

Investigación

Síntesis y caracterización de oligosilanos complejos en el sistema pentametilciclopentadienil dicarbonilo de hierro: $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{Si}_n$ ($\text{Si}_n = \text{SiMe}_3$; Si_2Me_5 ; Si_3Me_7 ; y $2\text{-Si}_3\text{Me}_7$)

Francisco Cervantes-Lee, Ramesh N. Kapoor and Keith H. Pannell

Department of Chemistry, University of Texas at El Paso, El Paso TX 79968-0513, (USA)

Recibido el 4 de febrero del 2000; aceptado el 4 de abril del 2000

A la memoria de Jacobo Gómez-Lara

Resumen. En este trabajo se presentan la síntesis y caracterización por resonancia magnética nuclear de protón, carbono-13 y silicio-29, así como por espectroscopía infrarroja y cristalografía de rayos-X de los complejos en el sistema $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{Si}_n$ ($\text{Si}_n = \text{SiMe}_3$; Si_2Me_5 ; Si_3Me_7 y $2\text{-Si}_3\text{Me}_7$). Se compara la geometría molecular de estos complejos con estructuras similares en el sistema indenil dicarbonilo de hierro. Se encontró que el mayor poder donador de densidad electrónica y mayor tamaño del grupo pentametilciclopentadienil respecto al indenil no son factor determinante en la naturaleza del enlace Fe-Si en estos compuestos.

Palabras clave: Síntesis, metales de transición, geometría molecular, complejos de hierro, organosilicio.

Abstract. Complexes of the general type $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{Si}_n$ ($\text{Si}_n = \text{SiMe}_3$; Si_2Me_5 ; Si_3Me_7 and $2\text{-Si}_3\text{Me}_7$) have been synthesized and characterized via ^1H , ^{13}C , ^{29}Si NMR, infrared spectroscopy and X-ray crystallography. The molecular geometry of these complexes is compared to that of the corresponding analogs in the indenyliron dicarbonyl system. It was found that the higher electron density donor capacity and larger size of the $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]$ group compared to those of $[\eta^5\text{-C}_9\text{H}_7]$ do not influence significantly the nature of the Fe-Si bond.

Key Words: Synthesis, transition metals, molecular geometry, iron complexes, organosilicon.

Introducción

El estudio de complejos de metales de transición con silanos es un campo de interés en la química organometálica, dada la posibilidad de acción catalítica de los metales de transición en reacciones de hidrosilación y de formación de enlaces Si-Si en compuestos organosilícicos [1,2]. La naturaleza del enlace entre el silicio y el correspondiente metal de transición ha sido estudiada extensivamente, con particular énfasis en el grado de carácter π como resultado de la interacción entre los orbitales nd completos del metal y los orbitales $3d$ vacíos en el silicio.

Entre las series más estudiadas están las de ferro-silanos, en particular cyclopentadienil dicarbonilos [3] y, más recientemente, indenil dicarbonilos [4]. En esta última serie se hace un estudio comparativo entre diferentes dicarbonilos y sus correspondientes análogos, con uno de los carbonilos reemplazado por trifenilfosfina, concluyéndose que el mayor poder donador de densidad electrónica de la trifenilfosfina no resultaba en incremento del carácter p del enlace Fe-Si.

En un esfuerzo por contribuir al estudio de este tipo de compuestos de organosilicio, se han sintetizado cuatro nuevos complejos, $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_3$ (**1**), $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}$

$(\text{CO})_2\text{Si}_2\text{Me}_2\text{SiMe}_2$ (**2**), $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$ (**3**) y $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}(\text{SiMe}_3)_2$ (**4**), tres de ellos (**2**, **3** y **4**) en forma cristalina de calidad aceptable para estudios estructurales por difracción de rayos-X que permiten su comparación con compuestos análogos en la literatura [4].

