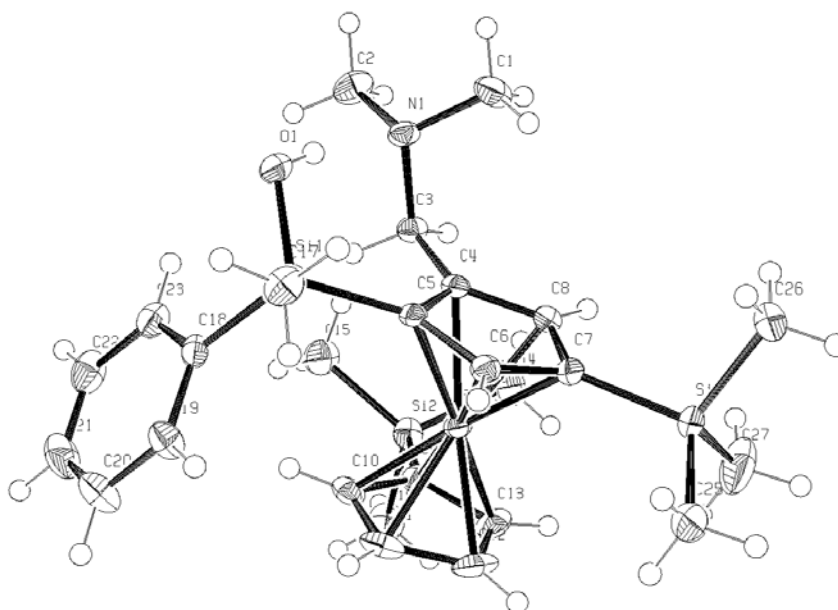


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylphenylsilanol)ferrocen (146) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylphenylsilanol)ferrocen (146). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	U(eq)
Fe1	9945.8(2)	6671.7(2)	1254.2(2)	16.37(8)
Si1	11914.9(5)	6744.4(3)	2195.2(2)	16.76(12)
Si2	10808.4(6)	8052.8(4)	391.0(2)	23.52(14)
Si3	8729.0(5)	4718.8(4)	1120.2(2)	24.64(15)
N1	13815.3(14)	6147.1(10)	1288.1(6)	19.9(4)
O1	13345.5(13)	6591.6(10)	2142.9(5)	24.9(4)
C1	13871(2)	5332.9(13)	1124.5(8)	28.9(5)
C2	14901.0(19)	6576.5(15)	1173.6(8)	31.2(5)
C3	12767.5(17)	6567.9(12)	1109.4(7)	19.3(4)
C4	11629.7(17)	6207.4(11)	1267.2(7)	17.2(4)
C5	11171.3(17)	6262.9(11)	1711.9(7)	15.9(4)
C6	10105.1(17)	5790.1(11)	1716.2(7)	17.8(4)

Anhang

C7	9893.0(18)	5446.3(12)	1290.0(7)	20.2(4)
C8	10857.3(18)	5709.4(12)	1016.4(7)	20.3(4)
C9	9855.6(18)	7657.5(12)	842.4(7)	20.8(4)
C10	9806.9(19)	7888.1(12)	1297.9(7)	22.9(5)
C11	8814(2)	7517.0(13)	1503.4(8)	29.1(5)
C12	8233(2)	7053.3(14)	1178.1(9)	32.4(6)
C13	8864.7(19)	7133.6(13)	775.5(8)	26.7(5)
C14	11065(2)	7263.4(15)	-30.7(8)	37.5(6)
C15	12255(2)	8457.7(14)	596.2(9)	33.4(6)
C16	9948(2)	8886.0(14)	136.8(9)	37.3(6)
C17	11357(2)	6275.4(14)	2706.4(7)	26.4(5)
C18	11674.9(19)	7845.7(12)	2224.7(7)	20.0(4)
C19	10651(2)	8168.9(13)	2411.5(8)	27.3(5)
C20	10463(2)	8983.5(14)	2417.4(9)	36.9(6)
C21	11299(2)	9491.2(14)	2239.6(9)	37.7(6)
C22	12323(2)	9188.8(14)	2056.6(8)	32.7(6)
C23	12510(2)	8370.6(13)	2047.7(7)	25.8(5)
C25	7414(2)	4753.9(15)	1494.8(10)	43.6(7)
C26	9392(2)	3711.9(14)	1170.3(9)	35.0(6)
C27	8289(3)	4912.8(17)	537.5(10)	53.9(9)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylphenylsilylanol)ferrocen (146). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Fe1	12.57(14)	16.38(14)	20.15(15)	1.30(12)	-1.80(11)	1.16(11)
Si1	15.0(3)	16.7(3)	18.6(3)	-0.3(2)	-2.3(2)	-0.4(2)
Si2	28.7(3)	20.5(3)	21.3(3)	3.2(3)	-2.0(3)	-1.4(2)
Si3	19.5(3)	18.6(3)	35.7(4)	-6.6(3)	-5.5(3)	-2.5(2)
N1	11.7(8)	21.1(9)	27(1)	2.3(8)	1.6(7)	-0.1(7)

Anhang

O1	17.1(8)	30.6(9)	27.1(9)	-6.7(7)	-3.3(7)	2.2(7)
C1	24.9(12)	23.3(11)	38.6(14)	0.1(10)	6.1(10)	5.9(9)
C2	18.1(11)	39.2(14)	36.3(14)	5.2(11)	2.5(10)	-5.4(10)
C3	17(1)	19.3(10)	21.6(11)	3.2(9)	-0.8(8)	1.5(8)
C4	14.4(9)	15.5(10)	21.6(10)	0.2(8)	-0.8(8)	3.4(8)
C5	12.9(9)	13.5(9)	21.3(10)	1.0(8)	-2.8(8)	2.4(8)
C6	16.5(10)	15.0(9)	22.0(11)	2.2(8)	-0.7(8)	0.3(8)
C7	16.2(10)	16.5(10)	27.9(12)	-1.8(9)	-3.6(9)	0.9(8)
C8	19.1(10)	18.6(10)	23.3(11)	-4.1(9)	-2.1(9)	4.1(8)
C9	19.8(11)	18.6(10)	24.2(11)	3.7(9)	-4.9(9)	1.9(8)
C10	26.1(12)	17.5(10)	25.0(12)	1.0(9)	-1.0(9)	8.3(9)
C11	26.2(12)	27.5(12)	33.4(14)	6.4(10)	8(1)	14.2(10)
C12	12.8(11)	33.7(13)	50.7(16)	13.6(12)	0.1(10)	5.3(9)
C13	21.4(11)	27.8(12)	30.8(13)	6.3(10)	-12(1)	1.9(9)
C14	46.6(16)	38.1(14)	27.7(13)	-4.3(11)	2.2(12)	-1.9(12)
C15	31.8(13)	26.7(13)	41.8(15)	5.0(11)	0.6(11)	-5.1(10)
C16	47.8(16)	31.3(13)	32.7(14)	9.1(11)	-8.9(12)	-0.1(12)
C17	26.1(12)	29.2(12)	23.9(12)	4(1)	-1.7(9)	-2.8(10)
C18	23.4(11)	17.3(10)	19.3(11)	-2.0(8)	-4.1(9)	-2.0(8)
C19	31.9(13)	20.2(11)	29.8(13)	-1.4(9)	6.1(10)	0.7(9)
C20	43.5(15)	26.8(13)	40.4(15)	-5.2(11)	8.6(12)	9.5(11)
C21	55.0(17)	16.6(11)	41.6(15)	-3.0(11)	-2.6(13)	3.1(11)
C22	39.2(15)	22.0(12)	37.0(14)	6.1(10)	-7.4(11)	-11.6(10)
C23	24.5(11)	25.5(11)	27.4(12)	1.7(10)	-4.4(9)	-3.9(10)
C25	24.3(13)	32.1(14)	74(2)	-17.2(14)	5.4(13)	-5.4(11)
C26	30.2(13)	22.9(12)	51.8(17)	-11.0(11)	-1.3(12)	-0.4(10)
C27	64(2)	46.1(17)	51.3(19)	-1.2(14)	-30.2(16)	-16.9(15)

Anhang

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-[2]-tetramethyldisila-1-(dimethylmethoxy)ferrocenophan (162)

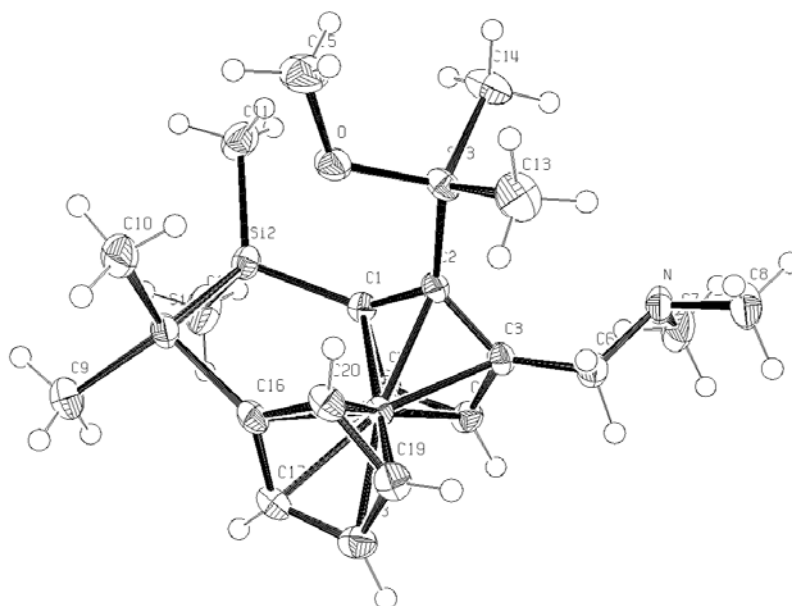


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-[2]-tetramethyldisila-1-(dimethylmethoxy)ferrocenophan (162) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-[2]-tetramethyldisila-1-(dimethylmethoxy)ferrocenophan (162). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	U(eq)
Fe	2201.9(2)	3642.1(3)	2545.1(2)	18.46(8)
O	2806.0(7)	6746.3(15)	4440.1(9)	29.2(3)
N	463.2(8)	3164(2)	3979.9(11)	30.4(4)
Si1	3793.9(3)	5379.2(6)	2918.4(4)	25.21(12)
Si2	3725.5(3)	3699.8(6)	4183.0(4)	23.09(12)
Si3	2082.6(3)	5803.2(6)	4523.4(3)	21.99(11)
C1	2764.4(9)	3053.6(19)	3875.0(11)	19.3(3)
C2	2118.4(9)	3912(2)	3898.1(11)	19.1(3)
C3	1525.8(9)	3007(2)	3348.1(12)	21.2(3)
C4	1799.1(9)	1632(2)	3004.8(12)	23.9(4)
C5	2546.5(10)	1656(2)	3318.5(12)	23.0(4)

Anhang

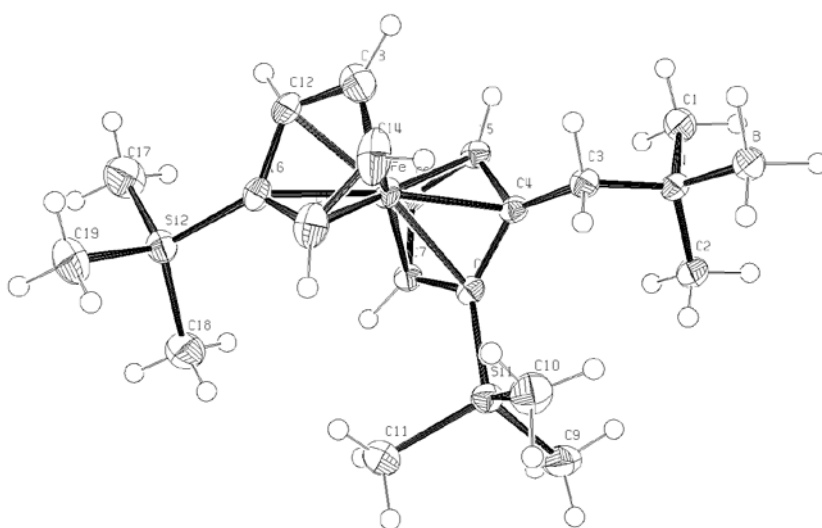
C6	754.1(9)	3430(2)	3157.2(13)	26.8(4)
C7	430.2(11)	1482(3)	4166.5(16)	42.0(5)
C8	-244.5(11)	3858(3)	3815.9(17)	44.9(6)
C9	4474.6(11)	4632(3)	2306.6(16)	41.5(5)
C10	3928.3(11)	7542(2)	3133.7(15)	36.3(5)
C11	4062.8(11)	4420(3)	5425.4(14)	35.3(5)
C12	4263.6(11)	1877(3)	4101.0(18)	43.6(5)
C13	1304.4(11)	7088(3)	4011.6(16)	39.9(5)
C14	2096.8(13)	5443(2)	5780.2(14)	36.1(5)
C15	3048.8(14)	8110(3)	4999.9(17)	46.3(6)
C16	2903.2(10)	5063(2)	2088.0(12)	22.6(4)
C17	2700.9(10)	3737(2)	1467.4(12)	25.9(4)
C18	1954.4(10)	3755(2)	1092.5(13)	28.1(4)
C19	1679.7(10)	5090(2)	1471.9(13)	27.1(4)
C20	2258.3(10)	5885(2)	2078.2(12)	24.5(4)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-[2]-tetramethyldisila-1-(dimethylmethoxy)ferrocenophan (162). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Fe	19.80(13)	16.86(13)	19.72(13)	0.46(9)	6.76(10)	0.39(9)
O	37.4(8)	24.0(6)	30.2(7)	-7.0(5)	15.7(6)	-7.5(6)
N	17.6(7)	46.8(10)	27.8(8)	1.3(7)	7.8(6)	-3.2(7)
Si1	23.3(3)	26.4(3)	29.2(3)	-2.5(2)	12.7(2)	-4.2(2)
Si2	18.4(2)	20.8(2)	29.7(3)	0.54(19)	5.0(2)	0.65(19)
Si3	27.7(3)	17.8(2)	23.2(2)	0.70(18)	11.6(2)	3.05(19)
C1	21.2(8)	17.3(8)	19.5(8)	3.5(6)	5.2(6)	0.1(7)
C2	19.6(8)	20.4(8)	18.7(8)	2.5(6)	7.2(6)	0.2(6)
C3	20.7(8)	22.4(8)	22.1(8)	3.2(7)	8.2(7)	-1.3(7)
C4	26.2(9)	20.0(9)	25.1(9)	0.3(7)	5.9(7)	-5.8(7)

Anhang

C5	27.3(9)	15.7(8)	27.3(9)	2.2(7)	9.3(7)	1.3(7)
C6	21.6(9)	34.1(10)	24.7(9)	3.9(8)	5.8(7)	-2.2(8)
C7	29.2(11)	56.5(14)	40.6(12)	14.5(10)	9.2(9)	-11.8(10)
C8	24.4(11)	68.0(16)	45.3(12)	-1.4(11)	14.0(9)	0.3(10)
C9	28.5(11)	58.0(14)	43.0(12)	-8.3(11)	18.1(9)	-2.1(10)
C10	40.9(12)	30.3(11)	42.0(11)	-2.0(9)	18.8(9)	-11.8(9)
C11	29.2(10)	42.4(12)	29.7(10)	3.5(9)	-1.5(8)	-5.3(9)
C12	25.7(10)	30.9(11)	73.8(16)	0.3(11)	11.5(10)	7.0(9)
C13	39.9(12)	31.7(11)	49.4(13)	2.4(10)	13.5(10)	14.3(9)
C14	60.3(14)	24.8(10)	29.1(10)	-1.6(8)	22.5(10)	-0.4(9)
C15	66.2(16)	33.5(12)	45.0(13)	-14.6(10)	24.9(11)	-17.3(11)
C16	28.3(9)	21.9(9)	21.2(8)	3.7(7)	12.6(7)	-1.2(7)
C17	32(1)	26.9(9)	22.4(9)	0.3(7)	13.5(8)	2.3(8)
C18	33.3(10)	29.1(10)	21.2(9)	0.2(7)	5.4(7)	-1.2(8)
C19	27.4(9)	28.3(10)	25.5(9)	6.8(7)	6.2(7)	4.3(8)
C20	33.9(10)	19.0(8)	23.5(9)	5.6(7)	12.9(8)	1.5(7)

1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117)Abbildung: Molekülstruktur von 1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Anhang

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	U(eq)
B	9087(3)	8845(2)	10877(4)	29.3(8)
C1	9987.1(18)	8485.2(18)	9031(3)	30.2(7)
C2	8531(2)	7852.5(16)	8761(3)	29.1(7)
C3	8640.0(18)	9351.5(15)	8248(3)	21.1(6)
C4	8474.9(17)	9242.4(15)	6632(3)	19.4(6)
C5	9130.6(18)	9403.6(16)	5831(3)	22.0(6)
C6	8724.2(19)	9306.7(15)	4321(3)	23.4(6)
C7	7816.3(18)	9080.4(15)	4166(3)	21.2(6)
C8	7637.4(17)	9029.1(15)	5590(3)	19.2(6)
C9	6438(2)	7566.0(18)	5991(4)	40.4(8)
C10	6253(2)	9230(2)	7475(3)	38.6(8)
C11	5627(2)	9039(2)	4180(4)	37.8(8)
C12	8384(2)	11341.9(16)	4476(3)	31.8(7)
C13	8586(2)	11333.8(17)	6032(4)	40.0(8)
C14	7772(3)	11162.5(18)	6415(3)	41.8(9)
C15	7086(2)	11062.4(17)	5111(3)	33.1(7)
C16	7451.6(19)	11175.4(16)	3881(3)	25.5(6)
C17	7683(2)	11412(2)	801(4)	48.1(9)
C18	6183(2)	10293(2)	1176(4)	44.2(9)
C19	6071(2)	12145(2)	1692(4)	48.4(9)
Fe	8080.3(3)	10204.7(2)	5213.6(4)	21.24(12)
N	9062.9(14)	8626.8(13)	9189(2)	21.6(5)
Si1	6510.9(5)	8726.2(5)	5838.5(9)	26.2(2)
Si2	6850.6(5)	11236.0(5)	1895.2(9)	29.0(2)

Anhang

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
B	33(2)	30.4(19)	22.7(19)	-0.4(15)	4.7(15)	-7.0(17)
C1	22.3(15)	31.3(16)	35.4(18)	6.5(14)	4.4(14)	4.8(13)
C2	34.9(17)	19.6(15)	29.9(17)	1.9(12)	2.5(14)	-6.5(13)
C3	23.3(15)	15.1(13)	24.4(15)	-1.2(11)	5.4(12)	0.4(11)
C4	20.5(14)	14.1(13)	23.7(15)	-1.1(11)	6.1(12)	-0.8(11)
C5	20.4(14)	17.7(13)	28.2(16)	-0.7(12)	6.6(12)	0.7(12)
C6	30.6(16)	16.4(14)	26.0(16)	1.0(12)	12.6(13)	2.4(12)
C7	25.8(15)	15.1(13)	21.6(15)	-3.2(11)	3.8(12)	-1.8(11)
C8	22.3(15)	12.6(13)	23.7(15)	-0.8(11)	7.6(12)	2.3(11)
C9	31.3(18)	32.8(18)	54(2)	4.3(16)	4.6(16)	-8.5(14)
C10	31.8(18)	49(2)	40(2)	3.7(16)	18.6(16)	3.8(15)
C11	25.1(17)	42.9(19)	43(2)	7.2(15)	4.7(15)	0.9(14)
C12	34.8(18)	14.5(14)	41.7(19)	6.9(13)	1.5(15)	-2.4(13)
C13	52(2)	15.9(15)	40(2)	-5.4(14)	-10.2(17)	-0.2(14)
C14	80(3)	19.1(15)	26.9(18)	-3.5(13)	13.7(18)	17.2(16)
C15	44(2)	19.5(15)	38.0(19)	0.3(13)	14.2(16)	11.6(14)
C16	29.9(16)	13.8(13)	31.6(17)	2.6(12)	5.6(13)	2.6(12)
C17	45(2)	66(2)	35(2)	3.6(17)	12.5(17)	-2.8(18)
C18	44(2)	50(2)	34.1(19)	0.8(16)	0.9(16)	-10.7(17)
C19	37(2)	49(2)	54(2)	12.8(18)	1.3(18)	12.1(16)
Fe	27.5(2)	14.5(2)	21.3(2)	-0.73(17)	5.43(17)	0.71(18)
N	23.3(12)	16.4(11)	24.5(13)	2(1)	4.9(10)	-2.2(9)
Si1	20.5(4)	26.5(4)	31.8(5)	3.4(4)	6.9(4)	-0.6(3)
Si2	25.3(4)	31.5(5)	29.0(5)	5.8(4)	4.9(4)	1.4(4)

