

Table 1. Crystal data and structure refinement for (1).

Empirical formula	C ₂₄ H ₂₃ FeN
Formula weight	381.28
Crystallization Solvent	Hexanes
Crystal Habit	Lozenge
Crystal size	0.41 x 0.37 x 0.37 mm ³
Crystal color	Golden yellow

Data Collection

Preliminary Photos	None
Type of diffractometer	CAD-4
Wavelength	0.71073 Å MoK α
Data Collection Temperature	85 K
Theta range for reflections used in lattice determination	12.4 to 13.0°
Unit cell dimensions	a = 14.311(4) Å b = 12.926(3) Å c = 19.656(5) Å β = 92.19(2)°
Volume	3633.4(16) Å ³
Z	8
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /c
Density (calculated)	1.394 Mg/m ³
F(000)	1600
Theta range for data collection	1.9 to 25.0°
Completeness to $\theta = 25.00^\circ$	99.9 %
Index ranges	0 ≤ h ≤ 16, -15 ≤ k ≤ 15, -23 ≤ l ≤ 23
Data collection scan type	ω scans
Reflections collected	16775
Independent reflections	6381 [R _{int} = 0.0189; GOF _{merge} = 1.08]
Absorption coefficient	0.837 mm ⁻¹
Absorption correction	None
Number of standards	3 reflections measured every 75 min.
Variation of standards	-0.21%.

Table 1 (cont.)

Structure solution and Refinement

Structure solution program	SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)
Primary solution method	Direct methods
Secondary solution method	All heavy atoms in direct methods solution
Hydrogen placement	Difference Fourier map
Structure refinement program	SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)
Refinement method	Full matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	6381 / 0 / 654
Treatment of hydrogen atoms	Unrestrained
Goodness-of-fit on F^2	1.759
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0282$, $wR_2 = 0.0602$
R indices (all data)	$R_1 = 0.0352$, $wR_2 = 0.0619$
Type of weighting scheme used	Observed
Weighting scheme used	$w = 1/\sigma^2(F_o^2)$
Max shift/error	0.002
Average shift/error	0.000
Extinction coefficient	0.00344(13)
Largest diff. peak and hole	0.381 and -0.335 e.Å ⁻³

Special Refinement Details

Refinement of F^2 against ALL reflections. The weighted R-factor (wR) and goodness of fit (S) are based on F^2 . conventional R-factors (R) are based on F , with F set to zero for negative F^2 . The threshold expression of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating R-factors(gt) etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F , and R-factors based on ALL data will be even larger.

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (1). $U(\text{eq})$ is defined as the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
Fe(1)	7636(1)	116(1)	1087(1)	12(1)
N(1)	5485(1)	-485(1)	1105(1)	12(1)
C(1A)	6456(1)	-751(1)	1142(1)	12(1)
C(2A)	7025(1)	-871(1)	1749(1)	14(1)
C(3A)	7906(1)	-1256(1)	1563(1)	16(1)
C(4A)	7885(1)	-1394(1)	846(1)	17(1)
C(5A)	6989(1)	-1078(1)	582(1)	15(1)
C(6A)	7321(1)	1667(1)	1013(1)	22(1)
C(7A)	7930(2)	1488(1)	1583(1)	23(1)
C(8A)	8755(1)	1030(2)	1346(1)	21(1)
C(9A)	8656(1)	918(2)	627(1)	19(1)
C(10A)	7758(1)	1314(2)	422(1)	23(1)
C(11A)	4845(1)	-1284(1)	1231(1)	12(1)
C(12A)	5117(1)	-2325(1)	1173(1)	13(1)
C(13A)	4478(1)	-3113(1)	1276(1)	14(1)
C(14A)	3561(1)	-2913(1)	1447(1)	14(1)
C(15A)	3303(1)	-1884(1)	1507(1)	15(1)
C(16A)	3922(1)	-1077(1)	1398(1)	15(1)
C(17A)	2888(1)	-3779(2)	1584(1)	18(1)
C(18A)	5225(1)	579(1)	1213(1)	11(1)
C(19A)	5240(1)	1013(1)	1859(1)	14(1)
C(20A)	5025(1)	2055(1)	1940(1)	15(1)
C(21A)	4775(1)	2674(1)	1383(1)	12(1)
C(22A)	4747(1)	2220(1)	740(1)	14(1)
C(23A)	4971(1)	1184(1)	655(1)	13(1)
C(24A)	4555(2)	3804(2)	1471(1)	18(1)
Fe(2)	7424(1)	25(1)	5994(1)	12(1)
N(2)	9518(1)	-249(1)	6596(1)	14(1)
C(1B)	8557(1)	-110(1)	6692(1)	13(1)
C(2B)	7894(1)	-927(1)	6765(1)	15(1)
C(3B)	7019(1)	-474(2)	6919(1)	17(1)
C(4B)	7130(1)	618(2)	6925(1)	16(1)
C(5B)	8074(1)	848(1)	6774(1)	14(1)
C(6B)	7933(1)	-165(2)	5041(1)	17(1)
C(7B)	7210(1)	-890(2)	5154(1)	18(1)
C(8B)	6381(1)	-331(2)	5287(1)	18(1)
C(9B)	6594(1)	742(2)	5262(1)	17(1)
C(10B)	7553(1)	844(2)	5111(1)	16(1)
C(11B)	10135(1)	573(1)	6438(1)	13(1)
C(12B)	9875(1)	1405(1)	6024(1)	15(1)
C(13B)	10508(1)	2206(1)	5922(1)	16(1)
C(14B)	11406(1)	2198(1)	6211(1)	14(1)
C(15B)	11664(1)	1340(1)	6606(1)	15(1)
C(16B)	11045(1)	546(1)	6722(1)	14(1)
C(17B)	12079(1)	3079(2)	6121(1)	20(1)
C(18B)	9872(1)	-1279(1)	6538(1)	12(1)
C(19B)	10233(1)	-1607(1)	5928(1)	15(1)