Experimental

a. Reactivos

Todas las manipulaciones se realizaron bajo atmósfera de argón y usando solventes secos y libres de oxígeno. $[(\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5)\text{Fe}(\text{CO})_2]_2$ se compró a Strem Chemicals, Newburyport, MA. La sílica gel grado reactivo (60-200 mallas, grado 950) se obtuvo de MCB Reagents Gibbstown, NJ.

b. Equipo

Los espectros infrarrojos fueron obtenidos en solución en hexano usando un espectrofotómetro de rejilla Perkin-Elmer 580B. Para la obtención de espectros de Resonancia Magnética Nuclear se utilizó un espectrómetro Bruker de 200 MHz. La determinación de las estructuras cristalinas se realizó en un difractómetro Nicolet para monocristales acoplado a una compu-

tadora DEC Microvax II. Los análisis químicos fueron realizados por Galbraith Laboratories de Knoxville, TN.

c. Técnicas de síntesis

La síntesis del complejo $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_5$ como procedimiento sintético típico se describe a continuación:

En un matraz redondo de 250 mL con conexión al vacío se pusieron 5 mL de mercurio y 0.3 g de sodio metálico recién cortado. A esta amalgama se le agregaron 1.5 g (3.0 mmoles) de $[(\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5)\text{Fe}(\text{CO})_2]_2$ en 50 mL de tetrahidrofurano (THF). Después de 24 h de reacción con agitación constante se observó un cambio de color y el espectro infrarrojo de la mezcla indicó la formación del anión $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2^-$ de acuerdo a Pannell y Jackson [5].

El exceso de amalgama se extrajo por la conexión al vacío y enseguida se agregó una solución de 1.2 g (7 mmoles) de ClSiMe_5 en 5 mL de THF con agitación continua y enfriamiento en un baño de hielo. La solución se mantuvo en agitación durante 2 h. Después de este lapso se confirmó por espectroscopía infrarroja la desaparición del anión. El solvente se removió por succión y el sólido resultante se disolvió en 50 mL de una mezcla 8:2 v/v de hexano y cloruro de metileno. La solución se concentró hasta un volumen de 5 mL y se transfirió a una columna de silica gel de 2.5×15 cm. y se colectó la banda amarilla resultante de la extracción con hexano. Después de eliminar el solvente y de recrystallizar en hexano, se obtuvieron 0.95 g, 45% de $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_5$ en forma de cristales amarillos.

Tratamiento fotoquímico de $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$. Una solución de 0.5 g (1.14 mmoles) de $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$ en benceno contenida en un tubo de cuarzo se irradió con una lámpara Hanovia de presión media y 450 Watts a una distancia de 5 cm. El monitoreo de la reacción por RMN de ^{29}Si mostró que ésta era completa después de 4 h con la desaparición del compuesto lineal y la formación del correspondiente isómero ramificado. El solvente fue extraído por succión y el residuo se disolvió en la mínima cantidad posible de una mezcla 1:1 v/v de hexano y cloruro de metileno. La solución se transfirió a una columna de silica gel de 1.5×12 cm y se extrajo con hexano, sólo una banda amarilla produjo un sólido cristalino (0.45 g, 90%) de $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}(\text{SiMe}_3)_2$.

d. Estudio cristalográfico

Se determinó la estructura cristalina, y por lo tanto molecular, de los complejos **2**, **3** y **4**. En los tres cristales estudiados la colección de datos de difracción se llevó a cabo a temperatura ambiente. Se usó un difractómetro Nicolet R3m/V de cuatro círculos para monocristales con monocromador de grafito y radiación Mo K α ($\lambda = 0.71073$ Å). Se usó un barrido en ω con velocidad variable (mayor para las reflexiones intensas y menor para las débiles) en un rango de $3.5 < 2\theta < 45^\circ$.

Las intensidades de tres reflexiones intensas seleccionadas como referencia se midieron cada 100 reflexiones y éstas no mostraron deterioro de los cristales estudiados. En los ca-

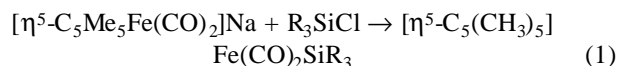
sos de **2** y **3** se aplicó una corrección semiempírica por efectos de absorción, resultando factores de corrección de transmisión Min/Max de 0.588/0.646 y 0.209/0.234, respectivamente.