Anhang

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methyldiphenylsila)ferrocen (126)

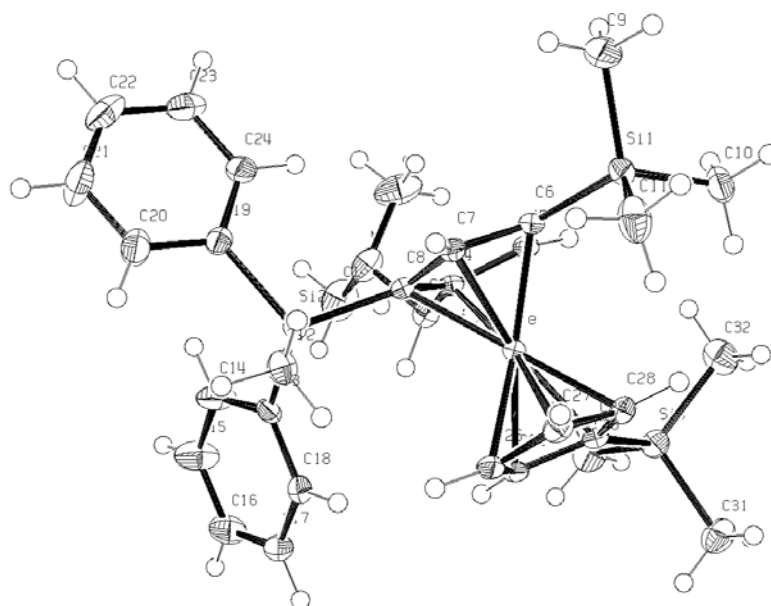


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methyldiphenylsila)ferrocen (126) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methyldiphenylsila)ferrocen (126). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Atom	x	y	z	U(eq)
C1	-4439(2)	7311(3)	1629.3(17)	42.3(6)
C2	-3780(3)	6594(3)	2975.0(17)	45.8(6)
C3	-1954(2)	7968.5(18)	2370.9(12)	20.6(4)
C4	-764.2(19)	7513.9(17)	2850.1(11)	17.1(4)
C5	-29(2)	7937.5(18)	3709.2(12)	19.7(4)
C6	1021(2)	7270.0(18)	3951.8(11)	19.0(4)
C7	886.9(19)	6413.9(17)	3213.3(11)	18.0(4)
C8	-211.2(19)	6544.3(17)	2527.4(11)	16.1(4)
C9	1729(3)	6019(2)	5586.2(15)	52.8(8)
C10	2623(2)	9072(2)	5622.1(13)	30.9(5)
C11	4076(2)	7403(2)	4776.4(14)	36.7(5)

Anhang

C12	899(2)	5216(2)	1292.8(13)	25.1(4)
C13	-1459(2)	6430.8(18)	598.6(11)	19.5(4)
C14	-2907(2)	5952(2)	162.0(14)	32.3(5)
C15	-3435(2)	6572(3)	-505.9(15)	40.6(6)
C16	-2518(2)	7686(2)	-751.8(14)	34.1(5)
C17	-1080(2)	8168(2)	-338.8(13)	29.4(5)
C18	-561(2)	7546.7(19)	327.4(12)	24.4(4)
C19	-2153(2)	3854.4(18)	1448.8(12)	21.0(4)
C20	-2408(2)	2790(2)	829.2(14)	35.1(5)
C21	-3414(3)	1517(2)	809.4(17)	45.7(6)
C22	-4182(2)	1285(2)	1409.5(16)	39.5(6)
C23	-3961(2)	2316(2)	2022.7(14)	34.1(5)
C24	-2955(2)	3590(2)	2039.0(12)	25.2(4)
C25	1768(2)	9791.6(18)	2154.6(12)	19.8(4)
C26	2576(2)	8908.2(18)	2098.0(12)	20.8(4)
C27	3513(2)	9019.1(18)	2894.0(12)	20.9(4)
C28	3301(2)	9984.5(18)	3439.2(12)	19.6(4)
C29	2211(2)	10488.5(17)	2986.8(11)	18.3(4)
C30	-65(2)	11893(2)	2674.6(15)	36.5(5)
C31	3114(2)	13530(2)	3225.1(15)	33.2(5)
C32	1659(3)	11942(2)	4466.1(14)	34.1(5)
Fe	1414.6(3)	8391.4(2)	2980.1(2)	14.31(8)
N	-3358.0(17)	6895.1(16)	2198.4(11)	28.3(4)
Si1	2344.5(6)	7452.0(5)	4977.2(3)	24.82(13)
Si2	-734.3(5)	5545.9(5)	1472.5(3)	16.91(12)
Si3	1698.9(6)	11941.0(5)	3345.8(3)	22.01(13)

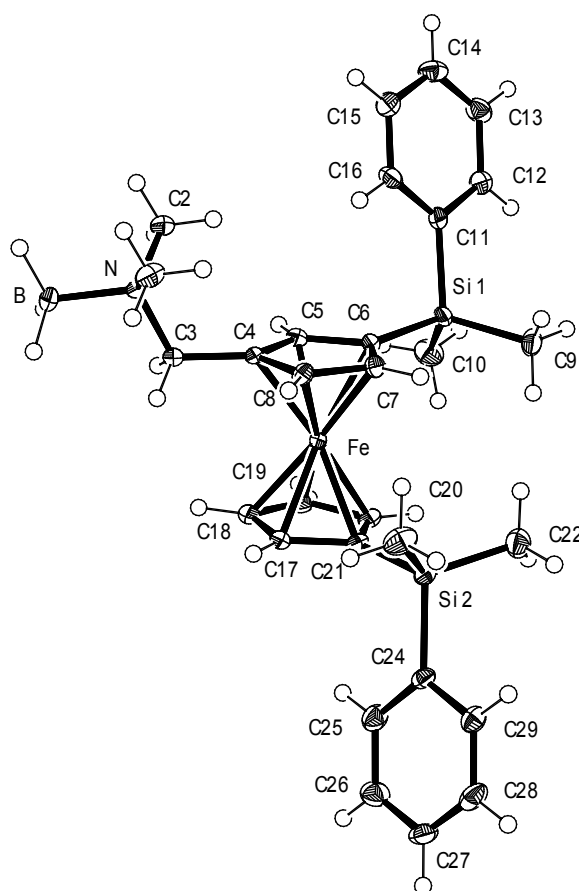
Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-(methylidiphenylsila)ferrocen (126). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hka^*b^*U^{12}]$.

Anhang

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
C1	22.5(11)	45.8(14)	55.9(16)	2.8(12)	1.1(11)	14.3(10)
C2	27.1(12)	47.8(14)	70.6(19)	26.5(13)	25.1(12)	12.3(11)
C3	19.1(9)	21.2(9)	22.6(10)	2.1(8)	6.3(8)	7.6(8)
C4	16.2(9)	16.5(8)	18.3(9)	4.7(7)	8.0(7)	1.9(7)
C5	19.6(9)	20.4(9)	18.1(9)	3.1(7)	9.8(8)	1.8(8)
C6	22.8(10)	17.5(9)	14.2(9)	4.5(7)	5.9(8)	1.9(8)
C7	19.5(9)	15.1(8)	17.6(9)	4.7(7)	3.8(8)	3.7(7)
C8	17.0(9)	13.5(8)	16.0(9)	3.0(7)	5.6(7)	1.5(7)
C9	67.0(18)	39.4(13)	28.9(13)	17.1(11)	-7.3(12)	-1.9(13)
C10	31.6(12)	34.8(11)	20.3(11)	-2.8(9)	1.1(9)	7.5(10)
C11	34.2(12)	38.6(12)	32.7(13)	-3.9(10)	-6.2(10)	17.3(10)
C12	27.1(11)	25.5(10)	23.3(11)	-0.6(8)	6.3(9)	10.3(9)
C13	26.3(10)	20.3(9)	13.5(9)	1.8(7)	6.9(8)	8.4(8)
C14	25.1(11)	40.2(12)	32.1(12)	19.7(10)	8.4(9)	8.6(10)
C15	23.5(11)	59.0(15)	37.9(14)	25.3(12)	3.7(10)	12.3(11)
C16	40.5(13)	38.2(12)	27.4(12)	16.9(10)	7(1)	17.8(11)
C17	39.8(13)	22.4(10)	22.4(11)	7.2(8)	7.1(9)	5.3(9)
C18	28.2(11)	21.2(9)	17.3(10)	-0.2(8)	1.7(8)	2.5(8)
C19	22.3(10)	17.1(9)	20.6(10)	4.0(7)	-0.7(8)	6.4(8)
C20	36.3(13)	28.2(11)	34.6(13)	-6.2(9)	10.9(10)	2.1(10)
C21	44.9(15)	25.3(12)	54.6(16)	-11.9(11)	7.9(13)	0.4(11)
C22	29.3(12)	21.9(11)	57.3(16)	10.7(10)	2.3(11)	0.1(9)
C23	29.6(12)	34.5(12)	36.6(13)	18.1(10)	8.1(10)	6.8(10)
C24	28.3(11)	24.6(10)	21.3(10)	7.6(8)	3.7(8)	8.2(9)
C25	21(1)	19.5(9)	17.1(9)	7.3(7)	6.3(8)	2.6(8)
C26	21.7(10)	20.3(9)	20.2(10)	2.7(7)	11.3(8)	2.5(8)
C27	15.7(9)	20.7(9)	27.1(11)	2.7(8)	8.3(8)	4.9(8)

Anhang

C28	16.4(9)	18.6(9)	19.9(10)	1.2(7)	3.1(8)	1.8(7)
C29	19.8(9)	15.1(8)	19.0(9)	5.4(7)	7.1(8)	2.6(7)
C30	32.2(12)	31.5(11)	45.9(14)	5.8(10)	3.0(11)	15.4(10)
C31	36.5(12)	19.3(10)	42.5(13)	5.0(9)	8.0(11)	8.8(9)
C32	42.8(13)	34.9(12)	31.9(12)	1.2(9)	13.5(10)	20.5(10)
Fe	15.18(14)	14.34(13)	13.13(14)	2.29(10)	4.08(10)	4.13(10)
N	15.5(8)	25.1(9)	42.6(11)	3.2(8)	4.7(8)	6.6(7)
Si1	29.5(3)	22.4(3)	16.0(3)	3.5(2)	-1.2(2)	4.3(2)
Si2	20.4(3)	16.0(2)	13.3(3)	1.81(19)	3.5(2)	5.2(2)
Si3	24.8(3)	17.5(3)	25.2(3)	3.1(2)	6.4(2)	8.9(2)

1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117)Abbildung: Molekülstruktur von 1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Anhang

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
B	6650(2)	4925(1)	-2293(3)	23(1)
C(1)	7253(1)	3802(1)	-3458(3)	25(1)
C(2)	5879(1)	3838(1)	-3238(3)	23(1)
C(3)	6661(1)	3714(1)	-942(2)	16(1)
C(4)	6565(1)	2907(1)	-883(3)	14(1)
C(5)	5866(1)	2534(1)	-566(3)	15(1)
C(6)	5997(2)	1767(1)	-571(3)	17(1)
C(7)	6806(2)	1675(1)	-885(3)	17(1)
C(8)	7149(2)	2366(1)	-1065(3)	16(1)
C(9)	5662(2)	138(1)	-240(3)	27(1)
C(10)	4578(2)	1259(2)	1176(3)	30(1)
C(11)	4672(2)	1120(1)	-2229(3)	18(1)
C(12)	4014(2)	696(1)	-2452(3)	23(1)
C(13)	3597(2)	720(2)	-3807(3)	25(1)
C(14)	3831(2)	1178(2)	-4946(3)	25(1)
C(15)	4473(2)	1614(1)	-4739(3)	24(1)
C(16)	4886(2)	1585(1)	-3404(3)	20(1)
C(17)	7484(2)	2644(1)	2529(3)	21(1)
C(18)	6783(2)	3027(1)	2745(3)	22(1)
C(19)	6209(2)	2510(2)	3100(3)	23(1)
C(20)	6553(2)	1807(1)	3103(3)	20(1)
C(21)	7354(2)	1880(1)	2744(3)	18(1)
C(22)	7660(2)	244(1)	2365(3)	29(1)
C(23)	8756(2)	1346(2)	988(3)	29(1)
C(24)	8690(2)	1167(1)	4383(3)	18(1)
C(25)	8576(2)	1670(1)	5533(3)	25(1)
C(26)	9027(2)	1663(2)	6834(3)	28(1)
C(27)	9606(2)	1156(2)	6997(3)	26(1)
C(28)	9729(2)	649(2)	5873(3)	26(1)
C(29)	9278(2)	653(1)	4589(3)	22(1)
Fe	6677(1)	2290(1)	1023(1)	14(1)
N	6612(1)	4045(1)	-2494(2)	16(1)
Si(1)	5236(1)	1064(1)	-422(1)	16(1)
Si(2)	8100(1)	1158(1)	2595(1)	17(1)

Anhang

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 1,1'-Bis(dimethylphenylsilyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (117). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hkab^*U^{12}]$.

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
B	36(1)	14(1)	21(1)	4(1)	-5(1)	-4(1)
C(1)	28(1)	28(1)	20(1)	3(1)	-1(1)	6(1)
C(2)	26(1)	21(1)	22(1)	3(1)	-10(1)	-3(1)
C(3)	19(1)	15(1)	13(1)	0(1)	-2(1)	-1(1)
C(4)	19(1)	12(1)	11(1)	2(1)	-4(1)	-2(1)
C(5)	14(1)	17(1)	14(1)	-1(1)	-2(1)	-1(1)
C(6)	23(1)	12(1)	14(1)	-1(1)	-3(1)	-3(1)
C(7)	20(1)	14(1)	17(1)	-2(1)	-1(1)	2(1)
C(8)	16(1)	16(1)	18(1)	2(1)	1(1)	2(1)
C(9)	29(2)	15(1)	36(2)	3(1)	-7(1)	-1(1)
C(10)	30(2)	34(2)	24(2)	-4(1)	4(1)	-2(1)
C(11)	24(2)	13(1)	18(1)	-2(1)	-1(1)	1(1)
C(12)	25(1)	21(1)	23(2)	2(1)	-3(1)	-4(1)
C(13)	20(2)	26(1)	29(2)	-4(1)	-5(1)	-1(1)
C(14)	21(1)	33(2)	20(1)	-2(1)	-5(1)	7(1)
C(15)	30(1)	23(1)	21(1)	3(1)	0(1)	-2(1)
C(16)	22(1)	21(1)	18(1)	-4(1)	-2(1)	-4(1)
C(17)	28(2)	16(1)	18(1)	1(1)	-10(1)	-5(1)
C(18)	32(2)	17(1)	16(1)	-2(1)	-7(1)	1(1)
C(19)	29(2)	24(1)	17(1)	0(1)	0(1)	11(1)
C(20)	26(1)	20(1)	13(1)	4(1)	-2(1)	-2(1)
C(21)	19(1)	19(1)	15(1)	4(1)	-5(1)	1(1)
C(22)	27(2)	21(1)	38(2)	0(1)	-5(1)	2(1)
C(23)	28(2)	38(2)	21(2)	5(1)	4(1)	7(1)
C(24)	15(1)	20(1)	18(1)	7(1)	-2(1)	-2(1)
C(25)	26(1)	23(1)	26(1)	1(1)	-1(1)	7(1)
C(26)	33(2)	31(1)	19(1)	-1(1)	-2(1)	-3(1)
C(27)	25(2)	30(1)	21(2)	10(1)	-9(1)	-5(1)
C(28)	18(1)	27(1)	33(2)	10(1)	-3(1)	5(1)
C(29)	22(1)	21(1)	22(2)	2(1)	2(1)	4(1)
Fe	17(1)	10(1)	14(1)	1(1)	-3(1)	0(1)
N	19(1)	14(1)	14(1)	3(1)	-5(1)	-2(1)
Si(1)	20(1)	14(1)	15(1)	-1(1)	-1(1)	-4(1)
Si(2)	18(1)	16(1)	17(1)	3(1)	-3(1)	0(1)

Anhang

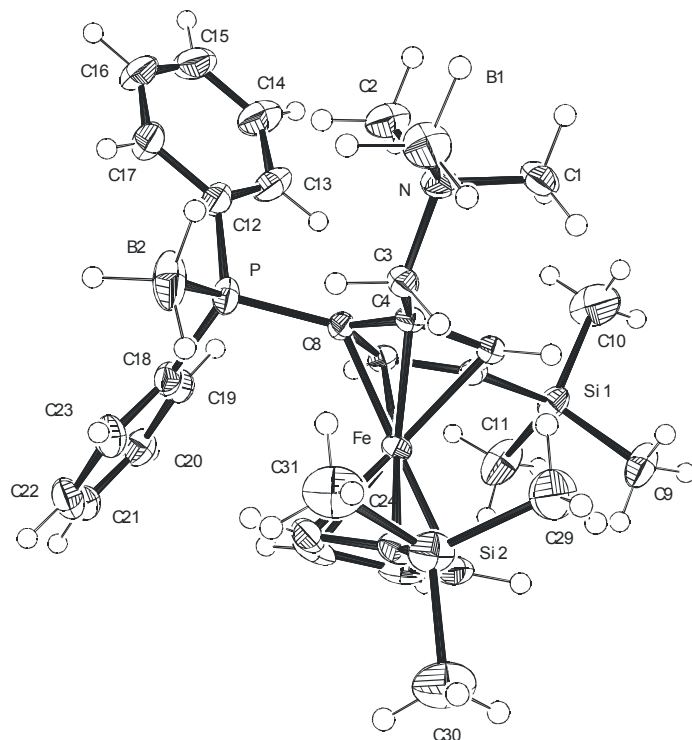
5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan-*N-P*-diboran (201)

Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan-*N-P*-diboran (201). (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan-*N-P*-diboran (201). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
B(1)	7606(4)	2840(2)	5484(2)	40(1)
B(2)	11236(4)	1395(2)	6508(2)	48(1)
C(1)	7003(3)	3164(1)	6713(1)	31(1)
C(2)	9300(3)	3210(2)	6651(2)	38(1)
C(3)	8196(2)	2019(1)	6628(1)	22(1)
C(4)	8602(2)	1902(1)	7456(1)	20(1)
C(5)	7734(2)	1973(1)	7962(1)	20(1)
C(6)	8451(2)	1869(1)	8716(1)	21(1)
C(7)	9787(2)	1714(1)	8666(1)	20(1)
C(8)	9904(2)	1735(1)	7900(1)	20(1)
C(9)	6007(3)	1702(2)	9364(2)	40(1)
C(10)	7890(4)	2975(2)	9808(2)	61(1)
C(11)	8763(3)	1449(2)	10351(1)	45(1)