C(20B)	10593(1)	-2597(1)	5869(1)	17(1)
C(21B)	10603(1)	-3287(1)	6414(1)	16(1)
C(22B)	10244(1)	-2946(1)	7024(1)	17(1)
C(23B)	9883(1)	-1956(1)	7089(1)	15(1)
C(24B)	10975(2)	-4373(2)	6342(1)	26(1)

Table 3 Bond lengths [Å] and angles [°] for (1)

Fe(1)-C(9A)	2.0297(19)	C(20A)-H(20A)	0.93(2)
Fe(1)-C(1A)	2.0334(17)	C(21A)-C(22A)	1.392(3)
Fe(1)-C(10A)	2.0382(19)	C(21A)-C(24A)	1.506(2)
Fe(1)-C(3A)	2.0366(18)	C(22A)-C(23A)	1.387(2)
Fe(1)-C(5A)	2.0388(18)	C(22A)-H(22A)	0.949(19)
Fe(1)-C(2A)	2.0438(18)	C(23A)-H(23A)	0.937(18)
Fe(1)-C(8A)	2.0387(19)	C(24A)-H(24A)	0.98(3)
Fe(1)-C(4A)	2.0432(18)	C(24A)-H(24B)	0.93(3)
Fe(1)-C(6A)	2.0579(19)	C(24A)-H(24C)	0.92(2)
Fe(1)-C(7A)	2.0586(19)	Fe(2)-C(3B)	2.0345(19)
N(1)-C(11A)	1.409(2)	Fe(2)-C(4B)	2.0417(19)
N(1)-C(1A)	1.431(2)	Fe(2)-C(10B)	2.0476(19)
N(1)-C(18A)	1.442(2)	Fe(2)-C(7B)	2.0447(19)
C(1A)-C(2A)	1.427(2)	Fe(2)-C(2B)	2.0445(19)
C(1A)-C(5A)	1.427(2)	Fe(2)-C(6B)	2.0499(19)
C(2A)-C(3A)	1.416(3)	Fe(2)-C(9B)	2.0530(19)
C(2A)-H(2A)	0.95(2)	Fe(2)-C(8B)	2.054(2)
C(3A)-C(4A)	1.420(3)	Fe(2)-C(5B)	2.0577(18)
C(3A)-H(3A)	0.92(2)	Fe(2)-C(1B)	2.0891(18)
C(4A)-C(5A)	1.426(3)	N(2)-C(1B)	1.407(2)
C(4A)-H(4A)	0.95(2)	N(2)-C(11B)	1.423(2)
C(5A)-H(5A)	0.948(18)	N(2)-C(18B)	1.430(2)
C(6A)-C(7A)	1.412(3)	C(1B)-C(5B)	1.430(2)
C(6A)-C(10A)	1.416(3)	C(1B)-C(2B)	1.430(2)
C(6A)-H(6A)	0.96(2)	C(2B)-C(3B)	1.426(3)
C(7A)-C(8A)	1.415(3)	C(2B)-H(2B)	0.942(18)
C(7A)-H(7A)	0.98(2)	C(3B)-C(4B)	1.421(3)
C(8A)-C(9A)	1.420(3)	C(3B)-H(3B)	0.929(19)
C(8A)-H(8A)	1.00(2)	C(4B)-C(5B)	1.425(3)
C(9A)-C(10A)	1.427(3)	C(4B)-H(4B)	0.952(19)
C(9A)-H(9A)	0.93(2)	C(5B)-H(5B)	0.963(18)
C(10A)-H(10A)	0.93(2)	C(6B)-C(10B)	1.423(3)
C(11A)-C(16A)	1.398(2)	C(6B)-C(7B)	1.419(3)
C(11A)-C(12A)	1.407(2)	C(6B)-H(6B)	0.96(2)
C(12A)-C(13A)	1.389(2)	C(7B)-C(8B)	1.422(3)
C(12A)-H(12A)	0.94(2)	C(7B)-H(7B)	0.94(2)
C(13A)-C(14A)	1.391(3)	C(8B)-C(9B)	1.422(3)
C(13A)-H(13A)	0.927(19)	C(8B)-H(8B)	0.93(2)
C(14A)-C(15A)	1.387(3)	C(9B)-C(10B)	1.421(3)
C(14A)-C(17A)	1.507(2)	C(9B)-H(9B)	0.92(2)
C(15A)-C(16A)	1.390(3)	C(10B)-H(10B)	0.950(19)
C(15A)-H(15A)	0.948(19)	C(11B)-C(12B)	1.390(2)
C(16A)-H(16A)	0.931(18)	C(11B)-C(16B)	1.398(3)
C(17A)-H(17A)	0.95(2)	C(12B)-C(13B)	1.396(3)
C(17A)-H(17B)	0.97(2)	C(12B)-H(12B)	0.96(2)
C(17A)-H(17C)	1.00(2)	C(13B)-C(14B)	1.387(3)
C(18A)-C(23A)	1.384(2)	C(13B)-H(13B)	0.922(19)
C(18A)-C(19A)	1.389(2)	C(14B)-C(15B)	1.395(2)
C(19A)-C(20A)	1.392(3)	C(14B)-C(17B)	1.506(3)
C(19A)-H(19A)	0.935(19)	C(15B)-C(16B)	1.380(3)
C(20A)-C(21A)	1.392(3)	C(15B)-H(15B)	0.948(19)