Los programas de cómputo utilizados para solución y refinamiento de las estructuras son parte del paquete cristalográfico SHELEXTL PLUS versión 4.3 (1988) de Nicolet.

Todas las estructuras se resolvieron por el método de Patterson usando los átomos pesados. El refinamiento se hizo por ajuste de mínimos cuadrados mediante el método de matriz completa. El parámetro minimizado fue $\sum w(F_o - F_c)^2$ con $w^{-1} = \sigma^2(F) + gF^2$. Todos los átomos diferentes de hidrógeno se refinaron con parámetros térmicos anisotrópicos. Los átomos de hidrógeno se generaron en posiciones idealizadas de acuerdo a la geometría de las moléculas y se les asignó un coeficiente térmico isotrópico común de 0.08 Å³ y una distancia C-H de 0.96 Å. Los parámetros cristalográficos para la colección de datos, la solución y el refinamiento de cada estructura se resumen en la tabla 2.

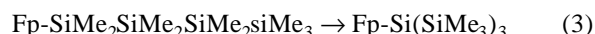
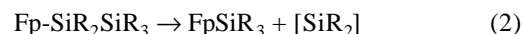
Resultados y discusión

La síntesis de los compuestos **1**, **2** y **3** se hizo siguiendo el procedimiento normal de eliminación salina, ecuación (1) [6].

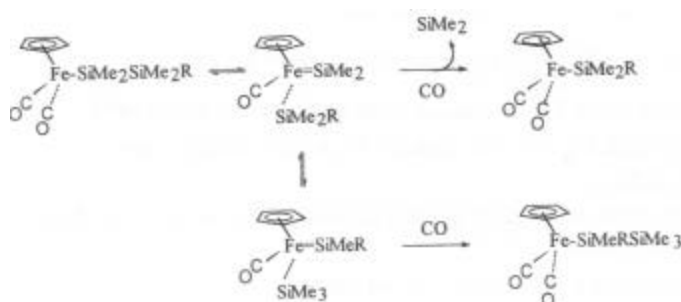


La formación de **4** se logró mediante la irradiación de **3**.

La característica química típica de los oligosilil derivados del sistema $[\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5]\text{Fe}(\text{CO})_2$ es la pérdida fotoquímica de sililenos, así como sus rearreglos, que dependen de la longitud de la cadena, ecuaciones (2) y (3) [7].



Ambas reacciones ocurren vía intermediarios ferrosilil(silileno), $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{Fe}(\text{CO})(\text{SiR}_3)(=\text{SiR}_2)$, formados por una reacción de α -eliminación subsecuente a la expulsión de CO. Los intermediarios sufren migraciones 1,3-alkil-, -aril-, y/o -silil que resultan en la química observada, esquema 1:



Esquema 1.

Es obvio que el tratamiento fotoquímico del trisilano lineal **3** resulta en buenos rendimientos de **4** sin eliminación adicional de SiMe_2 . Este resultado contrasta con el del complejo análogo $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$, en el que la eliminación de SiMe_2 continúa para formar $\text{FpSiMe}_2\text{SiMe}_3$ y finalmente FpSiMe_3 [8]. Es claro que el tamaño del ligando pentametilciclopentadienil impide que la química de eliminación prosiga.

Los datos analíticos y espectroscópicos correspondientes a los nuevos compuestos se reportan en la tabla 1. En la tabla 2 se resumen los parámetros cristalográficos de las determinaciones estructurales. Las estructuras moleculares de los complejos **2**, **3** y **4** con el correspondiente esquema de numeración atómica se ilustran en las Figs. 1, 2 y 3. Las coordenadas ató-