Anhang

C(12)	12420(2)	2397(1)	7876(1)	31(1)
C(13)	12312(3)	2799(2)	8500(2)	39(1)
C(14)	13156(3)	3377(2)	8744(2)	47(1)
C(15)	14105(3)	3568(2)	8358(2)	50(1)
C(16)	14201(3)	3186(2)	7725(2)	55(1)
C(17)	13378(3)	2600(2)	7480(2)	46(1)
C(18)	12288(2)	850(1)	8115(1)	25(1)
C(19)	12811(2)	916(1)	8877(1)	26(1)
C(20)	13428(2)	328(1)	9278(1)	31(1)
C(21)	13563(3)	-323(1)	8925(2)	34(1)
C(22)	13065(3)	-387(2)	8165(2)	37(1)
C(23)	12428(3)	191(1)	7761(1)	32(1)
C(24)	7515(2)	127(1)	7422(1)	27(1)
C(25)	7169(3)	188(1)	8137(1)	31(1)
C(26)	8321(3)	86(1)	8705(1)	35(1)
C(27)	9401(3)	-39(1)	8360(2)	34(1)
C(28)	8908(2)	-11(1)	7576(1)	28(1)
C(29)	5055(3)	837(2)	6478(2)	56(1)
C(30)	5446(3)	-785(2)	6427(2)	52(1)
C(31)	7225(4)	203(2)	5727(2)	53(1)
Fe	8572(1)	959(1)	8060(1)	20(1)
N	8043(2)	2808(1)	6393(1)	25(1)
P	11404(1)	1596(1)	7562(1)	26(1)
Si(1)	7766(1)	1990(1)	9573(1)	26(1)
Si(2)	6323(1)	112(1)	6499(1)	36(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan-*N*-*P*-diboran (201). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
B(1)	50(2)	47(2)	21(2)	9(1)	7(1)	6(2)
B(2)	39(2)	78(3)	28(2)	7(2)	13(2)	24(2)
C(1)	39(2)	23(1)	33(1)	6(1)	8(1)	9(1)
C(2)	39(2)	34(2)	40(2)	5(1)	8(1)	-9(1)
C(3)	24(1)	20(1)	21(1)	1(1)	5(1)	2(1)
C(4)	22(1)	17(1)	21(1)	3(1)	5(1)	1(1)
C(5)	21(1)	18(1)	21(1)	1(1)	5(1)	1(1)
C(6)	22(1)	20(1)	22(1)	2(1)	7(1)	-2(1)

Anhang

C(7)	21(1)	20(1)	19(1)	2(1)	4(1)	-2(1)
C(8)	18(1)	21(1)	21(1)	3(1)	6(1)	1(1)
C(9)	25(2)	61(2)	35(2)	7(1)	12(1)	1(1)
C(10)	91(3)	48(2)	59(2)	-22(2)	49(2)	-17(2)
C(11)	34(2)	78(2)	24(1)	11(1)	3(1)	-7(2)
C(12)	23(1)	36(2)	35(1)	16(1)	10(1)	7(1)
C(13)	35(2)	44(2)	43(2)	8(1)	15(1)	-10(1)
C(14)	44(2)	44(2)	54(2)	5(1)	13(2)	-14(1)
C(15)	34(2)	41(2)	75(2)	21(2)	11(2)	-7(1)
C(16)	36(2)	50(2)	89(3)	26(2)	33(2)	-1(1)
C(17)	38(2)	47(2)	61(2)	19(2)	29(2)	10(1)
C(18)	19(1)	30(1)	27(1)	4(1)	7(1)	4(1)
C(19)	20(1)	30(1)	27(1)	-1(1)	4(1)	0(1)
C(20)	23(1)	41(2)	26(1)	4(1)	2(1)	0(1)
C(21)	25(1)	32(1)	44(2)	9(1)	7(1)	7(1)
C(22)	30(2)	34(2)	45(2)	-8(1)	6(1)	8(1)
C(23)	26(1)	40(2)	29(1)	-4(1)	3(1)	5(1)
C(24)	29(1)	19(1)	30(1)	-2(1)	0(1)	-1(1)
C(25)	36(2)	20(1)	38(1)	-1(1)	12(1)	-7(1)
C(26)	55(2)	21(1)	27(1)	7(1)	3(1)	-8(1)
C(27)	39(2)	15(1)	41(2)	3(1)	-8(1)	4(1)
C(28)	28(1)	20(1)	36(1)	-3(1)	5(1)	5(1)
C(29)	32(2)	54(2)	76(2)	17(2)	-2(2)	5(1)
C(30)	56(2)	49(2)	41(2)	2(1)	-11(2)	-16(2)
C(31)	69(2)	53(2)	32(2)	-3(1)	1(2)	-9(2)
Fe	22(1)	18(1)	19(1)	2(1)	3(1)	1(1)
N	29(1)	24(1)	22(1)	6(1)	6(1)	0(1)
P	22(1)	36(1)	22(1)	6(1)	8(1)	8(1)
Si(1)	27(1)	34(1)	21(1)	-2(1)	11(1)	-5(1)
Si(2)	32(1)	35(1)	34(1)	2(1)	-6(1)	-5(1)

Anhang

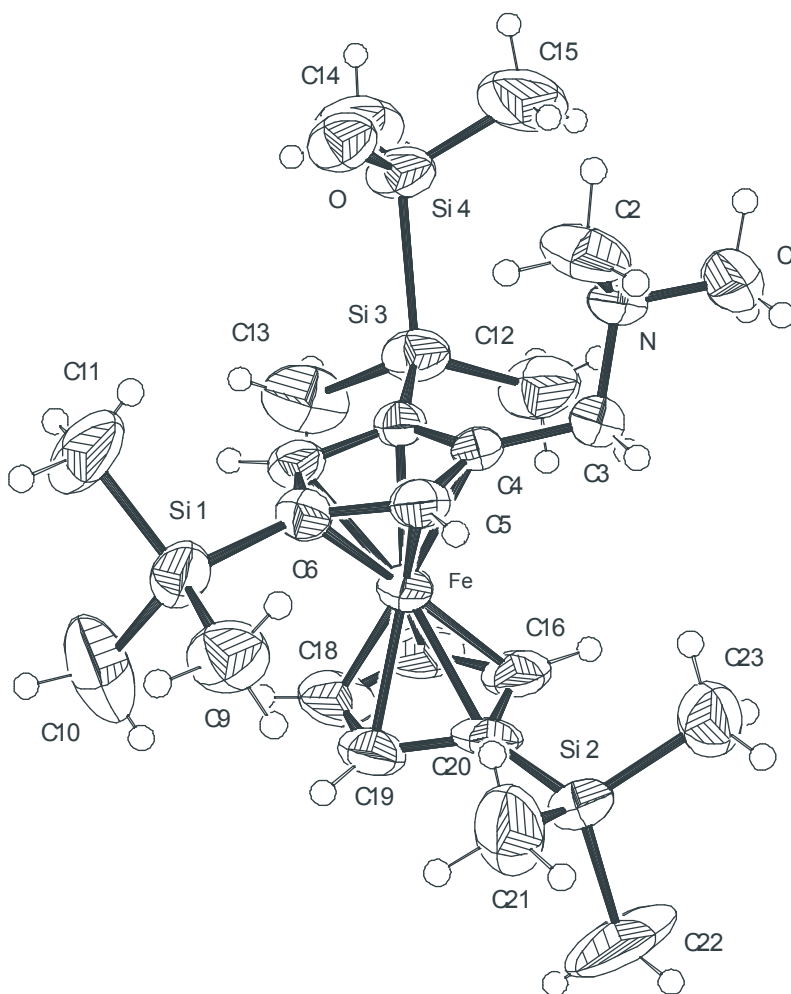
5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125)

Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125). (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
C(1)	2311(5)	4377(6)	5661(3)	96(3)
C(2)	2725(5)	2107(7)	5912(3)	84(2)
C(3)	2622(4)	3002(6)	4806(3)	60(2)
C(4)	2433(4)	1721(5)	4431(3)	43(1)
C(5)	3113(4)	758(6)	4419(3)	48(2)
C(6)	2667(4)	-342(6)	4011(3)	49(2)
C(7)	1680(4)	-23(6)	3774(3)	48(2)
C(8)	1515(4)	1243(5)	4028(2)	42(1)
C(9)	4474(4)	-1831(6)	4132(3)	79(2)
C(10)	2754(5)	-2346(8)	2918(4)	124(3)

Anhang

C(11)	2764(6)	-3200(6)	4312(5)	133(4)
C(12)	281(5)	3764(6)	3716(4)	97(3)
C(13)	-439(4)	1102(7)	3044(3)	95(2)
C(14)	-1634(5)	1476(8)	4342(4)	121(3)
C(15)	-30(5)	2559(9)	5469(4)	123(3)
C(16)	2498(5)	3108(6)	2975(3)	67(2)
C(17)	1687(5)	2363(8)	2572(3)	77(2)
C(18)	2019(5)	1170(8)	2393(3)	77(2)
C(19)	3020(5)	1179(6)	2671(3)	63(2)
C(20)	3336(4)	2376(7)	3040(3)	60(2)
C(21)	5387(5)	1525(7)	3742(4)	111(3)
C(22)	4904(7)	3784(9)	2718(4)	174(5)
C(23)	4675(4)	4120(6)	4123(3)	78(2)
Fe	2408(1)	1363(1)	3441(1)	46(1)
N	2241(3)	3049(5)	5383(2)	56(1)
O	270(6)	214(11)	5168(5)	66(3)
Si(1)	3174(1)	-1919(2)	3837(1)	65(1)
Si(2)	4561(1)	2937(2)	3411(1)	72(1)
Si(3)	320(1)	1945(2)	3853(1)	62(1)
Si(4)	-331(1)	1438(2)	4730(1)	68(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,3,1',-tris(trimethylsilyl)ferrocen (125). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
C(1)	159(8)	60(5)	96(5)	-20(4)	80(5)	-18(5)
C(2)	107(6)	109(6)	46(4)	12(4)	36(4)	25(5)
C(3)	80(5)	52(4)	59(4)	-9(3)	40(4)	-12(3)
C(4)	58(4)	41(4)	37(3)	3(3)	25(3)	-7(3)
C(5)	47(4)	58(4)	45(3)	1(3)	21(3)	-4(3)
C(6)	48(4)	51(4)	51(3)	-5(3)	21(3)	-1(3)
C(7)	39(4)	57(4)	53(3)	-2(3)	22(3)	-7(3)
C(8)	43(4)	48(4)	36(3)	0(3)	16(3)	-5(3)
C(9)	65(5)	85(5)	94(5)	7(4)	33(4)	11(4)
C(10)	106(7)	103(7)	147(8)	-67(6)	15(6)	5(5)
C(11)	150(8)	39(5)	275(11)	20(6)	159(8)	13(5)
C(12)	119(7)	73(5)	121(6)	40(5)	71(5)	34(5)
C(13)	47(5)	153(8)	77(5)	-3(5)	9(4)	10(4)

Anhang

C(14)	82(6)	174(9)	124(7)	-10(6)	57(5)	-23(6)
C(15)	92(7)	184(9)	125(6)	-46(6)	79(5)	-33(6)
C(16)	89(6)	62(5)	67(4)	20(4)	50(4)	6(4)
C(17)	79(6)	114(7)	41(4)	20(4)	22(4)	-3(5)
C(18)	76(6)	120(7)	36(3)	-9(4)	18(4)	-10(5)
C(19)	70(5)	81(5)	48(4)	-8(4)	34(3)	-3(4)
C(20)	75(5)	78(5)	45(3)	7(4)	43(3)	4(4)
C(21)	73(6)	89(6)	182(8)	-51(6)	54(5)	-9(4)
C(22)	181(10)	266(13)	97(6)	17(7)	73(6)	-132(9)
C(23)	70(5)	64(5)	103(5)	-16(4)	31(4)	0(4)
Fe	53(1)	51(1)	36(1)	1(1)	19(1)	-2(1)
N	76(4)	56(3)	52(3)	-4(3)	41(3)	-5(3)
O	57(9)	68(8)	79(9)	12(6)	31(6)	8(6)
Si(1)	52(1)	47(1)	107(2)	-2(1)	39(1)	0(1)
Si(2)	83(2)	75(1)	76(1)	-5(1)	51(1)	-25(1)
Si(3)	58(1)	67(1)	68(1)	16(1)	31(1)	18(1)
Si(4)	71(1)	62(1)	89(1)	18(1)	53(1)	21(1)

1,1'-Bis(trimethylstannyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (121)

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die 1,1'-Bis(trimethylstannyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (121). U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Sn(1)	2182(1)	12942(1)	1822(1)	26(1)
Sn(2)	1637(1)	7702(1)	201(1)	25(1)
Fe	2717(1)	10894(1)	302(1)	19(1)
N	1885(3)	13014(3)	-1641(2)	27(1)
C(1)	1867(3)	12365(4)	760(2)	23(1)
C(2)	2529(3)	12684(3)	123(2)	22(1)
C(3)	2041(3)	12022(3)	-464(2)	21(1)
C(4)	1054(3)	11280(3)	-195(2)	23(1)
C(5)	955(4)	11488(4)	546(2)	24(1)
C(6)	3025(3)	9059(3)	330(2)	23(1)
C(7)	3802(4)	9634(3)	-190(3)	27(1)
C(8)	4563(4)	10505(4)	154(3)	34(1)
C(9)	4272(4)	10485(4)	887(3)	34(1)

Anhang

C(10)	3338(4)	9611(4)	999(2)	27(1)
C(11)	766(4)	14238(5)	2082(3)	39(1)
C(12)	4018(4)	13696(4)	1920(3)	36(1)
C(13)	1957(5)	11401(5)	2502(3)	44(1)
C(14)	180(4)	8118(5)	944(3)	40(1)
C(15)	2495(5)	6024(4)	499(3)	39(1)
C(16)	1008(5)	7651(5)	-878(2)	41(1)
C(17)	2477(4)	12054(4)	-1224(2)	28(1)
C(18)	2125(5)	12813(5)	-2394(2)	44(1)
C(19)	2333(4)	14189(4)	-1427(2)	32(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 1,1'-Bis(trimethylstannyl)-3-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (121). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Sn(1)	29(1)	24(1)	25(1)	-3(1)	2(1)	0(1)
Sn(2)	30(1)	14(1)	31(1)	-1(1)	2(1)	-4(1)
Fe	19(1)	10(1)	28(1)	0(1)	0(1)	1(1)
N	35(2)	25(2)	22(2)	0(1)	1(1)	-1(2)
C(1)	24(2)	15(2)	30(2)	-1(2)	2(1)	5(2)
C(2)	25(2)	12(2)	29(2)	2(2)	2(1)	3(1)
C(3)	25(2)	14(2)	26(2)	1(2)	1(2)	5(2)
C(4)	18(2)	19(2)	32(2)	0(2)	-4(2)	1(2)
C(5)	20(2)	20(2)	30(2)	3(2)	4(2)	3(2)
C(6)	25(2)	10(2)	34(2)	0(2)	-2(2)	2(1)
C(7)	28(2)	14(2)	38(2)	-1(2)	4(2)	6(2)
C(8)	18(2)	15(2)	70(3)	4(2)	6(2)	1(2)
C(9)	29(2)	20(2)	52(3)	-6(2)	-17(2)	5(2)
C(10)	32(2)	16(2)	34(2)	3(2)	-7(2)	6(2)
C(11)	32(2)	42(3)	43(3)	-17(2)	5(2)	6(2)
C(12)	32(2)	32(3)	44(3)	-10(2)	3(2)	3(2)
C(13)	62(4)	38(3)	33(3)	8(2)	0(2)	-10(2)
C(14)	41(3)	33(3)	48(3)	-8(2)	13(2)	-9(2)
C(15)	48(3)	17(2)	52(3)	3(2)	-3(2)	-2(2)
C(16)	48(3)	38(3)	37(3)	-2(2)	-2(2)	-14(2)
C(17)	35(2)	20(2)	30(2)	-3(2)	9(2)	2(2)
C(18)	58(3)	48(3)	25(2)	3(2)	0(2)	1(3)

Anhang

C(19) 36(2) 24(2) 37(2) 7(2) -1(2) -2(2)

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan (166)

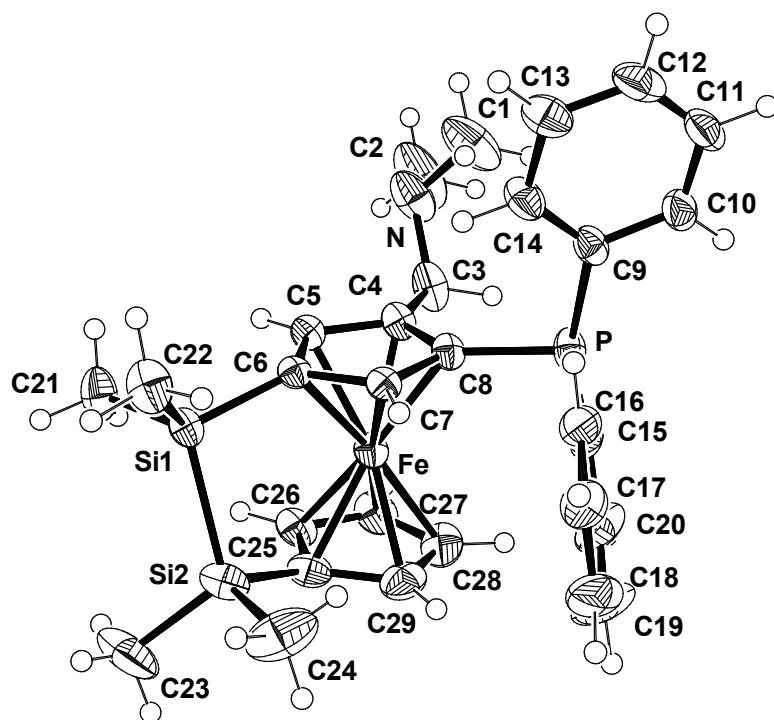


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan (166) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan (166). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	x	y	z	U(eq)
C(1)	9090(2)	1351(1)	10015(4)	72(1)
C(2)	9251(2)	2105(1)	10453(4)	84(1)
C(3)	7990(2)	1838(1)	8229(3)	41(1)
C(4)	6885(2)	1573(1)	7746(2)	29(1)
C(5)	5709(2)	1644(1)	8348(2)	27(1)
C(6)	4840(2)	1350(1)	7625(2)	24(1)
C(7)	5513(2)	1088(1)	6574(2)	25(1)
C(8)	6772(2)	1219(1)	6636(2)	27(1)
C(9)	8444(2)	527(1)	6807(2)	31(1)
C(10)	9558(2)	331(1)	6557(2)	39(1)
C(11)	9915(2)	-34(1)	7405(3)	50(1)
C(12)	9182(2)	-203(1)	8523(3)	49(1)
C(13)	8089(2)	-7(1)	8823(3)	46(1)
C(14)	7721(2)	355(1)	7962(2)	39(1)
C(15)	7080(2)	729(1)	3910(2)	35(1)
C(16)	6519(2)	335(1)	4030(2)	38(1)
C(17)	5718(2)	183(1)	2802(3)	51(1)
C(18)	5478(3)	425(1)	1438(3)	70(1)
C(19)	6054(3)	806(1)	1284(3)	80(1)
C(20)	6854(3)	958(1)	2495(2)	59(1)
C(21)	2794(2)	1823(1)	9139(3)	46(1)
C(22)	2442(2)	884(1)	8235(3)	46(1)
C(23)	1304(2)	2001(1)	4808(4)	77(1)
C(24)	2433(3)	1177(1)	3566(3)	75(1)
C(25)	4104(2)	1923(1)	4566(2)	37(1)
C(26)	4677(2)	2261(1)	5505(2)	37(1)
C(27)	5907(2)	2313(1)	5065(3)	43(1)
C(28)	6115(2)	2010(1)	3848(3)	47(1)

Anhang

C(29)	5019(2)	1773(1)	3536(2)	44(1)
Fe	5617(1)	1709(1)	5908(1)	28(1)
N	8442(2)	1759(1)	9888(3)	53(1)
P	8012(1)	990(1)	5547(1)	33(1)
Si(1)	3132(1)	1400(1)	7635(1)	28(1)
Si(2)	2654(1)	1634(1)	5002(1)	41(1)