C(16B)-H(16B)	0.925(19)	C(4A)-Fe(1)-C(6A)	162.52(8)
C(17B)-H(17D)	1.00(2)	C(9A)-Fe(1)-C(7A)	68.48(8)
C(17B)-H(17E)	0.96(2)	C(1A)-Fe(1)-C(7A)	127.22(8)
C(17B)-H(17F)	0.93(2)	C(10A)-Fe(1)-C(7A)	68.20(9)
C(18B)-C(23B)	1.392(2)	C(3A)-Fe(1)-C(7A)	120.04(8)
C(18B)-C(19B)	1.390(3)	C(5A)-Fe(1)-C(7A)	164.46(8)
C(19B)-C(20B)	1.386(3)	C(2A)-Fe(1)-C(7A)	108.70(8)
C(19B)-H(19B)	0.940(19)	C(8A)-Fe(1)-C(7A)	40.41(8)
C(20B)-C(21B)	1.393(3)	C(4A)-Fe(1)-C(7A)	153.88(8)
C(20B)-H(20B)	0.976(19)	C(6A)-Fe(1)-C(7A)	40.11(8)
C(21B)-C(22B)	1.394(3)	C(11A)-N(1)-C(1A)	116.86(14)
C(21B)-C(24B)	1.510(3)	C(11A)-N(1)-C(18A)	120.00(14)
C(22B)-C(23B)	1.388(3)	C(1A)-N(1)-C(18A)	118.54(14)
C(22B)-H(22B)	0.962(19)	C(2A)-C(1A)-C(5A)	108.00(16)
C(23B)-H(23B)	0.91(2)	C(2A)-C(1A)-N(1)	126.16(16)
C(24B)-H(24D)	1.03(2)	C(5A)-C(1A)-N(1)	125.35(16)
C(24B)-H(24E)	0.92(3)	C(2A)-C(1A)-Fe(1)	69.90(10)
C(24B)-H(24F)	0.96(3)	C(5A)-C(1A)-Fe(1)	69.70(10)
		N(1)-C(1A)-Fe(1)	132.17(12)
C(9A)-Fe(1)-C(1A)	156.66(8)	C(3A)-C(2A)-C(1A)	107.87(16)
C(9A)-Fe(1)-C(10A)	41.08(8)	C(3A)-C(2A)-Fe(1)	69.42(10)
C(1A)-Fe(1)-C(10A)	123.03(8)	C(1A)-C(2A)-Fe(1)	69.12(10)
C(9A)-Fe(1)-C(3A)	121.50(8)	C(3A)-C(2A)-H(2A)	129.0(12)
C(1A)-Fe(1)-C(3A)	68.77(7)	C(1A)-C(2A)-H(2A)	123.1(12)
C(10A)-Fe(1)-C(3A)	159.64(8)	Fe(1)-C(2A)-H(2A)	125.8(12)
C(9A)-Fe(1)-C(5A)	119.45(8)	C(2A)-C(3A)-C(4A)	108.40(16)
C(1A)-Fe(1)-C(5A)	41.01(7)	C(2A)-C(3A)-Fe(1)	69.97(10)
C(10A)-Fe(1)-C(5A)	108.17(8)	C(4A)-C(3A)-Fe(1)	69.89(10)
C(3A)-Fe(1)-C(5A)	68.81(8)	C(2A)-C(3A)-H(3A)	125.3(13)
C(9A)-Fe(1)-C(2A)	159.17(8)	C(4A)-C(3A)-H(3A)	126.3(13)
C(1A)-Fe(1)-C(2A)	40.99(7)	Fe(1)-C(3A)-H(3A)	126.4(13)
C(10A)-Fe(1)-C(2A)	158.81(8)	C(3A)-C(4A)-C(5A)	108.07(17)
C(3A)-Fe(1)-C(2A)	40.62(7)	C(3A)-C(4A)-Fe(1)	69.38(10)
C(5A)-Fe(1)-C(2A)	68.88(8)	C(5A)-C(4A)-Fe(1)	69.40(10)
C(9A)-Fe(1)-C(8A)	40.86(8)	C(3A)-C(4A)-H(4A)	124.6(13)
C(1A)-Fe(1)-C(8A)	162.21(8)	C(5A)-C(4A)-H(4A)	127.2(13)
C(10A)-Fe(1)-C(8A)	68.55(8)	Fe(1)-C(4A)-H(4A)	123.1(13)
C(3A)-Fe(1)-C(8A)	104.87(8)	C(1A)-C(5A)-C(4A)	107.66(17)
C(5A)-Fe(1)-C(8A)	153.93(8)	C(1A)-C(5A)-Fe(1)	69.29(10)
C(2A)-Fe(1)-C(8A)	123.63(8)	C(4A)-C(5A)-Fe(1)	69.73(10)
C(9A)-Fe(1)-C(4A)	104.50(8)	C(1A)-C(5A)-H(5A)	125.7(11)
C(1A)-Fe(1)-C(4A)	68.77(7)	C(4A)-C(5A)-H(5A)	126.5(11)
C(10A)-Fe(1)-C(4A)	123.89(9)	Fe(1)-C(5A)-H(5A)	123.4(11)
C(3A)-Fe(1)-C(4A)	40.73(8)	C(7A)-C(6A)-C(10A)	108.67(18)
C(5A)-Fe(1)-C(4A)	40.88(7)	C(7A)-C(6A)-Fe(1)	69.97(11)
C(2A)-Fe(1)-C(4A)	68.50(8)	C(10A)-C(6A)-Fe(1)	69.04(11)
C(8A)-Fe(1)-C(4A)	117.96(8)	C(7A)-C(6A)-H(6A)	124.1(12)
C(9A)-Fe(1)-C(6A)	68.31(8)	C(10A)-C(6A)-H(6A)	127.2(12)
C(1A)-Fe(1)-C(6A)	111.17(7)	Fe(1)-C(6A)-H(6A)	126.0(12)
C(10A)-Fe(1)-C(6A)	40.43(8)	C(6A)-C(7A)-C(8A)	107.74(18)
C(3A)-Fe(1)-C(6A)	156.65(8)	C(6A)-C(7A)-Fe(1)	69.92(11)
C(5A)-Fe(1)-C(6A)	127.52(8)	C(8A)-C(7A)-Fe(1)	69.04(11)
C(2A)-Fe(1)-C(6A)	123.73(8)	C(6A)-C(7A)-H(7A)	124.5(13)
C(8A)-Fe(1)-C(6A)	67.74(8)	C(8A)-C(7A)-H(7A)	127.7(13)