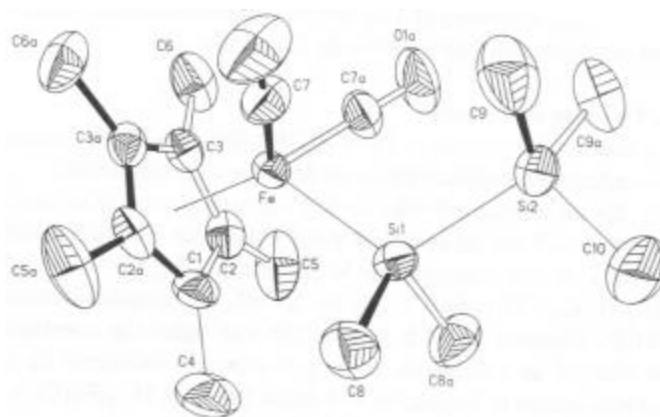


Fig. 1. Estructura de $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$, (**2**).

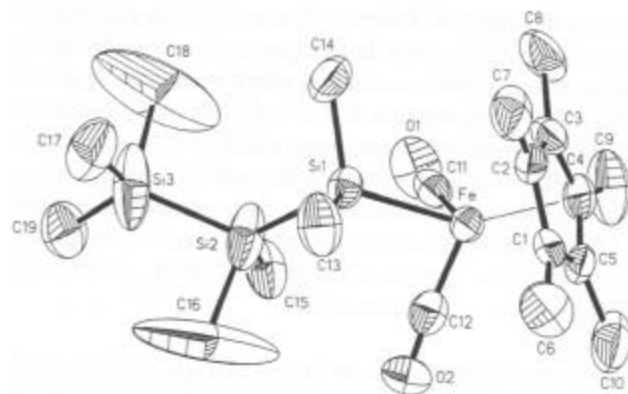


Fig. 2. Estructura de $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$, (**3**).

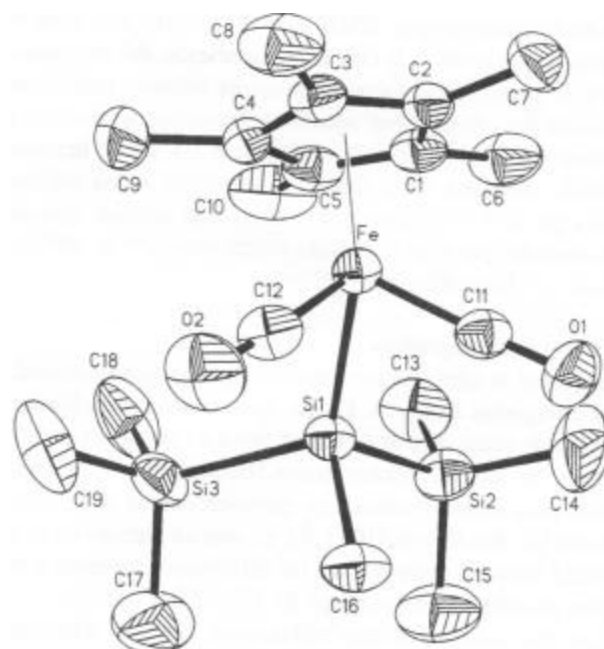


Fig. 3. Estructura de $[\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5]\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}(\text{SiMe}_3)_2$, (**4**).

Tabla 1. Análisis químico y propiedades electroscópicas de los nuevos complejos.

$[(\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5)\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_3$ (**1**), m.p. 54-5°C

Anal. Calcd. (Determinado): C, 56.25(56.30); H, 7.55(7.53)%

^1H NMR δ 0.50 (s, 9H, SiMe_3), 1.57 (s, 15H, $\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$).

^{13}C NMR δ 7.01 (SiMe_3), 10.14 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 94.77 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 218.01 (CO).

^{29}Si NMR δ 40.18.

IR ν (CO) 1980 (s), 1928 (s) hexano.

$[(\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5)\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$ (**2**)

Anal. Calcd. (Determinado): C, 53.90(53.30); H, 7.99(7.95)%

^1H NMR δ 0.07 (s, 9H, SiMe_3), 0.34 (s, 6H, SiMe_2), 1.82 (s, 15H, $\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$).