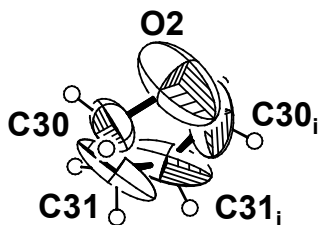
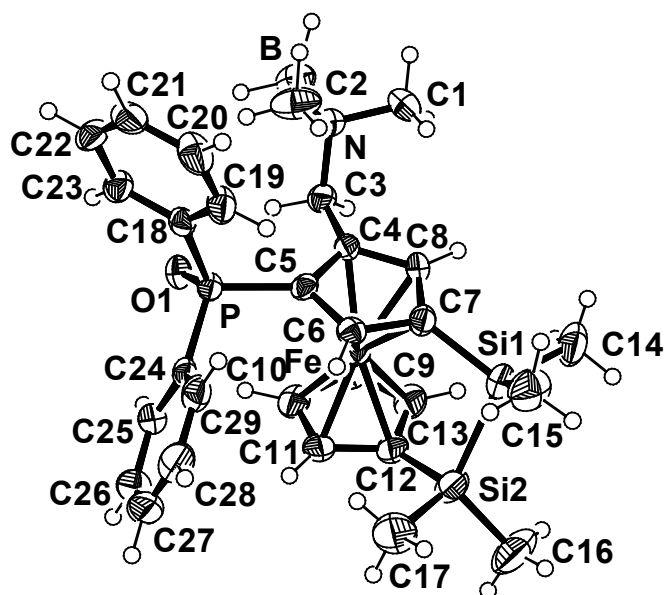
Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethyldisila-1-diphenylphosphanferrocenophan (166). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1)	47(1)	55(2)	109(2)	-11(2)	-30(2)	3(1)
C(2)	41(1)	67(2)	140(3)	-49(2)	-22(2)	-2(1)
C(3)	31(1)	27(1)	66(1)	-11(1)	8(1)	-4(1)
C(4)	28(1)	20(1)	39(1)	-1(1)	2(1)	-1(1)
C(5)	30(1)	20(1)	32(1)	-1(1)	1(1)	1(1)
C(6)	28(1)	18(1)	28(1)	3(1)	1(1)	2(1)
C(7)	31(1)	14(1)	29(1)	3(1)	2(1)	2(1)
C(8)	30(1)	17(1)	35(1)	3(1)	5(1)	2(1)
C(9)	29(1)	26(1)	37(1)	-8(1)	-2(1)	4(1)
C(10)	34(1)	48(1)	35(1)	-14(1)	-2(1)	11(1)
C(11)	50(1)	57(1)	43(1)	-18(1)	-14(1)	32(1)
C(12)	62(1)	35(1)	48(1)	-5(1)	-19(1)	18(1)
C(13)	48(1)	36(1)	54(1)	10(1)	-5(1)	5(1)
C(14)	34(1)	30(1)	52(1)	7(1)	3(1)	7(1)
C(15)	47(1)	31(1)	29(1)	2(1)	13(1)	12(1)
C(16)	45(1)	37(1)	32(1)	1(1)	4(1)	4(1)
C(17)	57(1)	54(1)	42(1)	-14(1)	0(1)	8(1)
C(18)	100(2)	70(2)	38(1)	-22(1)	-19(1)	39(2)
C(19)	158(3)	58(2)	24(1)	-1(1)	-4(1)	45(2)
C(20)	111(2)	34(1)	33(1)	3(1)	20(1)	17(1)
C(21)	38(1)	41(1)	62(1)	-16(1)	13(1)	0(1)
C(22)	40(1)	33(1)	65(1)	3(1)	9(1)	-8(1)
C(23)	41(1)	76(2)	110(2)	37(2)	-18(1)	9(1)
C(24)	105(2)	71(2)	46(1)	-7(1)	-9(1)	-37(2)
C(25)	44(1)	27(1)	40(1)	12(1)	-4(1)	4(1)
C(26)	40(1)	20(1)	51(1)	11(1)	1(1)	6(1)
C(27)	46(1)	21(1)	61(1)	16(1)	6(1)	1(1)
C(28)	55(1)	36(1)	50(1)	20(1)	17(1)	4(1)

Anhang

C(29)	63(1)	36(1)	34(1)	11(1)	3(1)	6(1)
Fe	32(1)	16(1)	35(1)	5(1)	5(1)	2(1)
N	29(1)	48(1)	79(1)	-21(1)	-14(1)	-2(1)
P	33(1)	23(1)	45(1)	1(1)	14(1)	2(1)
Si(1)	26(1)	22(1)	38(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
Si(2)	40(1)	36(1)	46(1)	7(1)	-12(1)	-3(1)

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophanboran (169)Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophanboran (169) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophanboran (169). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	x	y	z	U(eq)
B	860(3)	-819(4)	-583(3)	53(2)
C(1)	899(4)	-1385(3)	450(2)	72(2)
C(2)	2049(3)	-1222(3)	68(2)	63(2)
C(3)	1376(2)	73(3)	320(2)	34(1)
C(4)	1830(2)	175(2)	914(2)	29(1)
C(5)	2587(2)	507(2)	1049(2)	28(1)
C(6)	2779(2)	531(2)	1679(2)	30(1)
C(7)	2161(2)	232(3)	1942(2)	33(1)
C(8)	1588(2)	8(3)	1465(2)	35(1)
C(9)	1041(2)	2129(3)	1063(2)	45(1)
C(10)	1741(2)	2488(3)	1003(2)	41(1)
C(11)	2164(2)	2555(3)	1570(2)	39(1)
C(12)	1736(2)	2243(3)	1996(2)	39(1)
C(13)	1037(2)	1986(3)	1671(2)	44(1)
C(14)	1060(3)	7(4)	2778(2)	70(2)
C(15)	2724(3)	-140(3)	3269(2)	66(2)
C(16)	1671(4)	2507(4)	3341(2)	89(2)
C(17)	3127(3)	2289(4)	2910(2)	70(2)
C(18)	3700(2)	22(2)	331(2)	31(1)
C(19)	3960(2)	-633(3)	720(2)	43(1)
C(20)	4406(3)	-1285(3)	549(2)	54(1)
C(21)	4577(3)	-1290(3)	-22(2)	53(1)
C(22)	4306(2)	-648(3)	-410(2)	48(1)
C(23)	3868(2)	10(3)	-240(2)	37(1)
C(24)	3762(2)	1698(3)	909(2)	30(1)
C(25)	3665(2)	2570(3)	763(2)	38(1)
C(26)	4127(3)	3188(3)	1065(2)	52(1)
C(27)	4688(3)	2944(4)	1502(2)	58(1)
C(28)	4799(2)	2085(4)	1647(2)	54(1)
C(29)	4335(2)	1457(3)	1350(2)	41(1)
C(30)	5575(5)	9216(6)	2355(5)	151(4)
C(31)	5317(4)	9976(4)	2442(5)	155(5)
Fe	1874(1)	1286(1)	1409(1)	29(1)
N	1310(2)	-842(2)	82(1)	37(1)
O(1)	2676(1)	1286(2)	-15(1)	34(1)
O(2)	5000	8582(7)	2500	246(7)
P	3128(1)	915(1)	518(1)	28(1)
Si(1)	2014(1)	417(1)	2728(1)	43(1)
Si(2)	2126(1)	1947(1)	2778(1)	48(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocen (172). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$.

Anhang

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
B	48(3)	57(4)	51(3)	-17(3)	4(3)	0(3)
C(1)	111(5)	52(3)	61(3)	-11(3)	34(3)	-44(3)
C(2)	54(3)	54(3)	76(4)	-27(3)	-1(3)	14(3)
C(3)	29(2)	36(2)	37(2)	-7(2)	11(2)	-2(2)
C(4)	32(2)	24(2)	32(2)	-1(2)	12(2)	0(2)
C(5)	31(2)	27(2)	29(2)	-3(2)	9(2)	5(2)
C(6)	33(2)	26(2)	31(2)	1(2)	4(2)	2(2)
C(7)	37(2)	33(2)	33(2)	2(2)	13(2)	1(2)
C(8)	38(2)	35(2)	34(2)	1(2)	16(2)	-7(2)
C(9)	41(2)	43(3)	48(3)	-2(2)	-2(2)	19(2)
C(10)	51(3)	32(2)	43(2)	3(2)	15(2)	14(2)
C(11)	45(2)	28(2)	46(3)	-6(2)	14(2)	1(2)
C(12)	47(3)	31(2)	43(2)	-6(2)	17(2)	6(2)
C(13)	39(2)	43(3)	54(3)	-3(2)	19(2)	10(2)
C(14)	71(4)	99(5)	49(3)	-7(3)	33(3)	-27(3)
C(15)	91(4)	61(4)	42(3)	8(3)	3(3)	10(3)
C(16)	138(6)	83(5)	52(3)	-11(3)	38(4)	25(4)
C(17)	68(4)	82(4)	55(3)	-5(3)	-5(3)	-16(3)
C(18)	25(2)	29(2)	40(2)	-2(2)	11(2)	-2(2)
C(19)	48(3)	34(2)	53(3)	9(2)	25(2)	8(2)
C(20)	51(3)	33(3)	86(4)	13(3)	30(3)	10(2)
C(21)	46(3)	32(3)	88(4)	-16(3)	35(3)	-2(2)
C(22)	42(3)	57(3)	50(3)	-23(3)	23(2)	-9(2)
C(23)	33(2)	44(3)	37(2)	-5(2)	11(2)	-3(2)
C(24)	26(2)	38(2)	29(2)	-1(2)	12(2)	-2(2)
C(25)	41(2)	37(3)	38(2)	-3(2)	13(2)	-6(2)
C(26)	55(3)	46(3)	59(3)	-12(3)	21(3)	-10(2)
C(27)	49(3)	69(4)	58(3)	-25(3)	17(3)	-25(3)
C(28)	33(2)	87(4)	42(3)	-11(3)	4(2)	-10(3)
C(29)	34(2)	53(3)	40(2)	0(2)	14(2)	0(2)
C(30)	161(9)	103(7)	219(11)	-55(7)	128(8)	-63(6)
C(31)	84(5)	55(4)	297(12)	50(7)	-64(8)	-32(4)
Fe	30(1)	30(1)	30(1)	-1(1)	9(1)	3(1)
N	39(2)	36(2)	38(2)	-8(2)	12(2)	-7(2)
O(1)	34(2)	38(2)	31(1)	9(1)	7(1)	0(1)
O(2)	130(9)	146(9)	470(20)	0	85(11)	0
P	28(1)	28(1)	27(1)	2(1)	8(1)	1(1)
Si(1)	54(1)	48(1)	30(1)	1(1)	15(1)	-3(1)
Si(2)	62(1)	51(1)	34(1)	-7(1)	13(1)	2(1)

Anhang

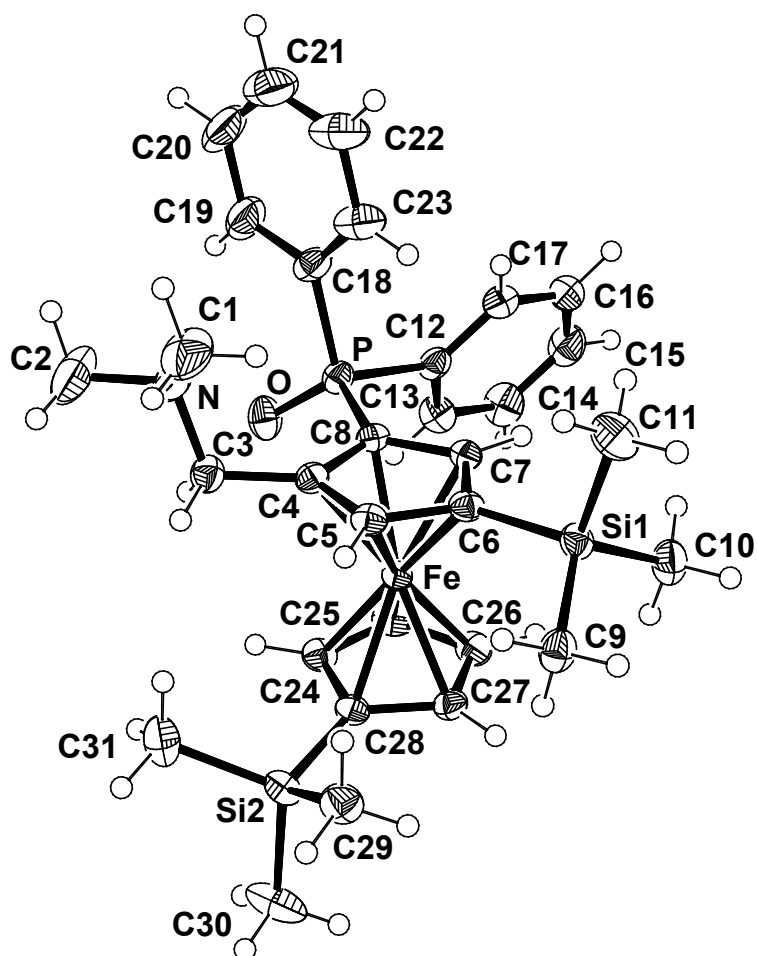
5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocen (172)

Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocen (172) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocen (172). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
C(1)	5823(2)	3481(2)	6792(2)	60(1)
C(2)	6518(2)	4327(2)	7867(2)	66(1)
C(3)	7649(2)	3235(1)	7440(1)	28(1)
C(4)	7672(1)	2361(1)	7268(1)	22(1)
C(5)	7850(1)	1992(1)	6496(1)	23(1)
C(6)	7773(1)	1149(1)	6577(1)	23(1)
C(7)	7535(1)	1002(1)	7421(1)	23(1)
C(8)	7468(1)	1740(1)	7852(1)	22(1)
C(9)	8753(2)	697(1)	4912(1)	31(1)
C(10)	8455(2)	-546(1)	6271(1)	35(1)
C(11)	6390(2)	163(1)	5376(2)	47(1)
C(12)	7240(2)	922(1)	9401(1)	26(1)

Anhang

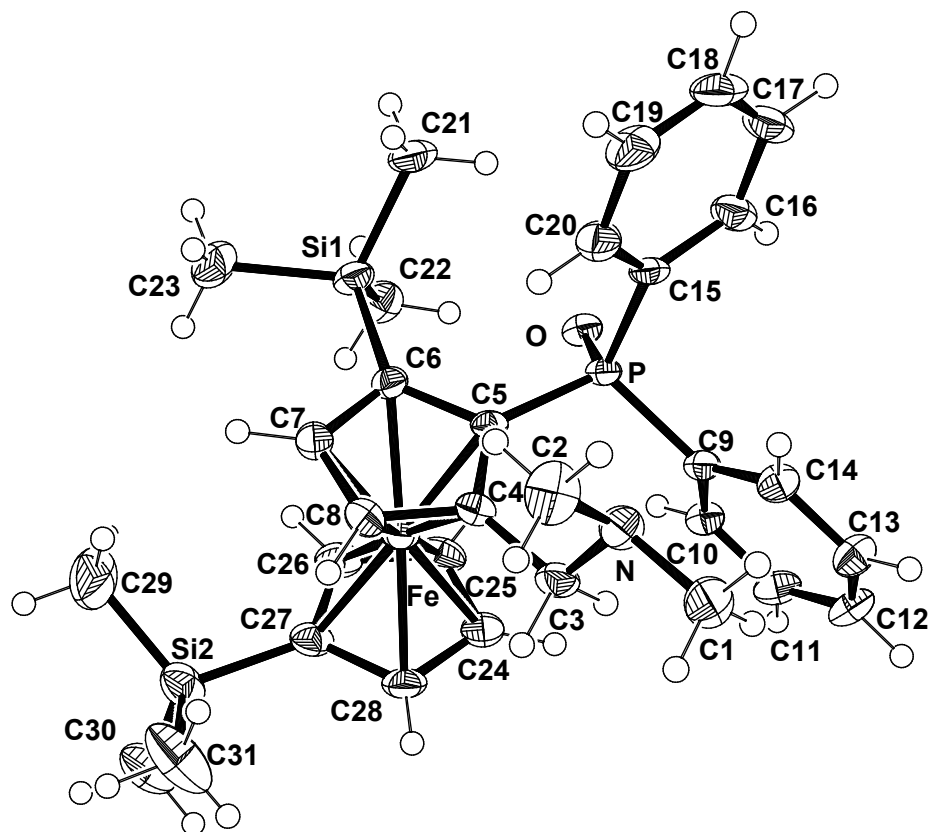
C(13)	8176(2)	791(1)	9931(1)	32(1)
C(14)	8283(2)	85(1)	10360(1)	40(1)
C(15)	7453(2)	-486(1)	10279(1)	41(1)
C(16)	6513(2)	-361(1)	9766(1)	41(1)
C(17)	6407(2)	338(1)	9323(1)	34(1)
C(18)	5641(2)	2123(1)	8883(1)	32(1)
C(19)	5242(2)	2636(1)	9467(2)	50(1)
C(20)	4065(3)	2827(2)	9448(2)	68(1)
C(21)	3344(2)	2497(2)	8873(2)	66(1)
C(22)	3728(2)	1981(2)	8310(2)	55(1)
C(23)	4878(2)	1797(1)	8302(1)	42(1)
C(24)	10359(1)	2185(1)	7933(1)	26(1)
C(25)	10153(2)	1459(1)	8340(1)	30(1)
C(26)	10289(2)	836(1)	7769(1)	29(1)
C(27)	10584(1)	1179(1)	7009(1)	25(1)
C(28)	10637(1)	2025(1)	7096(1)	23(1)
C(29)	10741(2)	2404(1)	5267(1)	35(1)
C(30)	12731(2)	2782(2)	6418(2)	53(1)
C(31)	10568(2)	3746(1)	6517(1)	41(1)
Fe	9033(1)	1599(1)	7364(1)	19(1)
N	6497(2)	3520(1)	7547(1)	39(1)
O	7855(1)	2476(1)	9352(1)	34(1)
P	7145(1)	1884(1)	8906(1)	24(1)
Si(1)	7867(1)	368(1)	5775(1)	25(1)
Si(2)	11145(1)	2742(1)	6319(1)	27(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocen (172). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1)	38(1)	57(2)	83(2)	-8(1)	-19(1)	17(1)
C(2)	69(2)	49(2)	80(2)	-20(1)	0(2)	26(1)
C(3)	30(1)	25(1)	30(1)	1(1)	-1(1)	2(1)
C(4)	19(1)	24(1)	23(1)	1(1)	-1(1)	2(1)
C(5)	20(1)	28(1)	22(1)	3(1)	-2(1)	0(1)
C(6)	19(1)	28(1)	23(1)	-2(1)	-1(1)	-1(1)
C(7)	20(1)	24(1)	25(1)	-1(1)	2(1)	-2(1)
C(8)	18(1)	26(1)	23(1)	-1(1)	2(1)	1(1)
C(9)	41(1)	28(1)	24(1)	-1(1)	3(1)	2(1)
C(10)	49(1)	26(1)	32(1)	0(1)	5(1)	-1(1)
C(11)	37(1)	52(1)	52(1)	-10(1)	-12(1)	-10(1)
C(12)	29(1)	26(1)	22(1)	-1(1)	7(1)	4(1)
C(13)	36(1)	33(1)	25(1)	4(1)	0(1)	-2(1)
C(14)	49(1)	40(1)	31(1)	8(1)	-2(1)	5(1)
C(15)	54(1)	31(1)	40(1)	11(1)	14(1)	7(1)
C(16)	38(1)	29(1)	56(1)	0(1)	16(1)	-3(1)
C(17)	28(1)	31(1)	42(1)	-1(1)	6(1)	3(1)