Fe(1)-C(7A)-H(7A)	124.8(13)	C(22A)-C(21A)-C(24A)	120.96(17)
C(7A)-C(8A)-C(9A)	108.46(18)	C(23A)-C(22A)-C(21A)	121.11(17)
C(7A)-C(8A)-Fe(1)	70.55(11)	C(23A)-C(22A)-H(22A)	120.3(12)
C(9A)-C(8A)-Fe(1)	69.22(11)	C(21A)-C(22A)-H(22A)	118.6(12)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	125.2(12)	C(18A)-C(23A)-C(22A)	120.37(17)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	126.4(12)	C(18A)-C(23A)-H(23A)	119.4(12)
Fe(1)-C(8A)-H(8A)	125.0(12)	C(22A)-C(23A)-H(23A)	120.2(12)
C(10A)-C(9A)-C(8A)	107.47(18)	C(21A)-C(24A)-H(24A)	113.4(14)
C(10A)-C(9A)-Fe(1)	69.78(11)	C(21A)-C(24A)-H(24B)	112.2(15)
C(8A)-C(9A)-Fe(1)	69.91(11)	H(24A)-C(24A)-H(24B)	104.8(19)
C(10A)-C(9A)-H(9A)	124.5(12)	C(21A)-C(24A)-H(24C)	112.5(14)
C(8A)-C(9A)-H(9A)	128.0(12)	H(24A)-C(24A)-H(24C)	107.3(19)
Fe(1)-C(9A)-H(9A)	122.6(12)	H(24B)-C(24A)-H(24C)	106.0(19)
C(6A)-C(10A)-C(9A)	107.66(18)	C(3B)-Fe(2)-C(4B)	40.81(8)
C(6A)-C(10A)-Fe(1)	70.53(11)	C(3B)-Fe(2)-C(10B)	163.62(8)
C(9A)-C(10A)-Fe(1)	69.14(11)	C(4B)-Fe(2)-C(10B)	126.39(8)
C(6A)-C(10A)-H(10A)	128.2(13)	C(3B)-Fe(2)-C(7B)	119.91(8)
C(9A)-C(10A)-H(10A)	124.1(13)	C(4B)-Fe(2)-C(7B)	155.59(8)
Fe(1)-C(10A)-H(10A)	123.3(13)	C(10B)-Fe(2)-C(7B)	68.29(8)
C(16A)-C(11A)-C(12A)	117.97(16)	C(3B)-Fe(2)-C(2B)	40.93(7)
C(16A)-C(11A)-N(1)	121.80(16)	C(4B)-Fe(2)-C(2B)	68.67(8)
C(12A)-C(11A)-N(1)	120.21(16)	C(10B)-Fe(2)-C(2B)	154.35(8)
C(13A)-C(12A)-C(11A)	120.26(17)	C(7B)-Fe(2)-C(2B)	106.55(8)
C(13A)-C(12A)-H(12A)	118.5(12)	C(3B)-Fe(2)-C(6B)	154.38(8)
C(11A)-C(12A)-H(12A)	121.2(12)	C(4B)-Fe(2)-C(6B)	162.96(8)
C(14A)-C(13A)-C(12A)	122.11(17)	C(10B)-Fe(2)-C(6B)	40.64(7)
C(14A)-C(13A)-H(13A)	118.6(11)	C(7B)-Fe(2)-C(6B)	40.56(8)
