

List of Supplementary Information

**Redox-active Polyiron Complexes with Tetra(ethynylphenyl)ethene and [2,2]Paracyclophane Spacers
Containing Ethynylphenyl Units: Extension to Higher Dimensional Molecular Wire.**

Yuya Tanaka, Takehiro Ozawa, Akiko Inagaki, and Munetaka Akita*

*Chemical Resources Laboratory, Tokyo Institute of Technology, R1-27, 4259 Nagatsuta, Midori-ku,
Yokohama 226-8503, Japan*

Table S1. Interatomic distances for 1 .	1
Table S2. Bond angles for 1 .	2

Table S1. Interatomic distances for 1.

ATOM	ATOM	DISTANCE	ATOM	ATOM	DISTANCE
Fe(1)	P(1)	2.168(3)	C(13)	C(18)	1.40(2)
Fe(1)	P(2)	2.157(4)	C(14)	C(15)	1.35(1)
Fe(1)	C(11)	1.87(1)	C(15)	C(16)	1.43(2)
Fe(1)	C(110)	2.12(1)	C(16)	C(17)	1.40(1)
Fe(1)	C(111)	2.13(1)	C(17)	C(18)	1.36(1)
Fe(1)	C(112)	2.141(9)	C(21)	C(22)	1.21(1)
Fe(1)	C(113)	2.08(1)	C(22)	C(23)	1.45(1)
Fe(1)	C(114)	2.13(1)	C(23)	C(24)	1.38(1)
Fe(2)	P(3)	2.167(4)	C(23)	C(28)	1.41(2)
Fe(2)	P(4)	2.171(3)	C(24)	C(25)	1.40(1)
Fe(2)	C(21)	1.872(9)	C(25)	C(26)	1.37(2)
Fe(2)	C(210)	2.132(8)	C(26)	C(27)	1.40(1)
Fe(2)	C(211)	2.102(9)	C(27)	C(28)	1.37(1)
Fe(2)	C(212)	2.13(1)	C(110)	C(111)	1.45(2)
Fe(2)	C(213)	2.16(1)	C(110)	C(114)	1.42(2)
Fe(2)	C(214)	2.16(1)	C(110)	C(115)	1.49(2)
P(1)	C(121)	1.80(1)	C(111)	C(112)	1.40(2)
P(1)	C(131)	1.84(2)	C(111)	C(116)	1.49(2)
P(1)	C(141)	1.82(1)	C(112)	C(113)	1.40(2)
P(2)	C(122)	1.83(1)	C(112)	C(117)	1.47(1)
P(2)	C(151)	1.82(2)	C(113)	C(114)	1.45(1)
P(2)	C(161)	1.81(1)	C(113)	C(118)	1.47(2)
P(3)	C(221)	1.824(9)	C(114)	C(119)	1.50(2)
P(3)	C(231)	1.82(1)	C(121)	C(122)	1.50(3)
P(3)	C(241)	1.84(1)	C(131)	C(132)	1.36(2)
P(4)	C(222)	1.87(1)	C(131)	C(136)	1.39(2)
P(4)	C(251)	1.84(1)	C(132)	C(133)	1.42(3)
P(4)	C(261)	1.82(1)	C(133)	C(134)	1.35(3)
O(1)	C(312)	1.67(2)	C(134)	C(135)	1.39(2)
O(1)	C(312)	1.67(2)	C(135)	C(136)	1.39(3)
C(1)	C(1)	1.30(1)	C(141)	C(142)	1.38(2)
C(1)	C(16)	1.52(1)	C(141)	C(146)	1.39(2)
C(1)	C(26)	1.49(1)	C(142)	C(143)	1.42(2)
C(11)	C(12)	1.21(1)	C(143)	C(144)	1.36(2)
C(12)	C(13)	1.47(1)	C(144)	C(145)	1.40(2)
C(13)	C(14)	1.37(2)	C(145)	C(146)	1.40(2)

Table S1. Interatomic distances for 1. (cont'd.)