^{13}C NMR δ 0.23 (SiMe_3), 2.34 (SiMe_2), 10.14 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 94.69 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 217.52 (CO).

^{29}Si NMR δ 14.25 (SiMe_2), -12.49 (SiMe_3).

IR ν (CO) 1979 (s), 1928 (s) hexano

$[(\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5)\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_2\text{SiMe}_3$ (**3**)

Anal. Calcd. (Determinado): C, 53.18(52.67); H, 8.70(8.44)%

^1H NMR δ 0.23 (s, 9H, SiMe_3), 0.36 (s, 6H, SiMe_2), 0.59 (s, 6H, SiMe_2), 1.55 (s, 15H, $\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$).

^{13}C NMR δ -0.63, -0.37, 4.39 (SiMe), 10.12 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 94.94 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 218.07 (CO).

^{29}Si NMR δ 37.91 (SiSiMe_2Si), -14.71 (SiMe_3), 18.98 (Fp^*SiMe_2).

IR ν (CO) 1979 (s), 1928 (s) hexano.

$[(\eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5)\text{Fe}(\text{CO})_2\text{SiMe}(\text{SiMe}_3)_2$ (**4**) m.p. 119°C

Anal. Calcd. (Determinado): C, 53.18(52.65); H, 8.70(8.44)%

^1H NMR δ 0.16 (s, 3H, SiMe), 0.37 (s, 18H, SiMe_3), 1.58 (s, 15H, $\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$).

^{13}C NMR δ 2.80, 2.13, (SiMe), 10.74 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 95.03 ($\text{C}_5(\text{CH}_3)_5$), 218.33 (CO).

^{29}Si NMR δ -9.31 (SiMe), -27.04 (SiMe_3).

IR ν (CO) 1980 (s), 1931 (s) hexano.

Tabla 2. Parámetros cristalográficos.

Compuesto	2	3	4
Fórmula empírica	C ₁₇ H ₃₀ O ₂ Fe	C ₁₉ H ₃₆ O ₂ Si ₃ Fe	C ₁₉ H ₃₆ O ₂ Si ₃ Fe
Color; Hábito	Fragmento naranja	Fragmento amarillo	Prisma amarillo
Tamaño de crystal (mm)	0.80 × 0.50 × 0.70	0.30 × 0.10 × 0.30	0.50 × 0.40 × 0.60
Sistema cristalino	Ortorrómico	Monoclínico	Triclínico
Grupo espacial	Pnam	P2 ₁ /c	P-1
Parámetros de celda	$a = 11.639(3) \text{ \AA}$ $b = 13.151(5) \text{ \AA}$ $c = 13.774(5) \text{ \AA}$ $\alpha = 90.00^\circ$ $\beta = 90.00^\circ$ $\gamma = 90.00^\circ$	$a = 8.938(2) \text{ \AA}$ $b = 16.664(3) \text{ \AA}$ $c = 18.426(4) \text{ \AA}$ $\alpha = 90.00^\circ$ $\beta = 94.98(2)^\circ$ $\gamma = 90.00^\circ$	$a = 9.463(2) \text{ \AA}$ $b = 9.703(3) \text{ \AA}$ $c = 14.262(4) \text{ \AA}$ $\alpha = 82.26(2)^\circ$ $\beta = 81.09(2)^\circ$ $\gamma = 72.33(2)^\circ$
Volumen	2108.3(12) Å ³	2568.9(9) Å ³	1227.3(6) Å ³
Z	4	4	2
Rango 2 θ en grados	3.5 - 45	3.5 - 45	3.5 - 45
Tipo de barrido	ω	ω	ω
Velocidad de barrido	3 - 20 ° / min	3 - 15 ° / min	3 - 15 ° / min
Rango de barrido (ω)	1.50 °	1.20 °	1.20 °
Reflexiones de referencia	3 medidas cada 100 reflexiones	3 medidas cada 100 reflexiones	3 medidas cada 100 reflexiones
Rango de índices	h de -2 a 12 k de 0 a 14 l de -14 a 14	h de 0 a 9 k de 0 a 17 l de -19 a 19	h de -5 a 10 k de -9 a 10 l de -15 a 15
Reflexiones colectadas	3155	3790	3539
Reflexiones independientes	1444	3364	3203
Reflexiones observadas	1299 ($F > 3.0 \sigma(F)$)	2136 ($F > 4.0 \sigma(F)$)	2990 ($F > 3.0 \sigma(F)$)
Corrección por absorción	Semiempírica	Semiempírica	No se aplicó
Min. / Máx. Transmisión	0.209 / 0.234	0.588 / 0.646	N / A
Índices R finales (para reflexiones observadas)	$R = 4.51\%$, $wR = 6.31\%$	$R = 9.69\%$, $wR = 12.75\%$	$R = 3.60\%$, $wR = 5.11\%$

