Stereo- and Regioselective

Pt(DVDS)/P(*i*BuNCH₂CH₂)₃N-Catalyzed

Hydrosilylation of Terminal Alkynes

*Halikhedkar Aneetha, Wei Wu and John G. Verkade**

Department of Chemistry, Gilman Hall, Iowa State University, Ames, IA 50011

jverkade@iastate.edu

SUPPORTING INFORMATION

Table S1. Atomic coordinates (x 10 ⁴) and equivalent isotropic displacement parameters (Å ² x 10 ³) for (<i>E</i>)-1-(triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3 in MS)	S2
Table S2. Bond lengths [Å] and angles [°] for (<i>E</i>)-1-(triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3 in MS).....	S3
Table S3. Anisotropic displacement parameters (Å ² x 10 ³) for (<i>E</i>)-1-(triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3 in MS)	S5
Table S4. Hydrogen coordinates (x 10 ⁴) and isotropic displacement parameters (Å ² x 10 ³) for for (<i>E</i>)-1-(triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3 in MS).....	S6

Table S1. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (*E*)-1-(Triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3)

Atom	x	y	z	U(eq) ^a
Si(1)	6458(1)	3179(1)	3069(1)	46(1)
C(1)	7927(2)	2264(2)	3218(2)	49(1)
C(2)	7719(3)	1128(2)	3491(2)	63(1)
C(3)	8764(4)	429(2)	3602(3)	78(1)
C(4)	10056(4)	843(3)	3450(3)	85(1)
C(5)	10313(3)	1958(3)	3178(3)	83(1)
C(6)	9249(3)	2664(2)	3060(2)	63(1)
C(7)	7075(2)	4639(2)	2692(2)	46(1)
C(8)	7977(3)	5694(2)	3648(2)	58(1)
C(9)	8447(3)	6776(2)	3386(3)	68(1)
C(10)	8022(3)	6836(2)	2163(3)	69(1)
C(11)	7150(3)	5812(2)	1200(2)	71(1)
C(12)	6680(3)	4727(2)	1466(2)	61(1)
C(13)	4519(2)	2276(2)	1773(2)	50(1)
C(14)	3196(3)	2670(2)	1621(2)	68(1)
C(15)	1739(3)	2032(3)	678(3)	79(1)
C(16)	1578(3)	973(2)	-125(2)	72(1)
C(17)	2836(4)	566(3)	-6(3)	94(1)
C(18)	4302(3)	1206(3)	927(3)	84(1)
C(19)	6248(2)	3533(2)	4554(2)	51(1)
C(20)	7105(3)	3313(2)	5628(2)	59(1)
C(21)	6950(3)	3581(2)	6847(2)	62(1)
C(22)	8504(3)	4397(3)	7892(3)	91(1)
C(23)	6445(4)	2387(3)	7165(3)	86(1)
C(24)	7649(5)	1624(4)	7318(4)	125(2)
C(25)	4809(4)	1672(3)	6072(4)	110(1)
C(26)	6297(6)	2659(4)	8421(4)	135(2)
O(1)	5805(2)	4276(2)	6708(2)	75(1)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S2. Bond lengths [Å] and angles [°] for (*E*)-1-(Triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3)