Anhang

C(18)	33(1)	30(1)	33(1)	11(1)	14(1)	9(1)
C(19)	58(2)	35(1)	58(1)	3(1)	30(1)	10(1)
C(20)	73(2)	42(1)	94(2)	13(1)	55(2)	24(1)
C(21)	40(1)	56(2)	102(2)	37(2)	25(2)	15(1)
C(22)	30(1)	70(2)	66(2)	36(1)	8(1)	7(1)
C(23)	29(1)	56(1)	40(1)	15(1)	5(1)	6(1)
C(24)	22(1)	30(1)	24(1)	-3(1)	-4(1)	-2(1)
C(25)	24(1)	43(1)	22(1)	6(1)	-5(1)	0(1)
C(26)	23(1)	27(1)	35(1)	9(1)	-4(1)	2(1)
C(27)	20(1)	26(1)	29(1)	-1(1)	0(1)	3(1)
C(28)	18(1)	26(1)	24(1)	0(1)	-2(1)	-2(1)
C(29)	39(1)	39(1)	27(1)	1(1)	6(1)	-4(1)
C(30)	31(1)	75(2)	52(1)	28(1)	-3(1)	-18(1)
C(31)	60(1)	28(1)	35(1)	-1(1)	1(1)	-5(1)
Fe	18(1)	20(1)	19(1)	1(1)	0(1)	0(1)
N	37(1)	33(1)	46(1)	0(1)	7(1)	11(1)
O	47(1)	29(1)	27(1)	-5(1)	-2(1)	-4(1)
P	26(1)	24(1)	22(1)	-2(1)	3(1)	2(1)
Si(1)	26(1)	25(1)	23(1)	-4(1)	-1(1)	-4(1)
Si(2)	26(1)	29(1)	26(1)	4(1)	0(1)	-7(1)

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphoxidferrocen (174)Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphoxidferrocen (174) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Anhang

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocen (174). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
C(1)	8432(3)	12422(3)	3290(1)	42(1)
C(2)	6576(3)	12609(3)	3769(1)	47(1)
C(3)	7862(2)	10695(2)	3752(1)	29(1)
C(4)	6779(2)	9917(2)	3951(1)	23(1)
C(5)	5856(2)	9038(2)	3740(1)	20(1)
C(6)	4991(2)	8507(2)	4071(1)	23(1)
C(7)	5406(2)	9089(2)	4480(1)	26(1)
C(8)	6474(2)	9929(2)	4407(1)	26(1)
C(9)	7217(2)	8767(2)	2884(1)	22(1)
C(10)	8047(2)	7717(2)	2869(1)	25(1)
C(11)	9252(2)	7763(2)	2651(1)	31(1)
C(12)	9630(2)	8850(2)	2443(1)	34(1)
C(13)	8810(2)	9891(2)	2448(1)	32(1)
C(14)	7605(2)	9850(2)	2670(1)	27(1)
C(15)	4480(2)	9727(2)	2919(1)	23(1)
C(16)	4068(2)	9529(2)	2476(1)	32(1)
C(17)	3072(3)	10271(3)	2283(1)	40(1)
C(18)	2472(3)	11197(3)	2521(1)	43(1)
C(19)	2878(3)	11406(3)	2954(1)	42(1)
C(20)	3889(2)	10667(2)	3154(1)	33(1)
C(21)	2203(2)	7940(3)	3643(1)	38(1)
C(22)	4026(3)	5730(2)	3877(1)	38(1)
C(23)	2867(3)	7282(3)	4601(1)	43(1)
C(24)	8672(2)	7329(3)	3964(1)	35(1)
C(25)	7623(3)	6450(2)	3999(1)	34(1)
C(26)	7287(3)	6384(2)	4452(1)	33(1)
C(27)	8127(2)	7228(2)	4703(1)	29(1)
C(28)	8989(2)	7804(2)	4390(1)	33(1)
C(29)	6463(4)	7311(4)	5536(1)	76(1)
C(30)	9315(3)	6235(3)	5564(1)	54(1)
C(31)	8869(4)	9029(3)	5448(1)	70(1)
Fe	7006(1)	8162(1)	4216(1)	23(1)
N	7328(2)	11755(2)	3494(1)	31(1)
O	5113(2)	7319(1)	3117(1)	26(1)
P	5650(1)	8608(1)	3166(1)	20(1)
Si(1)	3560(1)	7350(1)	4031(1)	29(1)
Si(2)	8184(1)	7453(1)	5315(1)	39(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocen (174). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1)	46(2)	40(2)	41(2)	6(1)	-2(1)	-21(1)
C(2)	58(2)	33(2)	51(2)	1(1)	9(2)	2(1)
C(3)	25(1)	32(1)	30(1)	1(1)	-7(1)	-9(1)
C(4)	21(1)	23(1)	26(1)	1(1)	-5(1)	1(1)
C(5)	14(1)	21(1)	25(1)	2(1)	-2(1)	2(1)
C(6)	18(1)	25(1)	25(1)	1(1)	1(1)	2(1)
C(7)	25(1)	29(1)	24(1)	1(1)	1(1)	3(1)
C(8)	28(1)	27(1)	24(1)	-3(1)	-4(1)	-1(1)
C(9)	17(1)	24(1)	23(1)	-3(1)	-2(1)	0(1)
C(10)	22(1)	26(1)	29(1)	-2(1)	0(1)	-1(1)
C(11)	20(1)	29(1)	44(2)	-5(1)	1(1)	4(1)
C(12)	20(1)	39(2)	45(2)	-3(1)	9(1)	-5(1)
C(13)	28(1)	28(1)	39(2)	3(1)	7(1)	-3(1)
C(14)	24(1)	24(1)	33(1)	-2(1)	3(1)	3(1)
C(15)	13(1)	25(1)	29(1)	2(1)	-3(1)	-2(1)
C(16)	27(1)	33(1)	35(1)	3(1)	-9(1)	-6(1)
C(17)	30(2)	44(2)	43(2)	13(1)	-17(1)	-12(1)
C(18)	19(1)	44(2)	67(2)	28(2)	-8(1)	-2(1)
C(19)	29(1)	40(2)	56(2)	10(1)	9(1)	14(1)
C(20)	26(1)	37(2)	36(1)	4(1)	1(1)	7(1)
C(21)	18(1)	52(2)	45(2)	-4(1)	-1(1)	-2(1)
C(22)	35(2)	33(2)	45(2)	3(1)	1(1)	-12(1)
C(23)	35(2)	50(2)	46(2)	3(1)	11(1)	-14(1)
C(24)	21(1)	49(2)	35(2)	4(1)	-1(1)	11(1)
C(25)	29(1)	32(2)	40(2)	-4(1)	-10(1)	10(1)
C(26)	27(1)	27(1)	44(2)	5(1)	-6(1)	0(1)
C(27)	24(1)	29(1)	35(1)	7(1)	-7(1)	2(1)
C(28)	18(1)	42(2)	39(2)	11(1)	-6(1)	-1(1)
C(29)	63(2)	115(3)	49(2)	43(2)	12(2)	24(2)
C(30)	63(2)	49(2)	49(2)	11(2)	-22(2)	5(2)
C(31)	113(3)	44(2)	49(2)	3(2)	-34(2)	0(2)
Fe	17(1)	26(1)	26(1)	2(1)	-3(1)	-1(1)
N	33(1)	27(1)	34(1)	5(1)	-1(1)	-9(1)
O	20(1)	26(1)	32(1)	-3(1)	0(1)	-2(1)
P	14(1)	23(1)	23(1)	-1(1)	-2(1)	1(1)
Si(1)	19(1)	32(1)	34(1)	0(1)	2(1)	-5(1)
Si(2)	45(1)	39(1)	32(1)	11(1)	-7(1)	1(1)

Anhang

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocenboran (175)

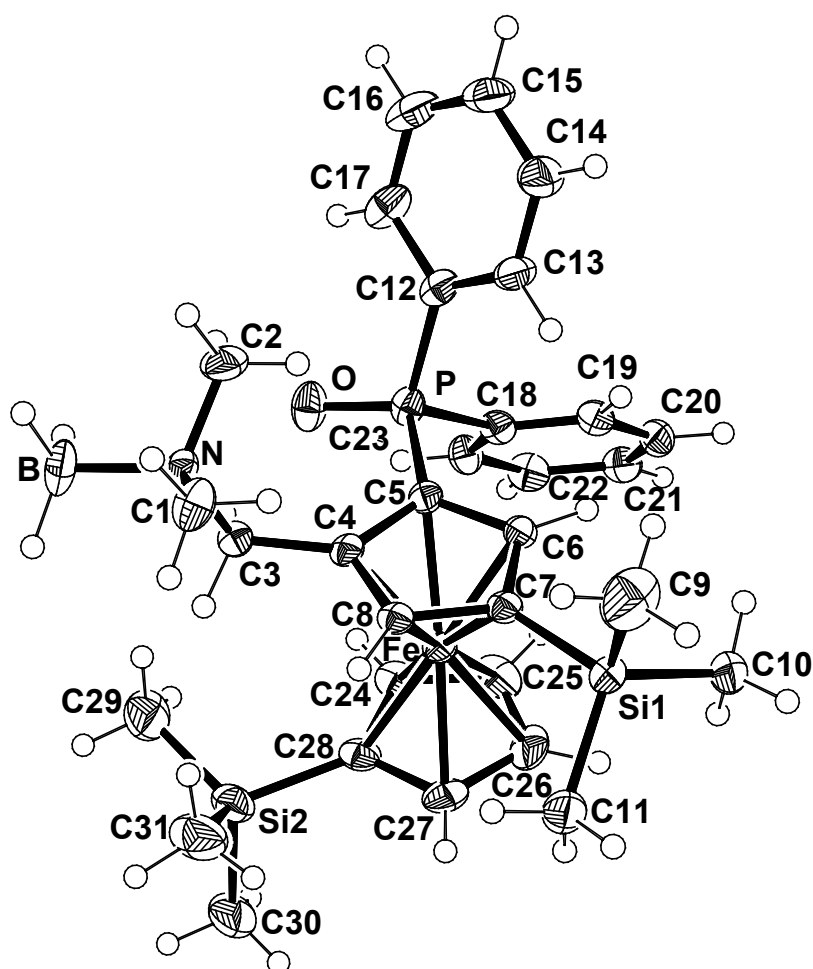


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocenboran (175) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocenboran (175). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	x	y	z	U(eq)
b	2310(4)	7625(2)	4549(2)	42(1)
c(1)	2773(3)	8121(1)	3367(1)	34(1)
c(2)	451(3)	7966(1)	3440(2)	40(1)
c(3)	1837(2)	6894(1)	3364(1)	22(1)
c(4)	1447(2)	6834(1)	2542(1)	20(1)
c(5)	138(2)	6659(1)	2085(1)	21(1)
c(6)	263(2)	6678(1)	1336(1)	22(1)
c(7)	1617(2)	6862(1)	1311(1)	21(1)
c(8)	2332(2)	6948(1)	2057(1)	21(1)
c(9)	2151(4)	7994(2)	250(2)	59(1)
c(10)	1220(3)	6496(2)	-308(1)	42(1)
c(11)	4077(3)	6721(2)	654(2)	38(1)
c(12)	-2427(2)	7272(1)	2166(1)	26(1)
c(13)	-2479(3)	7681(1)	1539(1)	32(1)
c(14)	-3352(3)	8260(1)	1367(2)	39(1)
c(15)	-4190(3)	8437(2)	1829(2)	43(1)
c(16)	-4136(3)	8046(2)	2461(2)	43(1)
c(17)	-3263(3)	7460(1)	2637(2)	37(1)
c(18)	-2258(2)	5756(1)	1837(1)	24(1)
c(19)	-2777(2)	5824(1)	1085(1)	25(1)
c(20)	-3402(3)	5242(1)	679(1)	29(1)
c(21)	-3545(3)	4593(1)	1022(1)	30(1)
c(22)	-3056(3)	4523(1)	1772(1)	32(1)
c(23)	-2406(3)	5100(1)	2183(1)	29(1)
c(24)	1296(3)	4952(1)	2400(2)	30(1)
c(25)	735(3)	4919(1)	1632(2)	39(1)
c(26)	1786(3)	5063(1)	1272(2)	40(1)
c(27)	2984(3)	5179(1)	1812(1)	32(1)
c(28)	2715(3)	5109(1)	2530(1)	26(1)
c(29)	3187(3)	5172(2)	4209(2)	51(1)
c(30)	4876(3)	4198(2)	3463(2)	53(1)
c(31)	5252(3)	5827(2)	3422(2)	56(1)
fe	1537(1)	5926(1)	1918(1)	22(1)
n	1829(2)	7655(1)	3658(1)	24(1)
o	-1120(2)	6304(1)	3197(1)	35(1)
p	-1371(1)	6479(1)	2401(1)	25(1)
si(1)	2284(1)	7012(1)	468(1)	27(1)
si(2)	3999(1)	5094(1)	3417(1)	36(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3,1'-bis(trimethylsilyl)-1-diphenylphosphanoxidferrocenboran (175). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

Anhang

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
b	50(2)	52(2)	20(2)	-11(1)	3(2)	-9(2)
c(1)	47(2)	24(1)	33(2)	-8(1)	10(1)	-12(1)
c(2)	35(2)	34(2)	48(2)	-16(1)	5(1)	10(1)
c(3)	24(1)	17(1)	24(1)	-1(1)	4(1)	-2(1)
c(4)	23(1)	14(1)	23(1)	-5(1)	5(1)	0(1)
c(5)	23(1)	17(1)	22(1)	-2(1)	5(1)	1(1)
c(6)	21(1)	21(1)	23(1)	-4(1)	1(1)	2(1)
c(7)	21(1)	18(1)	25(1)	-4(1)	4(1)	2(1)
c(8)	20(1)	15(1)	27(1)	-4(1)	3(1)	0(1)
c(9)	86(3)	46(2)	51(2)	13(2)	30(2)	5(2)
c(10)	29(2)	69(2)	26(2)	-6(1)	3(1)	8(1)
c(11)	25(2)	56(2)	34(2)	-6(1)	10(1)	-4(1)
c(12)	21(1)	27(1)	31(1)	-12(1)	8(1)	-8(1)
c(13)	27(2)	33(1)	35(2)	-8(1)	9(1)	5(1)
c(14)	38(2)	35(2)	42(2)	-6(1)	5(1)	6(1)
c(15)	29(2)	39(2)	59(2)	-22(1)	4(2)	7(1)
c(16)	32(2)	44(2)	58(2)	-25(2)	21(2)	-5(1)
c(17)	32(2)	39(2)	43(2)	-16(1)	19(1)	-12(1)
c(18)	18(1)	26(1)	29(1)	-1(1)	6(1)	-4(1)
c(19)	20(1)	26(1)	30(1)	0(1)	5(1)	-3(1)
c(20)	21(1)	38(2)	28(1)	-5(1)	2(1)	-3(1)
c(21)	23(1)	28(1)	38(2)	-10(1)	4(1)	-5(1)
c(22)	31(2)	23(1)	42(2)	0(1)	8(1)	-4(1)
c(23)	27(2)	30(1)	27(1)	0(1)	3(1)	-4(1)
c(24)	32(2)	17(1)	41(2)	2(1)	6(1)	-1(1)
c(25)	39(2)	16(1)	53(2)	-9(1)	-8(2)	1(1)
c(26)	64(2)	24(1)	30(2)	-8(1)	5(2)	15(1)
c(27)	38(2)	21(1)	41(2)	-3(1)	14(1)	9(1)
c(28)	26(2)	16(1)	37(2)	-1(1)	6(1)	4(1)
c(29)	64(2)	45(2)	40(2)	7(1)	4(2)	13(2)
c(30)	53(2)	48(2)	51(2)	-1(2)	-4(2)	24(2)
c(31)	32(2)	53(2)	76(2)	-18(2)	2(2)	-1(1)
fe	24(1)	17(1)	24(1)	-5(1)	3(1)	1(1)
n	27(1)	23(1)	23(1)	-8(1)	4(1)	-3(1)
o	36(1)	43(1)	25(1)	-2(1)	8(1)	-14(1)
p	24(1)	26(1)	24(1)	-3(1)	6(1)	-7(1)
si(1)	27(1)	33(1)	23(1)	-2(1)	8(1)	3(1)
si(2)	31(1)	31(1)	42(1)	-3(1)	-1(1)	8(1)

Anhang

5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophan (167)

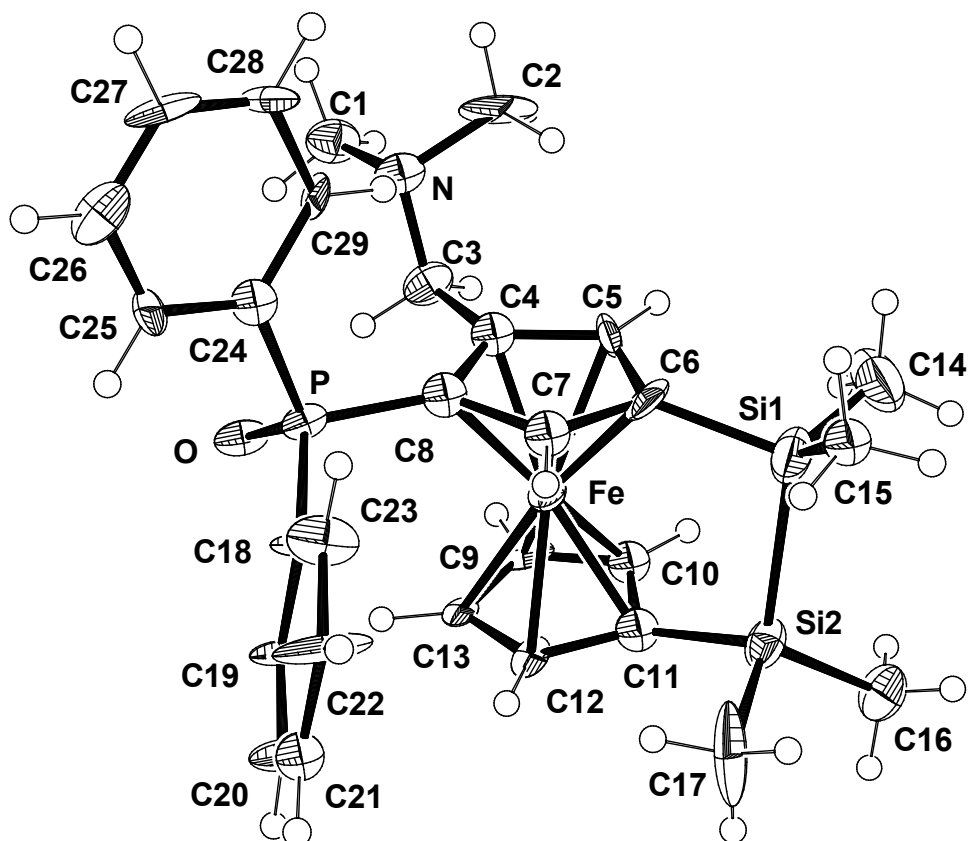


Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophan (167) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophan (167). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	x	y	z	U(eq)
C(1)	2986(16)	2940(20)	298(10)	40(4)
C(2)	4690(20)	4600(30)	155(10)	63(6)
C(3)	4163(15)	4602(19)	1401(9)	33(3)
C(4)	4770(18)	6296(19)	1707(8)	37(4)
C(5)	6059(11)	6690(20)	1838(8)	33(4)
C(6)	6296(14)	8400(20)	2177(9)	38(4)
C(7)	5139(14)	8948(16)	2217(7)	28(3)
C(8)	4109(18)	7730(16)	1934(7)	40(4)
C(9)	5766(16)	4830(20)	3665(8)	36(4)
C(10)	6928(11)	5580(20)	3785(9)	38(4)
C(11)	6820(14)	7337(15)	4068(7)	26(3)
C(12)	5596(12)	7477(17)	4091(7)	25(3)
C(13)	4933(12)	5970(18)	3859(7)	23(3)
C(14)	9051(18)	7800(50)	2436(14)	100(12)
C(15)	7960(30)	11450(40)	2373(14)	160(20)
C(16)	9591(14)	8480(20)	4757(11)	42(4)
C(17)	7379(17)	10930(20)	4553(19)	73(8)
C(18)	2523(15)	9554(18)	2607(8)	30(3)
C(19)	2511(15)	9170(20)	3419(8)	34(3)
C(20)	2556(17)	10430(20)	3977(9)	40(4)
C(21)	2543(18)	12060(20)	3740(8)	45(4)
C(22)	2560(20)	12471(15)	2952(8)	49(5)
C(23)	2554(18)	11262(18)	2375(10)	40(4)
C(24)	1745(10)	8702(15)	896(8)	17(3)
C(25)	588(12)	9367(19)	765(9)	29(3)
C(26)	-98(16)	9959(18)	-31(11)	40(4)
C(27)	414(16)	9790(16)	-646(8)	33(4)
C(28)	1570(14)	9136(19)	-543(8)	32(3)
C(29)	2268(11)	8508(17)	239(8)	22(3)
Fe	5588(2)	6903(2)	2932(1)	24(1)
N	3646(12)	4521(15)	518(7)	31(3)
O	2042(10)	6360(10)	2127(6)	27(2)
P	2565(3)	7888(4)	1918(2)	22(1)
Si(1)	7879(5)	9229(9)	2690(3)	57(2)
Si(2)	7981(4)	9058(5)	4096(3)	32(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-3-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophan (167)]. Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1)	52(10)	32(8)	36(8)	-8(7)	14(7)	-4(7)
C(2)	118(18)	51(11)	23(8)	-30(8)	27(9)	-41(11)
C(3)	39(8)	27(7)	29(7)	1(6)	2(6)	0(6)
C(4)	77(12)	27(7)	0(5)	3(5)	0(6)	-7(7)
C(5)	10(5)	68(11)	23(6)	17(8)	8(5)	0(7)