Tabla 3. Coordenadas atómicas ($\times 10^4$) y coeficientes isotrópicos equivalentes ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) para el complejo **2**.

	x	y	z	U(eq)
Fe	2512(1)	247(1)	2500	50(1)
Si(1)	498(1)	265(1)	2500	60(1)
Si(2)	-466 (1)	-1317(1)	2500	72(1)
O(1)	2309(3)	-1113(3)	4125(3)	132(2)
C(1)	2659(5)	1850(4)	2500	77(2)
C(2)	3206(4)	1434(3)	1670(3)	70(1)
C(3)	4103(3)	805(3)	1993(3)	63(1)
C(4)	1829(7)	2719(5)	2500	141(5)
C(5)	2965(5)	1725(5)	640(4)	130(3)
C(6)	4932(4)	264(4)	1353(4)	109(2)
C(7)	2363(3)	-592(4)	3451(4)	77(2)
C(8)	-125(4)	925(4)	3591(4)	98(2)
C(9)	-167(5)	-2119(4)	3578(4)	126(3)
C(10)	-2031(7)	-1047(7)	2500	181(7)

micas se reportan en las tablas 3, 4 y 5 respectivamente para **2**, **3** y **4**. Longitudes de enlace y ángulos de enlace de particular interés se resumen en la tabla 6.

Considerando los datos de la tabla 6 puede verse que los valores de las longitudes y los ángulos de enlace son similares a las de los correspondientes análogos en el sistema indenil dicarbonilo de hierro y, al igual que en éstos, no indican un grado apreciable de carácter π en el enlace Fe-Si ya que los valores en el caso de las longitudes de enlace (2.343-2.380 Å) son significativamente mayores que los de los enlaces Fe-Si con un considerable carácter π (2.280-2.294 Å) como los reportados en complejos de tetracarbonilo de Hierro [9]. Por otra parte, el alargamiento del enlace Fe-Si en **4** respecto al enlace equivalente en **2** está de acuerdo con la tendencia de dicho enlace a elongarse conforme el volumen del grupo en posición β al átomo de Fe aumenta. Como ocurre en III(a), Fe-Si = 2.365 Å un ejemplo adicional es el caso de (η^5 -C₅H₅)Fe(CO₂SiPh(SiPh(SiMe₃))₂ con Fe-Si promedio de 2.360 Å [3(i)].

Tabla 4. Coordenadas atómicas ($\times 10^4$) y coeficientes isotrópicos equivalentes ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) para el complejo **3**.