Si(1)-C(19)	1.856(2)	C(9)-H(9)	0.9300	C(20)-H(20)	0.9300
Si(1)-C(1)	1.871(2)	C(10)-C(11)	1.372(4)	C(21)-O(1)	1.440(3)
Si(1)-C(7)	1.871(2)	C(10)-H(10)	0.9300	C(21)-C(22)	1.537(4)
Si(1)-C(13)	1.876(2)	C(11)-C(12)	1.385(3)	C(21)-C(23)	1.536(4)
C(1)-C(6)	1.385(3)	C(11)-H(11)	0.9300	C(22)-H(22A)	0.9600
C(1)-C(2)	1.396(3)	C(12)-H(12)	0.9300	C(22)-H(22B)	0.9600
C(2)-C(3)	1.369(3)	C(13)-C(14)	1.381(3)	C(22)-H(22C)	0.9600
C(2)-H(2)	0.9300	C(13)-C(18)	1.384(3)	C(23)-C(24)	1.539(4)
C(3)-C(4)	1.358(4)	C(14)-C(15)	1.386(3)	C(23)-C(26)	1.553(4)
C(3)-H(3)	0.9300	C(14)-H(14)	0.9300	C(23)-C(25)	1.569(5)
C(4)-C(5)	1.377(4)	C(15)-C(16)	1.364(4)	C(24)-H(24A)	0.9600
C(4)-H(4)	0.9300	C(15)-H(15)	0.9300	C(24)-H(24B)	0.9600
C(5)-C(6)	1.389(3)	C(16)-C(17)	1.338(4)	C(24)-H(24C)	0.9600
C(5)-H(5)	0.9300	C(16)-H(16)	0.9300	C(25)-H(25A)	0.9600
C(6)-H(6)	0.9300	C(17)-C(18)	1.389(4)	C(25)-H(25B)	0.9600
C(7)-C(12)	1.385(3)	C(17)-H(17)	0.9300	C(25)-H(25C)	0.9600
C(7)-C(8)	1.393(3)	C(18)-H(18)	0.9300	C(26)-H(26A)	0.9600
C(8)-C(9)	1.379(3)	C(19)-C(20)	1.312(3)	C(26)-H(26B)	0.9600
C(8)-H(8)	0.9300	C(19)-H(19)	0.9300	C(26)-H(26C)	0.9600
C(9)-C(10)	1.369(4)	C(20)-C(21)	1.513(3)	O(1)-H(1)	0.8200
C(19)-Si(1)-C(1)	110.87(9)	C(4)-C(3)-C(2)	119.7(3)	C(12)-C(7)-C(8)	116.90(19)
C(19)-Si(1)-C(7)	109.28(9)	C(4)-C(3)-H(3)	120.1	C(12)-C(7)-Si(1)	122.26(15)
C(1)-Si(1)-C(7)	109.64(9)	C(2)-C(3)-H(3)	120.1	C(8)-C(7)-Si(1)	120.84(15)
C(19)-Si(1)-C(13)	108.27(9)	C(3)-C(4)-C(5)	120.3(2)	C(9)-C(8)-C(7)	121.6(2)
C(1)-Si(1)-C(13)	109.27(9)	C(3)-C(4)-H(4)	119.8	C(9)-C(8)-H(8)	119.2
C(7)-Si(1)-C(13)	109.49(9)	C(5)-C(4)-H(4)	119.8	C(7)-C(8)-H(8)	119.2
C(6)-C(1)-C(2)	117.0(2)	C(4)-C(5)-C(6)	119.9(3)	C(10)-C(9)-C(8)	120.1(2)
C(6)-C(1)-Si(1)	122.51(16)	C(4)-C(5)-H(5)	120.0	C(10)-C(9)-H(9)	120.0
C(2)-C(1)-Si(1)	120.47(16)	C(6)-C(5)-H(5)	120.0	C(8)-C(9)-H(9)	120.0
C(3)-C(2)-C(1)	122.2(2)	C(1)-C(6)-C(5)	120.8(2)	C(9)-C(10)-C(11)	119.8(2)
C(3)-C(2)-H(2)	118.9	C(1)-C(6)-H(6)	119.6	C(9)-C(10)-H(10)	120.1
C(1)-C(2)-H(2)	118.9	C(5)-C(6)-H(6)	119.6	C(11)-C(10)-H(10)	120.1

C(10)-C(11)-C(12)	119.9(2)	C(21)-C(22)-H(22A)	109.5
C(10)-C(11)-H(11)	120.0	C(21)-C(22)-H(22B)	109.5
C(12)-C(11)-H(11)	120.0	H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
C(11)-C(12)-C(7)	121.7(2)	C(21)-C(22)-H(22C)	109.5
C(11)-C(12)-H(12)	119.2	H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5
C(7)-C(12)-H(12)	119.2	H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
C(14)-C(13)-C(18)	116.0(2)	C(21)-C(23)-C(24)	110.7(2)
C(14)-C(13)-Si(1)	119.92(16)	C(21)-C(23)-C(26)	110.6(3)
C(18)-C(13)-Si(1)	124.05(18)	C(24)-C(23)-C(26)	107.9(3)
C(13)-C(14)-C(15)	121.9(2)	C(21)-C(23)-C(25)	107.6(2)
C(13)-C(14)-H(14)	119.0	C(24)-C(23)-C(25)	111.2(3)
C(15)-C(14)-H(14)	119.0	C(26)-C(23)-C(25)	108.8(3)
C(16)-C(15)-C(14)	120.0(3)	C(23)-C(24)-H(24A)	109.5
C(16)-C(15)-H(15)	120.0	C(23)-C(24)-H(24B)	109.5
C(14)-C(15)-H(15)	120.0	H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
C(17)-C(16)-C(15)	119.6(2)	C(23)-C(24)-H(24C)	109.5
C(17)-C(16)-H(16)	120.2	H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
C(15)-C(16)-H(16)	120.2	H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5
C(16)-C(17)-C(18)	120.8(3)	C(23)-C(25)-H(25A)	109.5
C(16)-C(17)-H(17)	119.6	C(23)-C(25)-H(25B)	109.5
C(18)-C(17)-H(17)	119.6	H(25A)-C(25)-H(25B)	109.5
C(13)-C(18)-C(17)	121.6(3)	C(23)-C(25)-H(25C)	109.5
C(13)-C(18)-H(18)	119.2	H(25A)-C(25)-H(25C)	109.5
C(17)-C(18)-H(18)	119.2	H(25B)-C(25)-H(25C)	109.5
C(20)-C(19)-Si(1)	126.62(17)	C(23)-C(26)-H(26A)	109.5
C(20)-C(19)-H(19)	116.7	C(23)-C(26)-H(26B)	109.5
Si(1)-C(19)-H(19)	116.7	H(26A)-C(26)-H(26B)	109.5
C(19)-C(20)-C(21)	127.7(2)	C(23)-C(26)-H(26C)	109.5
C(19)-C(20)-H(20)	116.2	H(26A)-C(26)-H(26C)	109.5
C(21)-C(20)-H(20)	116.2	H(26B)-C(26)-H(26C)	109.5
O(1)-C(21)-C(20)	108.82(18)	C(21)-O(1)-H(1)	109.5
O(1)-C(21)-C(22)	106.8(2)		
C(20)-C(21)-C(22)	108.7(2)		
O(1)-C(21)-C(23)	109.6(2)		
C(20)-C(21)-C(23)	110.5(2)		
C(22)-C(21)-C(23)	112.4(2)		