Anhang

C(6)	31(8)	58(11)	13(7)	6(6)	-10(5)	-19(7)
C(7)	55(9)	14(6)	2(5)	1(4)	-11(5)	-17(6)
C(8)	102(13)	5(6)	0(5)	6(5)	-4(6)	-11(7)
C(9)	57(10)	36(8)	7(6)	10(6)	-3(6)	9(7)
C(10)	0(6)	85(13)	30(8)	15(8)	3(5)	-3(6)
C(11)	52(9)	18(7)	4(5)	11(4)	1(5)	0(5)
C(12)	25(6)	31(7)	12(6)	17(5)	-4(5)	-9(5)
C(13)	24(7)	38(8)	6(5)	7(5)	1(5)	-11(6)
C(14)	32(10)	220(40)	45(11)	31(16)	14(8)	6(15)
C(15)	200(30)	170(30)	41(12)	84(18)	-57(16)	-140(30)
C(16)	27(8)	49(10)	42(10)	5(8)	-3(7)	8(7)
C(17)	25(9)	40(10)	160(20)	17(12)	32(12)	-9(7)
C(18)	52(9)	31(8)	10(6)	-6(5)	12(6)	-2(7)
C(19)	54(9)	37(8)	8(6)	-3(6)	7(6)	-4(7)
C(20)	63(11)	46(10)	10(6)	1(6)	7(6)	-3(8)
C(21)	93(13)	25(8)	14(6)	-19(6)	10(7)	-13(9)
C(22)	127(17)	4(6)	11(6)	-2(5)	12(8)	-11(7)
C(23)	74(12)	13(6)	39(9)	-3(6)	25(8)	-9(7)
C(24)	5(5)	23(6)	28(6)	-8(5)	15(5)	-11(4)
C(25)	20(7)	41(9)	33(8)	-3(6)	16(6)	-11(6)
C(26)	39(9)	24(8)	44(9)	4(7)	-7(7)	4(7)
C(27)	70(11)	9(6)	8(6)	6(5)	-7(6)	-4(6)
C(28)	47(9)	38(8)	10(6)	-3(6)	8(6)	6(7)
C(29)	7(5)	25(7)	30(7)	-5(5)	-2(5)	9(5)
Fe	23(1)	29(1)	17(1)	5(1)	2(1)	-2(1)
N	43(7)	21(6)	28(6)	-1(5)	7(5)	-3(5)
O	46(6)	11(4)	21(5)	-2(3)	6(4)	-2(4)
P	30(2)	13(2)	18(2)	1(1)	2(1)	-2(1)
Si(1)	35(2)	98(5)	30(2)	16(3)	0(2)	-32(3)
Si(2)	24(2)	34(2)	30(2)	8(2)	-2(2)	-4(2)

Anhang

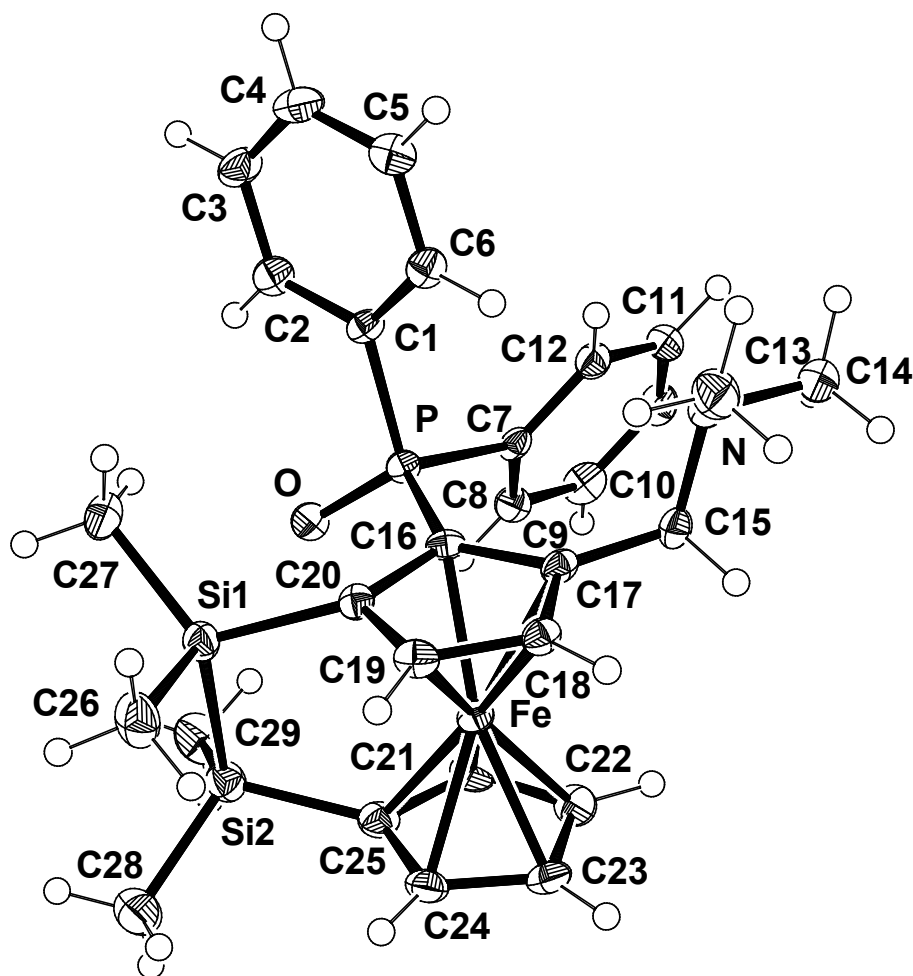
5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophan (167)

Abbildung: Molekülstruktur von 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophan (167) (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphanoxidferrocenophan (167). $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
C(1)	7042(3)	5628(2)	1997(2)	17(1)
C(2)	8606(4)	5347(2)	2517(2)	23(1)
C(3)	8960(4)	4434(2)	2636(3)	28(1)
C(4)	7752(4)	3801(2)	2234(3)	28(1)
C(5)	6208(4)	4080(2)	1722(3)	24(1)
C(6)	5835(3)	4998(2)	1603(2)	22(1)
C(7)	6964(3)	7106(2)	415(2)	17(1)
C(8)	7815(3)	7906(2)	235(3)	21(1)
C(9)	8234(3)	8112(2)	-836(2)	27(1)
C(10)	7810(4)	7515(2)	-1730(3)	26(1)
C(11)	6977(4)	6724(2)	-1564(3)	24(1)
C(12)	6564(3)	6515(2)	-495(3)	21(1)
C(13)	1229(4)	5568(2)	78(3)	32(1)

Anhang

C(14)	2294(4)	6128(2)	-1574(3)	32(1)
C(15)	2650(3)	7005(2)	127(2)	20(1)
C(16)	4558(3)	6985(2)	2139(2)	16(1)
C(17)	2974(3)	7039(2)	1391(2)	18(1)
C(18)	1703(3)	7128(2)	2106(3)	19(1)
C(19)	2441(3)	7138(2)	3259(3)	20(1)
C(20)	4220(3)	7056(2)	3308(2)	17(1)
C(21)	4910(4)	9196(2)	2005(3)	26(1)
C(22)	3292(4)	9288(2)	1375(3)	27(1)
C(23)	2108(4)	9363(2)	2166(3)	27(1)
C(24)	3003(4)	9309(2)	3273(3)	23(1)
C(25)	4761(4)	9202(2)	3207(3)	23(1)
C(26)	4235(4)	7307(2)	5793(3)	34(1)
C(27)	7405(4)	6507(2)	5076(3)	30(1)
C(28)	5981(4)	9545(2)	5705(3)	37(1)
C(29)	8553(4)	9134(2)	4111(3)	36(1)
Fe	3390(1)	8165(1)	2387(1)	17(1)
N	2578(3)	6089(2)	-329(2)	22(1)
O	7855(2)	7361(1)	2676(2)	21(1)
P	6669(1)	6835(1)	1864(1)	16(1)
Si(1)	5665(1)	7336(1)	4656(1)	22(1)
Si(2)	6382(1)	8869(1)	4425(1)	24(1)

Anhang

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für 5-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-2-[2]-tetramethylsila-1-diphenylphosphan-oxidferrocenophan (167). Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1)	16(1)	18(1)	19(2)	3(1)	7(1)	4(1)
C(2)	21(2)	24(2)	25(2)	0(1)	5(1)	1(1)
C(3)	23(2)	29(2)	31(2)	1(1)	4(1)	12(1)
C(4)	35(2)	19(2)	32(2)	2(1)	12(1)	7(1)
C(5)	26(2)	22(2)	27(2)	-1(1)	9(1)	-4(1)
C(6)	18(1)	25(2)	22(2)	2(1)	6(1)	2(1)
C(7)	15(1)	20(1)	16(1)	4(1)	5(1)	6(1)
C(8)	17(1)	23(2)	23(2)	-1(1)	3(1)	0(1)
C(9)	22(1)	28(2)	32(2)	7(2)	9(1)	0(1)
C(10)	27(2)	34(2)	18(2)	6(1)	9(1)	5(1)
C(11)	27(2)	26(2)	20(2)	-3(1)	3(1)	4(1)
C(12)	18(1)	21(2)	22(2)	1(1)	1(1)	2(1)
C(13)	31(2)	30(2)	34(2)	-2(2)	-1(1)	-5(1)
C(14)	35(2)	34(2)	26(2)	-4(1)	-2(1)	11(2)
C(15)	15(1)	24(2)	20(2)	2(1)	-1(1)	2(1)
C(16)	15(1)	14(1)	21(2)	0(1)	6(1)	1(1)
C(17)	13(1)	16(1)	25(2)	0(1)	-1(1)	0(1)
C(18)	14(1)	18(1)	23(2)	1(1)	2(1)	0(1)
C(19)	20(1)	20(1)	21(2)	1(1)	11(1)	-1(1)
C(20)	19(1)	14(1)	17(2)	3(1)	2(1)	-2(1)
C(21)	33(2)	18(2)	28(2)	1(1)	11(1)	-5(1)
C(22)	44(2)	18(2)	20(2)	7(1)	6(1)	1(1)
C(23)	29(2)	18(2)	33(2)	-1(1)	1(1)	8(1)
C(24)	33(2)	16(1)	22(2)	-2(1)	6(1)	3(1)
C(25)	23(2)	16(1)	28(2)	-2(1)	2(1)	-2(1)
C(26)	32(2)	50(2)	21(2)	1(2)	9(1)	2(2)
C(27)	32(2)	33(2)	24(2)	5(1)	-2(1)	8(1)
C(28)	37(2)	40(2)	33(2)	-9(2)	1(2)	3(2)
C(29)	27(2)	42(2)	40(2)	-8(2)	6(2)	-11(2)
Fe	16(1)	16(1)	19(1)	1(1)	4(1)	2(1)
N	21(1)	22(1)	23(1)	-2(1)	-1(1)	5(1)
O	16(1)	24(1)	23(1)	-1(1)	3(1)	-1(1)
P	12(1)	18(1)	18(1)	0(1)	4(1)	1(1)
Si(1)	21(1)	26(1)	18(1)	-1(1)	3(1)	2(1)
Si(2)	22(1)	27(1)	24(1)	-3(1)	2(1)	-1(1)

Anhang

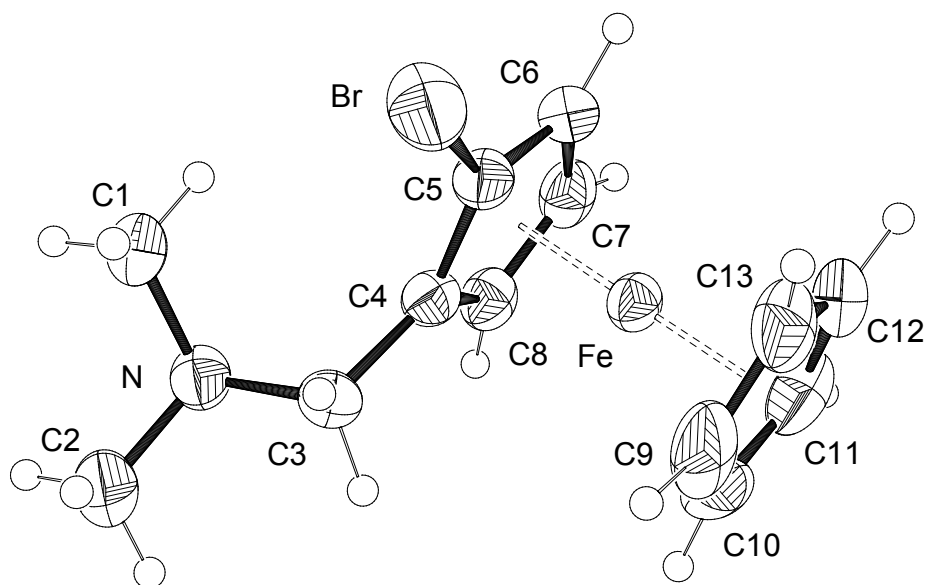
(R_p)-1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [*(R_p*)-188]

Abbildung: Molekülstruktur von (*R_p*)-1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [*(R_p*)-188] (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (*R_p*)-1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [*(R_p*)-188]. $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	X	Y	Z	U(eq)
Br	3731(1)	8334(1)	6016(1)	64(1)
C(1)	4319(7)	13035(8)	6777(5)	50(1)
C(2)	4760(9)	13702(11)	8929(5)	74(2)
C(3)	2945(7)	11294(7)	8222(4)	41(1)
C(4)	1510(7)	10635(6)	7277(4)	36(1)
C(5)	-269(8)	11164(7)	7125(5)	42(1)
C(6)	-1204(7)	10282(7)	6107(5)	47(1)
C(7)	-36(7)	9176(7)	5583(5)	43(1)
C(8)	1607(7)	9400(7)	6313(5)	39(1)
C(9)	826(11)	7126(10)	8901(7)	79(3)
C(10)	-655(13)	8056(9)	9154(6)	76(2)
C(11)	-2029(9)	7499(9)	8256(6)	62(2)
C(12)	-1395(9)	6277(8)	7504(6)	55(2)
C(13)	323(10)	6045(8)	7873(7)	61(2)
Fe	-103(1)	8566(1)	7409(1)	36(1)
N	3521(5)	13018(6)	7916(4)	42(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (*R_p*)-1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [*(R_p*)-188].

Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U^{11} + \dots + 2hk a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Br	53(1)	63(1)	82(1)	-26(1)	27(1)	-5(1)
C(1)	51(3)	45(3)	54(3)	3(3)	10(3)	-10(3)
C(2)	78(4)	85(6)	65(4)	-21(4)	23(3)	-40(5)
C(3)	45(3)	41(3)	36(3)	-7(2)	8(2)	-2(2)

Anhang

C(4)	41(3)	34(3)	34(2)	2(2)	8(2)	2(2)
C(5)	47(3)	34(3)	47(3)	3(2)	13(3)	1(2)
C(6)	45(3)	45(3)	50(3)	16(3)	1(3)	-4(3)
C(7)	49(3)	45(3)	35(2)	-1(2)	8(2)	-6(2)
C(8)	41(3)	37(3)	42(3)	-5(2)	15(2)	0(2)
C(9)	80(5)	68(5)	79(5)	47(4)	-29(4)	-27(4)
C(10)	143(7)	47(4)	41(3)	3(3)	24(4)	-21(5)
C(11)	62(4)	53(4)	78(5)	17(3)	35(4)	3(3)
C(12)	59(4)	45(3)	63(4)	2(3)	13(3)	-19(3)
C(13)	71(5)	30(3)	83(4)	6(3)	22(4)	-1(3)
Fe	40(1)	30(1)	38(1)	1(1)	9(1)	0(1)
N	40(2)	40(2)	47(2)	-6(2)	12(2)	-2(2)

(R_p) -1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran $[(R_p)$ -190]

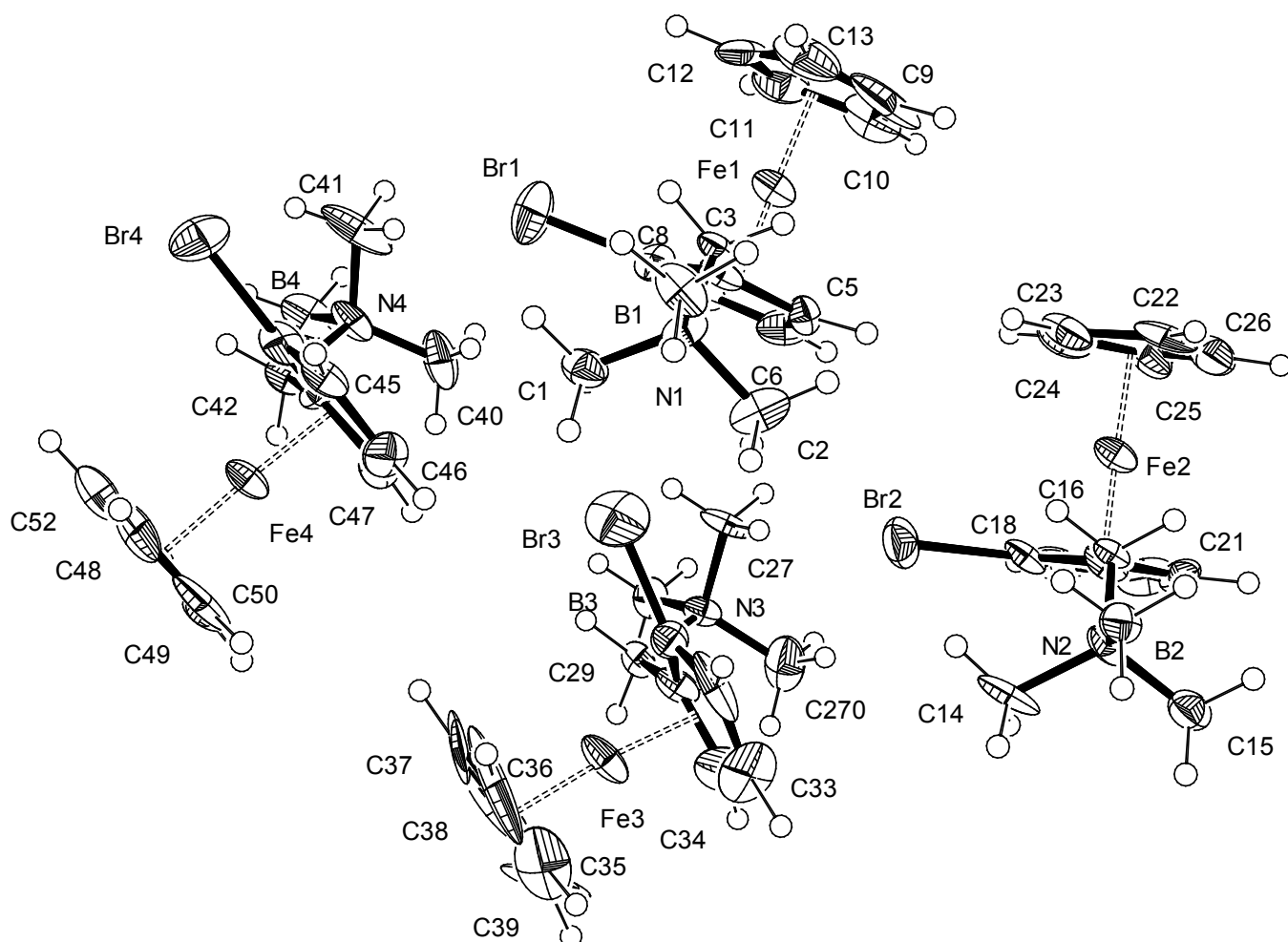


Abbildung: Molekülstruktur von (R_p) -1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran $[(R_p)$ -190] im Kristall (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (R_p) -1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran $[(R_p)$ -190]. $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