	x	y	z	U(eq)
Fe	1068(2)	4430(1)	2532(1)	50(1)
Si(1)	1986(4)	4063(2)	3723(2)	56(1)
Si(2)	3229(9)	2802(3)	3862(2)	130(3)
Si(3)	3674(10)	2430(3)	4997(3)	155(3)
O(1)	-694(14)	2929(7)	2503(7)	121(6)
O(2)	4085(13)	3839(7)	2114(6)	102(5)
C(1)	1504(14)	5658(7)	2337(7)	59(5)
C(2)	350(15)	5610(8)	2857(6)	57(5)
C(3)	-984(16)	5168(8)	2521(8)	66(5)
C(4)	-655(17)	4985(8)	1798(7)	67(6)
C(5)	855(18)	5275(8)	1685(7)	64(5)
C(6)	3067(17)	6120(8)	2418(9)	94(7)
C(7)	406(20)	6075(8)	3547(7)	88(6)
C(8)	-2472(17)	5023(11)	2869(11)	125(9)
C(9)	-1849(22)	4586(11)	1250(10)	142(10)
C(10)	1674(23)	5243(10)	972(7)	120(9)
C(11)	10(18)	3499(9)	2529(8)	68(5)
C(12)	2879(19)	4056(8)	2297(7)	70(6)
C(13)	3624(18)	4758(9)	4138(8)	97(7)
C(14)	356(19)	4050(9)	4363(8)	95(7)
C(15)	2917(22)	2055(9)	3161(8)	115(8)
C(16)	5774(27)	3005(16)	3845(19)	408(32)
C(17)	4103(23)	2989(12)	5744(8)	130(9)
C(18)	1284(28)	1981(18)	5122(19)	470(35)
C(19)	4701(22)	1368(9)	5056(10)	124(9)

Tabla 5. Coordenadas atómicas ($\times 10^4$) y coeficientes isotrópicos equivalentes ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) para el complejo **4**.

	x	y	z	U(eq)
Fe	2179(1)	9747(1)	3264(1)	41(1)
Si(1)	2815(1)	7445(1)	2651(1)	46(1)
Si(2)	5360(1)	6059(1)	2477(1)	66(1)
Si(3)	1758(1)	7241(1)	1291(1)	68(1)
O(1)	3268(3)	8093(3)	4983(2)	75(1)
O(2)	-810(3)	9465(3)	3654(2)	91(1)
C(1)	3857(3)	10790(3)	2838(2)	52(1)
C(2)	2814(3)	11535(3)	3555(2)	47(1)
C(3)	1405(3)	12029(3)	3219(2)	51(1)
C(4)	1590(4)	11578(3)	2288(2)	57(1)
C(5)	3115(4)	10843(3)	2054(2)	58(1)
C(6)	5522(4)	10225(4)	2864(3)	88(2)
C(7)	3160(5)	11847(4)	4487(2)	77(2)
C(8)	-9(4)	12930(4)	3737(3)	89(2)
C(9)	403(6)	11998(5)	1631(3)	106(2)
C(10)	3843(6)	10429(5)	1078(3)	105(2)
C(11)	2843(3)	8716(3)	4288(2)	52(1)
C(12)	400(4)	9533(3)	3502(2)	58(1)
C(13)	6533(5)	6525(5)	1364(3)	99(2)
C(14)	6302(6)	6115(6)	3510(4)	126(3)
C(15)	5459(6)	4115(4)	2447(4)	113(2)
C(16)	1999(4)	6144(3)	3562(3)	69(2)
C(17)	1768(8)	5327(5)	1286(4)	149(4)
C(18)	2700(6)	7713(7)	99(3)	119(3)
C(19)	-220(5)	8355(7)	1322(4)	123(3)

Tabla 6. Longitudes de enlace (Å) y ángulos de enlace (o) de interés.

Parámetro/compuesto	2	3	4	II(a)^a	III(a)^b
Fe-Si	2.343(2)	2.343(4)	2.380(1)	2.341(2)	2.365(2)
Fe-C ^{*c}	1.722(5)	1.734(16)	1.743(4)	1.742(8)	1.739(6)
C-O	1.154(7)	1.118(19)	1.152(5)	1.160(1)	1.166(8)
	1.154(7)	1.153(20)	1.151(4)	1.120(9)	1.146(6)
Si-Si	2.364(2)	2.351(6)	2.368(1)	2.361(3)	2.361(2)
			2.371(2)		
Si ^d -C	1.882(5)	1.907(15)	1.928(4)	1.886(9)	1.910(6)
	1.882(5)	1.883(16)		1.886(9)	
C*-Fe-C*	99.1(3)	97.7(7)	96.1(2)	97.5(3)	95.6(2)
C*-Fe-Si	84.6(1)	84.2(4)	83.7(1)	87.6(2)	85.2(2)
	84.6(1)	85.2(5)	83.9(1)	83.4(3)	84.4(1)
Fe-Si-Si	117.8(1)	116.3(2)	118.4(1)	114.6(1)	113.3(1)
			119.1(1)		114.6(1)
Si-Si-Si		116.3(3)	107.9(1)		109.9(1)