Table S3. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (*E*)-1-(Triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3)

Atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Si(1)	51(1)	43(1)	41(1)	9(1)	21(1)	9(1)
C(1)	54(1)	47(1)	42(1)	6(1)	20(1)	11(1)
C(2)	68(1)	47(1)	67(1)	11(1)	26(1)	13(1)
C(3)	92(2)	57(1)	74(2)	10(1)	23(1)	29(1)
C(4)	94(2)	94(2)	64(2)	6(1)	24(1)	57(2)
C(5)	70(2)	119(2)	71(2)	20(2)	38(1)	36(2)
C(6)	64(1)	74(2)	59(1)	20(1)	32(1)	19(1)
C(7)	45(1)	46(1)	46(1)	11(1)	20(1)	11(1)
C(8)	66(1)	50(1)	50(1)	8(1)	22(1)	8(1)
C(9)	72(2)	47(1)	78(2)	9(1)	33(1)	6(1)
C(10)	68(1)	59(1)	96(2)	38(1)	43(1)	19(1)
C(11)	72(2)	85(2)	62(1)	37(1)	28(1)	16(1)
C(12)	64(1)	63(1)	47(1)	14(1)	20(1)	5(1)
C(13)	54(1)	47(1)	47(1)	11(1)	24(1)	7(1)
C(14)	60(1)	67(1)	65(1)	-2(1)	26(1)	10(1)
C(15)	55(1)	103(2)	68(2)	7(1)	24(1)	12(1)
C(16)	61(1)	76(2)	56(1)	8(1)	16(1)	-7(1)
C(17)	88(2)	78(2)	74(2)	-20(1)	11(2)	16(2)
C(18)	71(2)	85(2)	69(2)	-14(1)	15(1)	25(1)
C(19)	58(1)	53(1)	49(1)	13(1)	27(1)	20(1)
C(20)	67(1)	67(1)	57(1)	20(1)	36(1)	29(1)
C(21)	70(1)	72(1)	57(1)	17(1)	35(1)	29(1)
C(22)	76(2)	113(2)	60(2)	-6(2)	22(1)	12(2)
C(23)	124(2)	90(2)	98(2)	48(2)	83(2)	55(2)
C(24)	185(4)	127(3)	162(4)	99(3)	122(3)	107(3)
C(25)	117(3)	82(2)	135(3)	15(2)	76(2)	-14(2)
C(26)	206(5)	170(4)	129(3)	88(3)	133(3)	97(4)
O(1)	89(1)	78(1)	82(1)	22(1)	52(1)	45(1)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

Table S4. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for for (*E*)-1-(Triphenylsilyl)-3,4,4-trimethyl-1-penten-3-ol (entry 16, Table 3)

	x	y	z	U(eq)
H(2)	6842	836	3602	75
H(3)	8590	-326	3781	94
H(4)	10769	372	3529	102
H(5)	11198	2238	3074	100
H(6)	9426	3414	2873	76
H(8)	8270	5666	4482	70
H(9)	9054	7466	4042	81
H(10)	8323	7570	1986	83
H(11)	6876	5846	368	86
H(12)	6082	4039	805	73
H(14)	3285	3385	2168	82
H(15)	871	2325	592	95
H(16)	600	537	-751	86
H(17)	2727	-155	-555	112
H(18)	5160	909	986	101
H(19)	5455	3902	4534	61
H(20)	7901	2951	5643	70
H(22A)	8760	5139	7664	136
H(22B)	9309	3975	7998	136
H(22C)	8415	4586	8668	136
H(24A)	8634	2079	7995	188
H(24B)	7757	1440	6551	188
H(24C)	7306	877	7504	188
H(25A)	4491	898	6220	166
H(25B)	4874	1544	5284	166
H(25C)	4063	2139	6044	166
H(26A)	7307	3039	9105	203
H(26B)	5869	1909	8556	203
H(26C)	5624	3197	8376	203
H(1)	4931	3815	6318	112