Anhang

	X	X	Z	U(eq)
B(1)	7921(12)	313(12)	3462(7)	34(3)
C(15)	1154(8)	1636(10)	3025(6)	36(3)
B(3)	5276(11)	9484(13)	1637(7)	31(3)
B(4)	10314(14)	9354(13)	1497(8)	45(4)
Br(1)	9239(1)	3945(1)	1901(1)	56(1)
Br(2)	4073(1)	4155(1)	2177(1)	48(1)
Br(3)	6596(1)	5646(2)	2930(1)	68(1)
Br(4)	11812(1)	5973(1)	3034(1)	55(1)
C(1)	8052(9)	2661(12)	3389(6)	35(3)
C(2)	6472(8)	1673(12)	3219(6)	40(3)
C(3)	7698(9)	1525(11)	2331(5)	24(2)
C(4)	7376(10)	2626(11)	1926(6)	27(3)
C(5)	6389(8)	2817(12)	1654(5)	27(2)
C(6)	6350(10)	3921(13)	1300(7)	42(3)
C(7)	7275(12)	4402(12)	1282(6)	39(3)
C(8)	7918(9)	3622(11)	1723(6)	29(3)
C(9)	7028(18)	1199(13)	326(8)	85(7)
C(10)	6902(11)	2332(12)	-106(5)	53(4)
C(11)	7878(12)	2846(15)	-104(8)	52(4)
C(12)	8474(10)	2178(16)	284(7)	56(4)
C(13)	7978(16)	1100(17)	525(8)	65(5)
C(14)	2665(11)	2672(13)	3426(6)	51(4)
B(2)	2560(10)	335(12)	3431(7)	32(3)
C(16)	2618(9)	1547(10)	2334(5)	20(2)
C(17)	2340(10)	2637(10)	1865(6)	27(3)
C(18)	2894(10)	3705(12)	1766(6)	31(3)
C(19)	2373(13)	4440(13)	1263(7)	44(4)
C(20)	1537(10)	3852(12)	1103(6)	42(3)
C(21)	1504(8)	2765(13)	1458(6)	36(3)
C(22)	3209(12)	1102(13)	521(7)	46(4)
C(23)	3983(10)	2006(13)	595(6)	45(3)
C(24)	3768(11)	2913(13)	138(7)	53(3)
C(25)	2885(11)	2721(15)	-157(7)	47(4)
C(26)	2525(13)	1613(14)	75(9)	73(5)
C(27)	5312(10)	7176(11)	1626(5)	35(3)
C(29)	5240(9)	8252(10)	2737(5)	24(2)
C(30)	4891(11)	7229(11)	3151(5)	30(3)
C(31)	5400(11)	6092(11)	3344(6)	36(3)
C(32)	4856(15)	5367(12)	3754(6)	52(5)
C(33)	4000(11)	6032(14)	3919(7)	60(4)
C(34)	4011(12)	7162(13)	3546(6)	50(4)
C(35)	5229(18)	7140(20)	5197(8)	84(8)
C(36)	6110(20)	6850(20)	5010(13)	138(13)
C(37)	6506(14)	7790(30)	4566(9)	94(7)
C(38)	5730(20)	8554(16)	4490(9)	99(9)
C(39)	4910(20)	8320(20)	4865(11)	151(14)
C(40)	8907(10)	7837(14)	1737(7)	55(4)

Anhang

C(41)	10506(14)	7069(12)	1560(6)	63(5)
C(42)	10170(10)	8194(10)	2608(6)	29(3)
C(43)	9844(8)	7132(11)	3034(5)	22(2)
C(44)	10492(10)	6133(11)	3281(7)	38(3)
C(45)	9966(11)	5291(11)	3666(6)	32(3)
C(46)	8988(10)	5766(12)	3687(6)	39(3)
C(47)	8898(9)	6887(12)	3313(6)	36(3)
C(48)	10354(13)	8672(13)	4403(6)	49(4)
C(49)	9441(10)	8402(10)	4709(5)	38(3)
C(50)	9594(13)	7292(12)	5070(6)	61(4)
C(51)	10543(12)	6943(14)	5042(7)	48(4)
C(52)	11068(12)	7879(12)	4610(7)	49(3)
C(270)	3781(10)	8142(16)	1953(7)	56(4)
Fe(1)	7365(1)	2714(1)	887(1)	29(1)
Fe(2)	2715(1)	2784(1)	867(1)	29(1)
Fe(3)	5219(2)	7038(1)	4175(1)	39(1)
Fe(4)	9941(1)	7036(1)	4071(1)	29(1)
N(1)	7534(7)	1583(9)	3094(5)	28(2)
N(2)	2241(7)	1597(10)	3034(5)	31(2)
N(3)	4883(7)	8237(9)	1989(5)	25(2)
N(4)	9933(8)	8086(10)	1840(4)	33(2)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (R_p)-1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran [(R_p)-190]. Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^2U^{11} + \dots + 2hka^*b^*U^{12}]$.

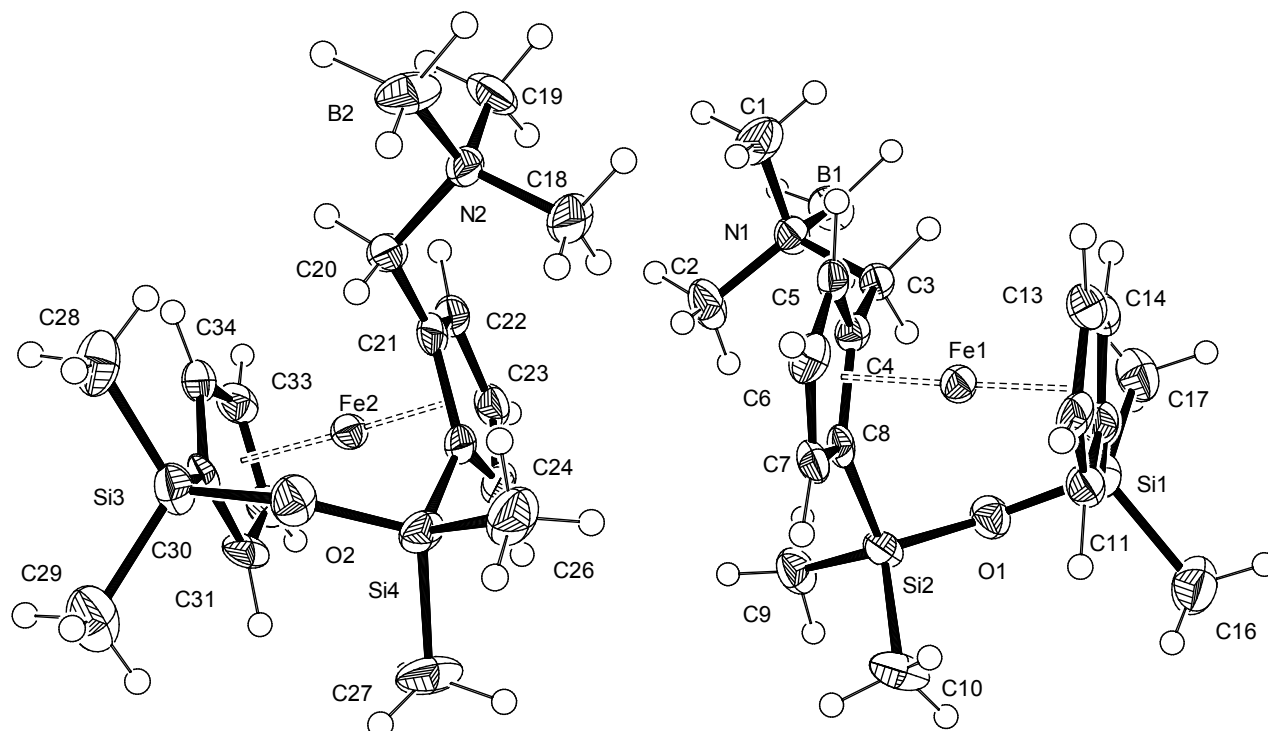
	U11	U22	U33	U23	U13	U12
B(1)	64(9)	15(6)	24(6)	10(5)	-15(6)	7(6)
C(15)	47(7)	28(5)	34(7)	-6(5)	7(5)	-5(5)
B(3)	37(7)	39(8)	18(6)	13(5)	-2(5)	-11(6)
B(4)	82(11)	20(7)	34(7)	8(6)	1(7)	5(7)
Br(1)	38(1)	54(1)	78(1)	16(1)	-4(1)	-21(1)
Br(2)	53(1)	47(1)	45(1)	-7(1)	2(1)	-26(1)
Br(3)	70(1)	57(1)	77(1)	7(1)	-11(1)	34(1)
Br(4)	46(1)	44(1)	75(1)	10(1)	12(1)	17(1)
C(1)	41(6)	30(6)	33(6)	-5(5)	-2(5)	10(6)
C(2)	39(6)	39(6)	40(7)	26(5)	10(5)	15(5)
C(3)	35(6)	21(5)	15(5)	-5(4)	4(5)	-3(5)
C(4)	46(7)	16(5)	20(5)	-4(5)	3(5)	3(5)
C(5)	29(5)	28(5)	24(6)	-1(5)	-4(4)	-4(5)
C(6)	49(7)	33(6)	43(7)	3(6)	10(6)	17(6)
C(7)	72(9)	24(7)	21(6)	5(5)	4(6)	8(6)
C(8)	26(5)	23(6)	40(7)	3(5)	-2(5)	11(5)
C(9)	170(20)	32(7)	53(10)	-28(7)	44(12)	-38(10)
C(10)	87(10)	66(9)	7(5)	1(5)	-6(6)	7(7)
C(11)	74(10)	39(7)	43(8)	-1(7)	20(7)	0(8)
C(12)	42(7)	78(11)	47(8)	-34(8)	11(6)	19(7)
C(13)	102(13)	38(8)	55(9)	-14(7)	-14(9)	35(9)
C(14)	93(11)	36(7)	23(6)	-18(6)	3(6)	12(8)

Anhang

B(2)	40(7)	20(6)	35(7)	0(5)	9(6)	-7(5)
C(16)	32(6)	15(5)	14(5)	-3(4)	2(4)	1(4)
C(17)	50(7)	11(5)	21(5)	7(5)	-2(5)	4(5)
C(18)	49(7)	26(6)	17(5)	-9(5)	-2(5)	1(5)
C(19)	73(9)	26(7)	32(7)	3(6)	26(7)	-1(7)
C(20)	53(7)	37(7)	35(7)	24(6)	15(6)	21(6)
C(21)	23(5)	38(6)	46(7)	-4(6)	9(5)	5(5)
C(22)	77(9)	26(6)	35(7)	-10(6)	2(7)	34(7)
C(23)	61(8)	43(7)	32(6)	-18(6)	-3(6)	12(6)
C(24)	81(9)	44(7)	33(7)	-3(6)	11(7)	5(7)
C(25)	64(9)	45(7)	32(7)	-10(6)	-24(6)	8(7)
C(26)	72(10)	64(9)	83(13)	-45(9)	36(9)	-28(8)
C(27)	67(8)	25(6)	13(5)	-5(5)	5(5)	14(6)
C(29)	31(6)	25(5)	15(5)	4(5)	-9(4)	5(5)
C(30)	53(7)	23(6)	14(5)	3(4)	0(5)	2(6)
C(31)	78(9)	10(5)	20(5)	-18(5)	-32(6)	16(6)
C(32)	114(13)	17(6)	25(6)	13(5)	-31(8)	-30(8)
C(33)	66(9)	60(9)	52(9)	38(8)	15(7)	-20(8)
C(34)	79(10)	41(7)	31(7)	18(6)	18(7)	0(7)
C(35)	115(17)	111(17)	25(7)	24(10)	0(10)	-61(15)
C(36)	240(30)	72(13)	105(19)	0(13)	-140(20)	-37(19)
C(37)	80(12)	150(20)	49(10)	-30(13)	-24(8)	-74(14)
C(38)	220(30)	33(9)	44(9)	-10(7)	-48(15)	-19(13)
C(39)	200(30)	170(30)	81(15)	-88(18)	94(19)	-50(20)
C(40)	64(8)	65(9)	37(7)	-2(7)	-28(6)	-14(8)
C(41)	151(15)	17(6)	22(6)	0(5)	13(8)	3(8)
C(42)	46(7)	10(5)	32(6)	1(4)	3(5)	0(5)
C(43)	18(5)	34(6)	13(4)	4(5)	2(4)	4(5)
C(44)	51(7)	15(5)	47(7)	-5(6)	-14(6)	16(6)
C(45)	57(7)	12(5)	27(6)	-1(4)	1(6)	1(5)
C(46)	40(6)	33(7)	44(7)	5(6)	9(5)	-9(5)
C(47)	44(7)	28(6)	37(7)	8(5)	-2(5)	-6(5)
C(48)	109(12)	25(6)	12(5)	-3(4)	-10(6)	-5(7)
C(49)	54(7)	37(6)	23(6)	-16(5)	5(5)	-4(5)
C(50)	121(14)	44(7)	18(6)	-15(5)	-6(7)	-19(8)
C(51)	81(11)	38(7)	26(6)	1(6)	-32(7)	5(8)
C(52)	78(9)	28(7)	40(7)	-9(6)	-13(6)	-9(7)
C(270)	54(8)	76(10)	36(7)	13(7)	-9(6)	-23(7)
Fe(1)	47(1)	21(1)	19(1)	2(1)	-1(1)	3(1)
Fe(2)	47(1)	23(1)	17(1)	0(1)	-3(1)	6(1)
Fe(3)	79(1)	23(1)	16(1)	2(1)	-4(1)	-13(1)
Fe(4)	53(1)	14(1)	19(1)	-1(1)	0(1)	-3(1)
N(1)	25(4)	22(4)	36(5)	11(4)	8(4)	6(4)
N(2)	50(6)	27(4)	15(4)	-4(4)	1(4)	-10(4)
N(3)	37(5)	18(4)	18(4)	3(4)	6(4)	1(4)
N(4)	60(6)	33(5)	7(4)	2(3)	-1(4)	-7(5)

Anhang

(*R_p*)-2-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-[3]-tetramethyldisiloxanyferrocenophanboran [(*R_p*)-34]



Molekülstruktur von (*R_p*)-2-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-[3]-tetramethyldisiloxanyferrocenophanboran [(*R_p*)-198] im Kristall (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (*R_p*)-2-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-[3]-tetramethyldisiloxanyferrocenophanboran [(*R_p*)-198]. U(eq) wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	X	Y	Z	U(eq)
B(1)	-1791(9)	911(5)	620(5)	38(2)
B(2)	6817(9)	4278(6)	320(5)	43(2)
C(1)	943(7)	1549(4)	269(4)	43(2)
C(2)	-522(9)	2101(4)	1478(4)	47(2)
C(3)	636(6)	672(3)	1530(3)	24(1)
C(4)	2019(6)	967(3)	2052(3)	23(1)
C(5)	3594(7)	1133(3)	1755(4)	26(1)
C(6)	4550(8)	1409(4)	2434(4)	32(1)
C(7)	3505(7)	1438(3)	3174(4)	31(1)
C(8)	1936(7)	1157(3)	2969(3)	24(1)
C(9)	-1405(7)	1554(4)	3791(4)	37(2)
C(10)	1372(8)	856(4)	4817(3)	43(2)
C(11)	3911(7)	-664(3)	3596(4)	31(1)
C(12)	5368(7)	-545(4)	3139(3)	30(1)
C(13)	5067(7)	-752(4)	2284(4)	32(2)
C(14)	3415(7)	-991(3)	2219(4)	29(1)
C(15)	2649(7)	-929(4)	3035(4)	29(1)
C(16)	297(8)	-1720(4)	4312(4)	53(2)
C(17)	-597(8)	-1519(4)	2441(4)	44(2)
C(18)	5413(9)	3161(4)	1243(4)	51(2)
C(19)	4012(7)	3700(4)	33(4)	42(2)

Anhang

C(20)	4401(7)	4629(4)	1266(3)	28(1)
C(21)	2990(7)	4377(3)	1820(4)	26(1)
C(22)	1356(7)	4251(3)	1538(4)	29(1)
C(23)	412(8)	4011(4)	2241(4)	32(1)
C(24)	1412(7)	3989(4)	2963(4)	31(1)
C(25)	3007(7)	4229(3)	2728(4)	27(1)
C(26)	6316(8)	3794(4)	3542(4)	47(2)
C(27)	3601(8)	4616(4)	4562(3)	46(2)
C(28)	5712(7)	6860(4)	2036(4)	44(2)
C(29)	4923(9)	7107(4)	3931(4)	54(2)
C(30)	2453(7)	6341(3)	2736(4)	25(1)
C(31)	1186(7)	6132(3)	3308(4)	30(1)
C(32)	-281(7)	6009(4)	2863(4)	30(1)
C(33)	57(7)	6176(3)	1987(4)	32(2)
C(34)	1725(7)	6371(3)	1910(4)	29(1)
Fe(1)	3596(1)	227(1)	2676(1)	23(1)
Fe(2)	1443(1)	5181(1)	2424(1)	24(1)
N(1)	-160(5)	1322(3)	986(3)	27(1)
N(2)	5127(5)	3940(3)	724(3)	28(1)
O(1)	-287(5)	-110(2)	3549(2)	33(1)
O(2)	5346(5)	5472(2)	3202(2)	35(1)
Si(1)	494(2)	-1050(1)	3332(1)	31(1)
Si(2)	392(2)	848(1)	3763(1)	28(1)
Si(3)	4622(2)	6425(1)	2976(1)	33(1)
Si(4)	4595(2)	4545(1)	3490(1)	30(1)