^a (n⁵-C₉H₇)Fe(CO)₂SiMe₂SiMe₃ (Ref. 4). ^b (n⁵-C₉H₇)Fe(CO)₂SiMe(SiMe₃)₂ (Ref. 4). ^c C* Carbono en carbonilos. ^d Silicio en posición en respecto a Fe.

Conclusiones

En suma, en el sistema $\text{LFe}(\text{CO})_2\text{Si}_n$, la substitución de $\text{L} = \text{indenil}$ por $\text{L} = \text{pentametilciclopentadienil}$ no es suficiente para provocar un grado apreciable de carácter π en el enlace Fe-Si.

Referencias

1. Para una revisión de la química del silicio con metales de transición véase: (a) Aylett, B. J. *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.* **1982**, 25, 1. (b) Pannell, K. H. in *Silicon Compounds Register and Review*; Anderson, R.; Arkles, B.; Larson, G. L., Eds. Petrarch Systems, Bristol, PA, 1987, Vol. 4, p. 32. (c) Tilley, D.J. in *Chemistry of the Functional Groups: Chemistry of Organosilicon Compounds*; Patai, S.; Rappaport, Z. Eds., Wiley, New York, 1989.
2. Para una revisión sobre hidrosilación véase: (a) Lukevics, E.; Belyakova, Z. V. *J. Organomet. Chem. Libr.* **1977**, 5, 1. (b) Harrod, J. F.; Chalk, A.J. in *Organic Synthesis via Metal Carbonyls*, Wender, I.; Pino, P. Eds., Wiley-Interscience, New York, 1977. (c) Speier, J. L. *Adv. Organomet. Chem.* **1979**, 17, 407.
3. (a) Honle, W.; von Schering, H.G. *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1980**, 464, 129. (b) Drahnak, T.J.; West, R.; Calabrese, J. C. *J. Organomet. Chem.* **1980**, 198, 55. (c) Holmes-Smith, R. D.; Stobart, S. R.; Atwood, J. L.; Hunter, W. E. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1982**, 2461. (d) Parkanyi, L.; Pannell, K. H.; Hernández, C. *J. Organomet. Chem.* **1983**, 252, 127. (e) Schubert, U.; Kraft, G.; Walther, E. *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1984**, 519, 96. (f) Ries, W.; Albright, T. A.; Silvestre, J.; Bernal, I.; Malisch, W.; Burschke, C. *Inorg. Chim. Acta* **1986**, 111, 119. (g) Parkanyi, L.; Hernández, C.; Pannell, K. H. *J. Organomet. Chem.* **1986**, 301, 145. (h) Pannell, K. H.; Cervantes, J.; Parkanyi, L.; Cervantes-Lee, F. *Organometallic* **1990**, 9, 859. (i) West, R.; Pham, E. K. *J. Organomet. Chem.* **1991**, 402, 215.
4. Pannell, K. H.; Lin, S. H.; Kapoor, R. N.; Cervantes-Lee, F.; Piñón, M.; Parkanyi, L. *Organometallics* **1990**, 9, 2454.
5. Pannell, K. H.; Jackson, D. *J. Amer. Chem. Soc.* **1976**, 98, 4443.
6. King, R. B.; Pannell, K. H. *Z. Naturforsch.* **1969**, 23b, 262.
7. Sharma, H. K.; Pannell, K. H. *Chem. Rev.* **1995**, 95, 1351.
8. Hernández, C.; Sharma, H.K.; Pannell, K.H. *J. Organomet. Chem.*, **1993**, 462, 259.
9. Leis, C.; Wilkinson, D. L.; Handwerker, C.; Zybilla, C.; Muller, G. *Organometallics* **1992**, 11, 514.