C(12A)-C(13A)-H(13A)	119.3(11)	C(2B)-Fe(2)-C(6B)	119.09(8)
C(13A)-C(14A)-C(15A)	117.05(16)	C(3B)-Fe(2)-C(9B)	126.33(8)
C(13A)-C(14A)-C(17A)	121.34(17)	C(4B)-Fe(2)-C(9B)	108.93(8)
C(15A)-C(14A)-C(17A)	121.57(17)	C(10B)-Fe(2)-C(9B)	40.55(8)
C(16A)-C(15A)-C(14A)	122.25(17)	C(7B)-Fe(2)-C(9B)	68.27(8)
C(16A)-C(15A)-H(15A)	118.6(12)	C(2B)-Fe(2)-C(9B)	162.98(8)
C(14A)-C(15A)-H(15A)	119.1(12)	C(6B)-Fe(2)-C(9B)	68.26(8)
C(15A)-C(16A)-C(11A)	120.35(17)	C(3B)-Fe(2)-C(8B)	107.98(8)
C(15A)-C(16A)-H(16A)	118.9(11)	C(4B)-Fe(2)-C(8B)	121.37(8)
C(11A)-C(16A)-H(16A)	120.8(11)	C(10B)-Fe(2)-C(8B)	68.18(8)
C(14A)-C(17A)-H(17A)	111.9(12)	C(7B)-Fe(2)-C(8B)	40.60(8)
C(14A)-C(17A)-H(17B)	113.0(13)	C(2B)-Fe(2)-C(8B)	125.21(8)
H(17A)-C(17A)-H(17B)	106.1(17)	C(6B)-Fe(2)-C(8B)	68.21(8)
C(14A)-C(17A)-H(17C)	111.1(12)	C(9B)-Fe(2)-C(8B)	40.50(8)
H(17A)-C(17A)-H(17C)	105.4(17)	C(3B)-Fe(2)-C(5B)	68.57(8)
H(17B)-C(17A)-H(17C)	109.0(17)	C(4B)-Fe(2)-C(5B)	40.68(7)
C(23A)-C(18A)-C(19A)	119.34(16)	C(10B)-Fe(2)-C(5B)	108.16(8)
C(23A)-C(18A)-N(1)	119.04(16)	C(7B)-Fe(2)-C(5B)	161.83(8)
C(19A)-C(18A)-N(1)	121.61(16)	C(2B)-Fe(2)-C(5B)	68.49(8)
C(20A)-C(19A)-C(18A)	119.98(17)	C(6B)-Fe(2)-C(5B)	125.23(8)
C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.6(12)	C(9B)-Fe(2)-C(5B)	121.45(8)
C(18A)-C(19A)-H(19A)	120.4(12)	C(8B)-Fe(2)-C(5B)	156.35(8)
C(19A)-C(20A)-C(21A)	121.15(17)	C(3B)-Fe(2)-C(1B)	68.18(8)
C(19A)-C(20A)-H(20A)	119.6(12)	C(4B)-Fe(2)-C(1B)	68.01(7)
C(21A)-C(20A)-H(20A)	119.2(12)	C(10B)-Fe(2)-C(1B)	120.46(7)
C(20A)-C(21A)-C(22A)	118.02(16)	C(7B)-Fe(2)-C(1B)	124.77(8)
C(20A)-C(21A)-C(24A)	121.01(17)	C(2B)-Fe(2)-C(1B)	40.47(7)