ATOM	ATOM	DISTANCE	ATOM	ATOM	DISTANCE
C(151)	C(152)	1.35(1)	C(251)	C(256)	1.36(1)
C(151)	C(156)	1.40(3)	C(252)	C(253)	1.38(2)
C(152)	C(153)	1.43(2)	C(253)	C(254)	1.30(2)
C(153)	C(154)	1.33(3)	C(254)	C(255)	1.43(2)
C(154)	C(155)	1.38(2)	C(255)	C(256)	1.39(2)
C(155)	C(156)	1.42(3)	C(261)	C(262)	1.42(2)
C(161)	C(162)	1.36(2)	C(261)	C(266)	1.40(1)
C(161)	C(166)	1.34(2)	C(262)	C(263)	1.41(2)
C(162)	C(163)	1.43(2)	C(263)	C(264)	1.37(2)
C(163)	C(164)	1.33(3)	C(264)	C(265)	1.38(2)
C(164)	C(165)	1.31(5)	C(265)	C(266)	1.40(2)
C(165)	C(166)	1.38(3)	C(311)	C(312)	1.55(3)
C(210)	C(211)	1.43(1)			
C(210)	C(214)	1.44(2)			
C(210)	C(215)	1.47(2)			
C(211)	C(212)	1.42(2)			
C(211)	C(216)	1.52(2)			
C(212)	C(213)	1.40(2)			
C(212)	C(217)	1.51(1)			
C(213)	C(214)	1.42(1)			
C(213)	C(218)	1.48(2)			
C(214)	C(219)	1.47(1)			
C(221)	C(222)	1.54(2)			
C(231)	C(232)	1.40(2)			
C(231)	C(236)	1.37(1)			
C(232)	C(233)	1.40(2)			
C(233)	C(234)	1.37(2)			
C(234)	C(235)	1.37(2)			
C(235)	C(236)	1.37(2)			
C(241)	C(242)	1.38(2)			
C(241)	C(246)	1.39(2)			
C(242)	C(243)	1.36(2)			
C(243)	C(244)	1.35(2)			
C(244)	C(245)	1.42(3)			
C(245)	C(246)	1.37(2)			
C(251)	C(252)	1.38(2)			

Table S2. Bond angles for **1**.

ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE	ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE
P(1)	Fe(1)	P(2)	85.2(1)	P(4)	Fe(2)	C(210)	141.9(3)
P(1)	Fe(1)	C(11)	83.6(3)	P(4)	Fe(2)	C(211)	163.4(4)
P(1)	Fe(1)	C(110)	118.5(3)	P(4)	Fe(2)	C(212)	124.3(3)
P(1)	Fe(1)	C(111)	158.4(3)	P(4)	Fe(2)	C(213)	99.5(3)
P(1)	Fe(1)	C(112)	147.2(4)	P(4)	Fe(2)	C(214)	107.0(3)
P(1)	Fe(1)	C(113)	110.2(4)	C(21)	Fe(2)	C(210)	130.7(4)
P(1)	Fe(1)	C(114)	97.2(3)	C(21)	Fe(2)	C(211)	93.6(4)
P(2)	Fe(1)	C(11)	84.7(4)	C(21)	Fe(2)	C(212)	87.5(4)
P(2)	Fe(1)	C(110)	109.6(4)	C(21)	Fe(2)	C(213)	116.8(5)
P(2)	Fe(1)	C(111)	101.8(4)	C(21)	Fe(2)	C(214)	152.0(4)
P(2)	Fe(1)	C(112)	125.5(4)	C(210)	Fe(2)	C(211)	39.4(3)
P(2)	Fe(1)	C(113)	164.2(4)	C(210)	Fe(2)	C(212)	65.1(4)
P(2)	Fe(1)	C(114)	144.5(3)	C(210)	Fe(2)	C(213)	64.8(5)
C(11)	Fe(1)	C(110)	153.8(4)	C(210)	Fe(2)	C(214)	39.0(5)
C(11)	Fe(1)	C(111)	117.1(4)	C(211)	Fe(2)	C(212)	39.3(5)
C(11)	Fe(1)	C(112)	87.8(4)	C(211)	Fe(2)	C(213)	65.3(5)
C(11)	Fe(1)	C(113)	93.1(5)	C(211)	Fe(2)	C(214)	65.8(4)
C(11)	Fe(1)	C(114)	130.7(5)	C(212)	Fe(2)	C(213)	38.0(4)
C(110)	Fe(1)	C(111)	39.9(4)	C(212)	Fe(2)	C(214)	64.5(4)
C(110)	Fe(1)	C(112)	66.1(4)	C(213)	Fe(2)	C(214)	38.5(4)
C(110)	Fe(1)	C(113)	67.1(5)	Fe(1)	P(1)	C(121)	108.3(5)
C(110)	Fe(1)	C(114)	39.1(5)	Fe(1)	P(1)	C(131)	118.3(3)
C(111)	Fe(1)	C(112)	38.2(5)	Fe(1)	P(1)	C(141)	121.7(4)
C(111)	Fe(1)	C(113)	65.2(6)	C(121)	P(1)	C(131)	103.4(7)
C(111)	Fe(1)	C(114)	65.3(5)	C(121)	P(1)	C(141)	100.5(5)
C(112)	Fe(1)	C(113)	38.7(6)	C(131)	P(1)	C(141)	101.9(6)
C(112)	Fe(1)	C(114)	65.4(4)	Fe(1)	P(2)	C(122)	107.6(6)
C(113)	Fe(1)	C(114)	40.3(4)	Fe(1)	P(2)	C(151)	120.2(4)
P(3)	Fe(2)	P(4)	86.5(1)	Fe(1)	P(2)	C(161)	119.5(4)
P(3)	Fe(2)	C(21)	82.4(4)	C(122)	P(2)	C(151)	102.5(7)
P(3)	Fe(2)	C(210)	98.8(4)	C(122)	P(2)	C(161)	106.6(5)
P(3)	Fe(2)	C(211)	110.1(4)	C(151)	P(2)	C(161)	98.5(7)
P(3)	Fe(2)	C(212)	147.2(4)	Fe(2)	P(3)	C(221)	107.8(4)
P(3)	Fe(2)	C(213)	160.0(3)	Fe(2)	P(3)	C(231)	118.8(4)
P(3)	Fe(2)	C(214)	121.5(3)	Fe(2)	P(3)	C(241)	123.9(4)
P(4)	Fe(2)	C(21)	87.4(3)	C(221)	P(3)	C(231)	103.8(5)

Table S2. Bond angles for **1**. (cont'd.)

ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE	ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE
C(221)	P(3)	C(241)	99.6(4)	Fe(1)	C(110)	C(111)	70.5(6)
C(231)	P(3)	C(241)	99.7(5)	Fe(1)	C(110)	C(114)	70.8(6)
Fe(2)	P(4)	C(222)	109.6(4)	Fe(1)	C(110)	C(115)	137.7(8)
Fe(2)	P(4)	C(251)	118.7(3)	C(111)	C(110)	C(114)	106(1)
Fe(2)	P(4)	C(261)	120.2(3)	C(111)	C(110)	C(115)	124(1)
C(222)	P(4)	C(251)	102.9(5)	C(114)	C(110)	C(115)	127(1)
C(222)	P(4)	C(261)	101.1(5)	Fe(1)	C(111)	C(110)	69.6(6)
C(251)	P(4)	C(261)	101.7(5)	Fe(1)	C(111)	C(112)	71.3(7)
C(312)	O(1)	C(312*)	151(2)	Fe(1)	C(111)	C(116)	133(1)
C(1*)	C(1)	C(16)	121.9(4)	C(110)	C(111)	C(112)	109(1)
C(1*)	C(1)	C(26)	124.6(4)	C(110)	C(111)	C(116)	123(1)
C(16)	C(1)	C(26)	113.4(6)	C(112)	C(111)	C(116)	127(1)
Fe(1)	C(11)	C(12)	175.9(8)	Fe(1)	C(112)	C(111)	70.5(6)
C(11)	C(12)	C(13)	177(1)	Fe(1)	C(112)	C(113)	68.4(6)
C(12)	C(13)	C(14)	122(1)	Fe(1)	C(112)	C(117)	128.0(9)
C(12)	C(13)	C(18)	120(1)	C(111)	C(112)	C(113)	108.6(9)
C(14)	C(13)	C(18)	117.9(9)	C(111)	C(112)	C(117)	126(1)
C(13)	C(14)	C(15)	122(1)	C(113)	C(112)	C(117)	125(1)
C(14)	C(15)	C(16)	120(1)	Fe(1)	C(113)	C(112)	72.9(7)
C(1)	C(16)	C(15)	119.8(9)	Fe(1)	C(113)	C(114)	71.6(6)
C(1)	C(16)	C(17)	122.6(9)	Fe(1)	C(113)	C(118)	126.4(9)
C(15)	C(16)	C(17)	117.6(8)	C(112)	C(113)	C(114)	108(1)
C(16)	C(17)	C(18)	120(1)	Fe(1)	C(114)	C(110)	70.1(7)
C(13)	C(18)	C(17)	122(1)	Fe(1)	C(114)	C(113)	68.1(7)
Fe(2)	C(21)	C(22)	176.9(9)	Fe(1)	C(114)	C(119)	132.5(7)
C(21)	C(22)	C(23)	175.7(9)	C(110)	C(114)	C(113)	108(1)
C(22)	C(23)	C(24)	125(1)	C(110)	C(114)	C(119)	128.0(9)
C(22)	C(23)	C(28)	117.9(8)	C(113)	C(114)	C(119)	124(1)
C(24)	C(23)	C(28)	117.2(8)	P(1)	C(121)	C(122)	111.9(8)
C(23)	C(24)	C(25)	122(1)	P(2)	C(122)	C(121)	114(1)
C(24)	C(25)	C(26)	120.5(8)	P(1)	C(131)	C(132)	120(1)
C(1)	C(26)	C(25)	122.7(8)	P(1)	C(131)	C(136)	121(1)
C(1)	C(26)	C(27)	118.9(9)	C(132)	C(131)	C(136)	119(2)
C(25)	C(26)	C(27)	118.1(8)	C(131)	C(132)	C(133)	121(2)
C(26)	C(27)	C(28)	122(1)	C(132)	C(133)	C(134)	119(2)
C(23)	C(28)	C(27)	120.4(8)	C(133)	C(134)	C(135)	122(2)

Table S2. Bond angles for 1. (cont'd.)

ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE	ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE
C(134)	C(135)	C(136)	119(2)	C(210)	C(211)	C(216)	127(1)
C(131)	C(136)	C(135)	121(1)	C(212)	C(211)	C(216)	126.3(9)
P(1)	C(141)	C(142)	121.8(9)	Fe(2)	C(212)	C(211)	69.3(6)
P(1)	C(141)	C(146)	119.1(8)	Fe(2)	C(212)	C(213)	72.2(6)
C(142)	C(141)	C(146)	119.1(9)	Fe(2)	C(212)	C(217)	128.7(7)
C(141)	C(142)	C(143)	121(1)	C(211)	C(212)	C(213)	109.2(9)
C(142)	C(143)	C(144)	119(1)	C(211)	C(212)	C(217)	124(1)
C(143)	C(144)	C(145)	120(1)	C(213)	C(212)	C(217)	127(1)
C(144)	C(145)	C(146)	120(1)	Fe(2)	C(213)	C(212)	69.8(7)
C(141)	C(146)	C(145)	120(1)	Fe(2)	C(213)	C(214)	70.9(7)
P(2)	C(151)	C(152)	122(1)	Fe(2)	C(213)	C(218)	131.3(7)
P(2)	C(151)	C(156)	119(1)	C(212)	C(213)	C(214)	109(1)
C(152)	C(151)	C(156)	119(1)	C(212)	C(213)	C(218)	126(1)
C(151)	C(152)	C(153)	121(1)	C(214)	C(213)	C(218)	125(1)
C(152)	C(153)	C(154)	121(1)	Fe(2)	C(214)	C(210)	69.3(5)
C(153)	C(154)	C(155)	120(2)	Fe(2)	C(214)	C(213)	70.6(6)
C(154)	C(155)	C(156)	120(2)	Fe(2)	C(214)	C(219)	133.4(7)
C(151)	C(156)	C(155)	120(1)	C(210)	C(214)	C(213)	107.1(9)
P(2)	C(161)	C(162)	119.3(8)	C(210)	C(214)	C(219)	127(1)
P(2)	C(161)	C(166)	125(1)	C(213)	C(214)	C(219)	125(1)
C(162)	C(161)	C(166)	116(1)	P(3)	C(221)	C(222)	107.2(7)
C(161)	C(162)	C(163)	119(2)	P(4)	C(222)	C(221)	110.4(7)
C(162)	C(163)	C(164)	121(2)	P(3)	C(231)	C(232)	121.3(9)
C(163)	C(164)	C(165)	120(2)	P(3)	C(231)	C(236)	120.2(8)
C(164)	C(165)	C(166)	118(2)	C(232)	C(231)	C(236)	118(1)
C(161)	C(166)	C(165)	125(2)	C(231)	C(232)	C(233)	120(1)
Fe(2)	C(210)	C(211)	69.2(5)	C(232)	C(233)	C(234)	122(1)
Fe(2)	C(210)	C(214)	71.7(5)	C(233)	C(234)	C(235)	117(1)
Fe(2)	C(210)	C(215)	134.5(9)	C(234)	C(235)	C(236)	122(1)
C(211)	C(210)	C(214)	108(1)	C(231)	C(236)	C(235)	121(1)
C(211)	C(210)	C(215)	126(1)	P(3)	C(241)	C(242)	120.8(9)
C(214)	C(210)	C(215)	124.7(9)	P(3)	C(241)	C(246)	122(1)
Fe(2)	C(211)	C(210)	71.4(5)	C(242)	C(241)	C(246)	117(1)
Fe(2)	C(211)	C(212)	71.3(5)	C(241)	C(242)	C(243)	121(1)
Fe(2)	C(211)	C(216)	126.4(8)	C(242)	C(243)	C(244)	122(2)
C(210)	C(211)	C(212)	107(1)	C(243)	C(244)	C(245)	120(1)

Table S2. Bond angles for 1. (cont'd.)

ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE
C(244)	C(245)	C(246)	118(1)
C(241)	C(246)	C(245)	122(1)
P(4)	C(251)	C(252)	120.7(7)
P(4)	C(251)	C(256)	121.0(8)
C(252)	C(251)	C(256)	118.2(9)
C(251)	C(252)	C(253)	121.6(9)
C(252)	C(253)	C(254)	120(1)
C(253)	C(254)	C(255)	122(1)
C(254)	C(255)	C(256)	117(1)
C(251)	C(256)	C(255)	122(1)
P(4)	C(261)	C(262)	120.7(7)
P(4)	C(261)	C(266)	121(1)
C(262)	C(261)	C(266)	118(1)
C(261)	C(262)	C(263)	120(1)
C(262)	C(263)	C(264)	121(1)
C(263)	C(264)	C(265)	121(1)
C(264)	C(265)	C(266)	120(1)
C(261)	C(266)	C(265)	122(1)
O(1)	C(312)	C(311)	116(2)