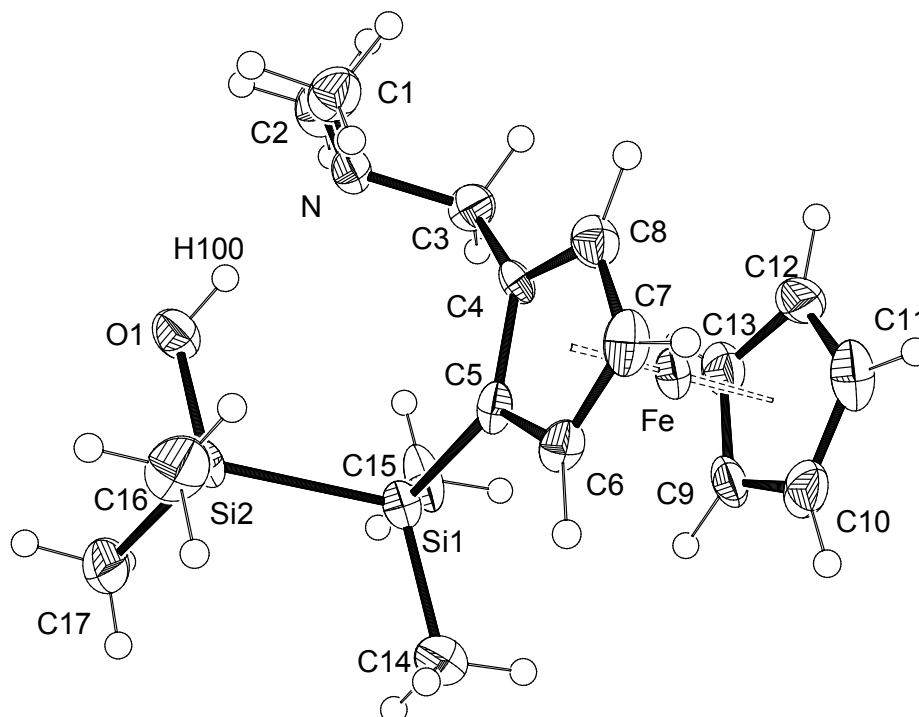
Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (R_p)-2-*N,N*-Dimethyl(aminomethyl)-1,1'-[3]-tetramethyldisiloxanylferrocenophanboran [(R_p)-198]. Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^2U^{11} + \dots + 2hkab^*U^{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
B(1)	39(4)	42(4)	34(4)	-5(3)	-19(3)	9(4)
B(2)	35(4)	65(6)	30(4)	7(4)	12(3)	10(4)
C(1)	51(4)	46(4)	32(3)	11(3)	-15(3)	-3(3)
C(2)	74(5)	27(3)	40(4)	-7(3)	-28(4)	20(3)
C(3)	28(3)	22(3)	23(3)	0(2)	-6(2)	2(2)
C(4)	23(3)	22(3)	24(3)	2(2)	-5(2)	2(2)
C(5)	31(3)	16(3)	30(3)	1(2)	2(3)	4(2)
C(6)	26(3)	29(3)	40(3)	8(3)	0(3)	-4(3)
C(7)	45(4)	16(3)	30(3)	-5(2)	-5(3)	0(3)
C(8)	27(3)	14(3)	31(3)	-1(2)	-6(2)	8(2)
C(9)	39(4)	30(3)	43(4)	-7(3)	-3(3)	10(3)
C(10)	39(3)	61(4)	28(3)	-16(3)	-3(3)	9(4)
C(11)	40(4)	25(3)	27(3)	-3(3)	-12(3)	7(3)
C(12)	30(3)	26(3)	34(3)	10(3)	-4(3)	11(3)
C(13)	34(4)	28(3)	35(4)	0(3)	6(3)	15(3)
C(14)	36(3)	19(3)	30(3)	-4(2)	-7(3)	3(3)
C(15)	35(3)	22(3)	30(3)	3(3)	-6(3)	4(3)
C(16)	57(4)	39(4)	62(5)	11(4)	9(4)	1(4)

Anhang

C(17)	44(4)	32(3)	57(4)	-7(3)	3(4)	-4(3)
C(18)	78(5)	33(4)	42(4)	13(3)	17(4)	30(4)
C(19)	57(4)	39(4)	30(3)	-17(3)	-1(3)	4(3)
C(20)	32(3)	26(3)	25(3)	2(3)	5(3)	9(3)
C(21)	34(3)	14(3)	31(3)	1(2)	-2(3)	10(2)
C(22)	32(3)	21(3)	32(3)	-1(3)	3(3)	1(2)
C(23)	36(3)	22(3)	37(3)	-6(3)	4(3)	-8(3)
C(24)	38(4)	22(3)	31(3)	8(3)	9(3)	4(3)
C(25)	38(3)	16(3)	27(3)	2(2)	5(3)	9(2)
C(26)	54(4)	42(4)	46(4)	14(3)	-7(4)	6(3)
C(27)	46(4)	70(5)	21(3)	7(3)	-3(3)	23(4)
C(28)	35(4)	30(3)	66(4)	9(3)	3(3)	4(3)
C(29)	63(5)	36(4)	63(5)	-2(4)	-27(4)	13(3)
C(30)	31(3)	14(3)	31(3)	-9(2)	-7(3)	4(2)
C(31)	33(3)	34(3)	23(3)	-8(3)	3(3)	16(3)
C(32)	22(3)	32(3)	34(3)	-5(3)	0(3)	4(3)
C(33)	38(4)	28(3)	30(3)	-4(3)	-5(3)	12(3)
C(34)	40(4)	16(3)	32(3)	1(3)	1(3)	14(3)
Fe(1)	25(1)	22(1)	23(1)	0(1)	-3(1)	1(1)
Fe(2)	25(1)	24(1)	22(1)	0(1)	1(1)	4(1)
N(1)	30(3)	24(2)	26(2)	0(2)	-7(2)	5(2)
N(2)	34(3)	22(2)	29(3)	4(2)	10(2)	6(2)
O(1)	33(2)	29(2)	37(2)	-2(2)	7(2)	-1(2)
O(2)	36(2)	31(2)	38(2)	2(2)	-8(2)	5(2)
Si(1)	32(1)	24(1)	38(1)	2(1)	2(1)	1(1)
Si(2)	31(1)	28(1)	25(1)	-7(1)	-1(1)	4(1)
Si(3)	36(1)	24(1)	41(1)	-2(1)	-8(1)	3(1)
Si(4)	33(1)	31(1)	26(1)	7(1)	-4(1)	6(1)

Anhang

(R_p)-1-(2-Hydroxy-1,1,2,2-tetramethyldisilanyl)-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [(*R_p*)-35]Molekülstruktur von (*R_p*)-1-(2-Hydroxy-1,1,2,2-tetramethyldisilanyl)-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [(*R_p*)-196] im Kristall (Ortep, Aufenthaltswahrscheinlichkeit 50 %).

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (*R_p*)-1-(2-Hydroxy-1,1,2,2-tetramethyldisilanyl)-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [(*R_p*)-196]. $U(\text{eq})$ wird berechnet als ein Drittel der Spur des orthogonalen U_{ij} Tensors.

	X	Y	Z	U(eq)
C(1)	6534(9)	-809(9)	5060(2)	42(2)
C(2)	5069(9)	1328(9)	4909(1)	38(2)
C(3)	6365(8)	1421(8)	5326(1)	32(2)
C(4)	5435(7)	2705(7)	5429(1)	20(1)
C(5)	4295(7)	2625(7)	5633(1)	25(2)
C(6)	3733(7)	4171(7)	5661(1)	27(2)
C(7)	4482(8)	5167(8)	5484(1)	34(2)
C(8)	5526(8)	4243(8)	5341(1)	32(2)
C(9)	6720(8)	3619(8)	6104(1)	34(2)
C(10)	6435(9)	5167(10)	6080(2)	42(2)
C(11)	7416(9)	5756(10)	5885(2)	45(2)
C(12)	8323(8)	4538(10)	5785(1)	38(2)
C(13)	7846(9)	3178(10)	5921(1)	38(2)
C(14)	2477(9)	1719(10)	6108(2)	44(2)
C(15)	5106(9)	-340(9)	5936(2)	43(2)
C(16)	855(12)	-1897(11)	5693(2)	58(3)
C(17)	602(9)	1016(10)	5378(2)	48(2)
Fe	6026(1)	4120(1)	5731(1)	26(1)
N	5539(6)	458(6)	5139(1)	28(1)
O(1)	3013(6)	-1211(6)	5306(1)	35(1)

Anhang

Si(1)	3555(2)	961(2)	5820(1)	28(1)
Si(2)	1965(2)	-369(2)	5531(1)	28(1)

Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für die Verbindung (R_p)-1-(2-Hydroxy-1,1,2,2-tetramethyldisilanyl)-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocen [(R_p)-196]. Der Exponent des anisotropen Auslenkungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2[h^2a^*2U_{11} + \dots + 2hkab^*U_{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1)	32(4)	58(5)	-14(4)	5(4)	6(3)	36(4)
C(2)	35(4)	41(5)	37(4)	-6(4)	-2(3)	4(4)
C(3)	25(4)	40(4)	30(4)	-3(3)	-3(3)	3(3)
C(4)	8(3)	22(3)	29(3)	3(3)	-3(3)	-3(2)
C(5)	19(4)	19(3)	36(4)	-8(3)	-8(3)	2(3)
C(6)	22(4)	21(3)	37(4)	-8(3)	-4(3)	10(3)
C(7)	35(4)	23(4)	44(4)	-2(3)	-14(3)	3(3)
C(8)	37(4)	30(4)	29(4)	7(3)	-6(3)	-3(3)
C(9)	30(4)	36(4)	35(4)	2(3)	-6(3)	-16(3)
C(10)	29(4)	47(5)	49(5)	-17(4)	-6(4)	-5(4)
C(11)	38(5)	33(5)	64(5)	-4(4)	-13(4)	-5(4)
C(12)	23(4)	55(5)	36(4)	-6(4)	4(3)	-7(4)
C(13)	36(4)	40(5)	38(4)	1(4)	-6(4)	-9(4)
C(14)	35(5)	54(5)	42(5)	-6(4)	7(4)	-8(4)
C(15)	33(4)	37(5)	59(5)	15(4)	-19(4)	-14(4)
C(16)	70(6)	58(6)	45(5)	-11(4)	11(5)	-38(5)
C(17)	35(5)	52(5)	56(5)	-16(4)	-5(4)	22(4)
Fe	21(1)	22(1)	35(1)	-2(1)	-5(1)	-4(1)
N	22(3)	20(3)	42(3)	-9(3)	8(3)	1(2)
O(1)	27(3)	30(3)	47(3)	-3(2)	6(2)	-1(2)
Si(1)	24(1)	26(1)	33(1)	0(1)	-2(1)	-5(1)
Si(2)	22(1)	25(1)	37(1)	0(1)	-1(1)	-7(1)

Anhang

Angaben zu den quantenchemischen Berechnungen

Angaben zu den Berechnungen der energetischen Lage der Konformere von (*R_p*)-1-Brom-2-*N,N*-dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran [(*R_p*)-188]

Tabelle 1: Energien der Konformere A–C berechnet auf dem Niveau [M052X/6-31+G(d)].

Konformer	SCF [Hartree]	ZPE [Hartree]
A	-4421.57802335	-4421.2761590
B	-4421.57427986	-4421.2747560
C	-4421.57194284	-4421.269978

Tabelle 2: Standard-Orientierung von Konformer A [M052X/6-31+G(d)].

Atomsymbol	X	Y	Z
B	-0.000013018	-0.000003254	0.000003218
C	0.000008136	0.000004133	-0.000020391
C	0.000067113	0.000009189	-0.000053424
C	0.000005205	-0.000013502	0.000008152
C	0.000018540	-0.000009747	-0.000000909
C	-0.000008843	-0.000003645	0.000006871
C	0.000017275	-0.000011360	0.000031579
C	-0.000023054	0.000004876	0.000012932
C	0.000008817	0.000008874	-0.000006660
C	0.000024623	-0.000005193	-0.000003962
C	-0.000005687	0.000011579	-0.000019864
C	-0.000022715	0.000011758	0.000013558
C	-0.000067790	0.000002134	-0.000021262
C	-0.000005528	-0.000017617	0.000016517
N	-0.000005939	0.000004495	-0.000007274
Fe	0.000017120	0.000000087	0.000036673
Br	0.000003624	-0.000023896	0.000015353
H	-0.000017930	0.000006211	-0.000000888
H	-0.000017501	-0.000010529	0.000005816
H	-0.000010032	-0.000002679	0.000000238
H	0.000007287	0.000014047	-0.000009399
H	0.000004117	0.000003110	0.000012001
H	0.000010895	-0.000009783	0.000002823
H	0.000015551	-0.000008690	0.000003064
H	0.000002308	-0.000016445	0.000005205
H	-0.000013254	-0.000009616	0.000007572
H	-0.000008210	0.000005979	-0.000006114
H	0.000018111	-0.000006629	0.000001407
H	0.000011288	0.000020478	-0.000018730
H	0.000014090	0.000010116	-0.000004167
H	0.000006660	0.000008581	-0.000006081
H	0.000000889	0.000016089	-0.000005277
H	-0.000022722	0.000019705	-0.000004608
H	0.000010791	-0.000001837	0.000011028
H	-0.000015029	0.000000833	-0.000000307

Anhang

H	-0.000015192	-0.000007852	-0.000004687
---	--------------	--------------	--------------

Tabelle 3: Standard-Orientierung von Konformer B [M052X/6-31+G(d)].

Atomsymbol	X	Y	Z
B	0.000004298	0.000008528	-0.000000923
C	-0.000000306	-0.000000248	0.000022790
C	0.000013415	0.000009266	-0.000008422
C	-0.000006650	0.000001281	0.000003472
C	0.000000354	-0.000001938	-0.000009790
C	0.000005313	0.000004861	0.000003886
C	0.000009265	-0.000014311	0.000009929
C	0.000008035	0.000009494	-0.000014958
C	0.000002614	-0.000006593	0.000000151
C	0.000001363	0.000011884	0.000004372
C	0.000007494	-0.000006528	0.000007471
C	-0.000011640	-0.000014134	0.000003092
C	-0.000016497	0.000001104	0.000011990
C	0.000002321	0.000003976	-0.000015579
N	-0.000001775	0.000002271	0.000000098
Fe	-0.000006151	-0.000002715	-0.000004026
Br	-0.000008110	-0.000014743	-0.000000269
H	0.000014191	0.000004178	0.000002784
H	0.000008811	0.000010929	-0.000002448
H	0.000012770	0.000005083	-0.000001637
H	0.000014227	0.000008119	-0.000004868
H	0.000018109	-0.000000250	-0.000000032
H	-0.000003406	0.000000577	-0.000002296
H	-0.000011355	-0.000002201	-0.000001218
H	-0.000005301	0.000006554	-0.000003254
H	-0.000009825	-0.000001419	0.000000099
H	-0.000002675	0.000005087	-0.000001913
H	0.000009534	-0.000016241	0.000005183
H	-0.000004371	0.000008983	-0.000002230
H	-0.000001499	-0.000014079	0.000004719
H	0.000006948	-0.000010033	0.000003241
H	0.000007137	-0.000011340	0.000006892
H	-0.000008870	0.000018830	-0.000012932
H	-0.000006770	-0.000003047	-0.000003832
H	-0.000022068	0.000005007	-0.000001775
H	-0.000018933	-0.000006191	0.000002232

Tabelle 4: Standard-Orientierung von Konformer C [M052X/6-31+G(d)].

Atomsymbol	X	Y	Z
C	0.000277103	-0.000231945	-0.000329858
C	0.000086178	0.000037877	0.000131351
C	-0.000018795	-0.000031610	0.000034585
B	-0.000214251	0.000112939	-0.000106251
C	-0.000032184	-0.000110956	0.000021221

Anhang

C	0.000085399	0.000062389	-0.000060713
C	-0.000080963	0.000093840	0.000104588
C	-0.000025050	0.000056185	0.000041998
C	-0.000030621	0.000175548	-0.000012919
C	0.000058392	-0.000127979	0.000072753
C	0.000347155	-0.000172254	-0.000201347
C	-0.000057362	-0.000117906	-0.000011105
C	-0.000040392	0.000056798	-0.000039406
C	-0.000152896	0.000014466	0.000125158
N	-0.000139719	-0.000113785	0.000367364
Fe	0.000142852	0.000313273	-0.000308056
Br	-0.000068901	0.000022528	0.000106122
H	0.000020037	0.000139297	0.000079634
H	-0.000096359	-0.000027211	0.000093680
H	-0.000155671	0.000021066	0.000083570
H	-0.000094468	-0.000016375	-0.000041393
H	-0.000014336	0.000008399	-0.000003998
H	0.000207825	0.000010748	0.000006350
H	0.000016977	-0.000015631	0.000060012
H	0.000009665	0.000030795	-0.000040036
H	0.000029949	0.000005382	0.000028447
H	-0.000083845	-0.000021208	0.000003316
H	0.000005812	0.000021937	-0.000037035
H	0.000009267	-0.000033721	-0.000000821
H	0.000001796	-0.000032353	-0.000085634
H	0.000015231	-0.000020922	-0.000054186
H	0.000014388	-0.000090297	0.000005687
H	0.000006924	-0.000011672	-0.000022210
H	-0.000003255	-0.000003351	-0.000000423
H	0.000011906	0.000000560	0.000009361
H	-0.000037786	-0.000004851	-0.000019805

Angaben zu den Berechnungen der energetischen Lage der Konformere von der *N*-boran substituierten Verbindung 176

Energien der Konformere A–E von Verbindung 176 berechnet auf dem Niveau [M052X/6-31+G(d)].

	SCF(H)	SCF(KJ/mol)	Delta
FNB	-2192,604415	-5756677,7523803	0,0000000
FNB1	-2191,985783	-5755053,5356982	54,4689157
FNB2	-2191,983029	-5755046,3042375	61,7003764
FNB3	-2191,979378	-5755036,7196745	71,2849394
FNB4	-2191,977574	-5755031,9833030	76,0213109
FNB5	-2192,006529	-5755108,0046138	0,0000000

	ZPE(H)	ZPE(KJ/mol)	

Anhang

FNB	-2192,290048	-5755852,3822961	
FNB1	-2191,686638	-5754268,1307555	59,5462868
FNB2	-2191,683641	-5754260,2621391	67,4149033
FNB3	-2191,680149	-5754251,0939012	76,5831411
FNB4	-2191,678268	-5754246,1553401	81,5217022
FNB5	-2191,709318	-5754327,6770424	0,0000000

Angaben zu den Berechnungen der energetischen Lage der Konformere von der *P*-boran substituierten Verbindung 177

Energien der Konformere A–E von Verbindung 177 berechnet auf dem Niveau [M052X/6-31+G(d)].

	SCF(H)	SCF(KJ/mol)	
FPB	-2192,608809	-5756689,2882657	11,5358853
FPB1	-2191,991646	-5755068,9286234	63,5648736
FPB2	-2191,989996	-5755064,5976287	67,8958682
FPB3	-2191,992658	-5755071,5855482	60,9079487
FPB4	-2191,987102	-5755056,9971543	75,4963426
FPB5	-2192,015857	-5755132,4934969	0,0000000

	ZPE(H)	ZPE(KJ/mol)	
FPB	-2192,297206	-5755,8711756	0,0000000
FPB1	-2191,695414	-5754,2911721	1,5800035
FPB2	-2191,693649	-5754,2865381	1,5846375
FPB3	-2191,696489	-5754,2939945	1,5771811
FPB4	-2191,69083	-5754,2791368	1,5920388
FPB5	-2191,721425	-5754,3594639	1,5117117

Angaben zu den Berechnungen der energetischen Lage der deprotonierten Strukturen von 73

Energien der deprotonierten Struktur von *N,N*-Dimethyl(aminomethyl)ferrocenboran (73) berechnet auf dem Niveau [M052X/6-31+G(d)].

	ZPE(H)	ZPE(KJ/mol)	
a	-1849,763787	-4856,5504869	0,0272763
b	-1849,751774	-4856,5189468	0,0588164
c	-1849,746733	-4856,5057117	0,0720515
d	-1849,744479	-4856,4997938	0,0779694