C(6B)-Fe(2)-C(1B)	107.21(7)	Fe(2)-C(8B)-H(8B)	125.5(12)
C(9B)-Fe(2)-C(1B)	155.72(7)	C(10B)-C(9B)-C(8B)	107.95(17)
C(8B)-Fe(2)-C(1B)	162.05(7)	C(10B)-C(9B)-Fe(2)	69.52(11)
C(5B)-Fe(2)-C(1B)	40.35(7)	C(8B)-C(9B)-Fe(2)	69.79(11)
C(1B)-N(2)-C(11B)	123.45(15)	C(10B)-C(9B)-H(9B)	124.4(12)
C(1B)-N(2)-C(18B)	118.73(14)	C(8B)-C(9B)-H(9B)	127.6(12)
C(11B)-N(2)-C(18B)	116.94(14)	Fe(2)-C(9B)-H(9B)	125.7(12)
N(2)-C(1B)-C(5B)	127.24(16)	C(9B)-C(10B)-C(6B)	108.10(17)
N(2)-C(1B)-C(2B)	125.07(16)	C(9B)-C(10B)-Fe(2)	69.93(11)
C(5B)-C(1B)-C(2B)	107.59(15)	C(6B)-C(10B)-Fe(2)	69.77(10)
N(2)-C(1B)-Fe(2)	131.38(13)	C(9B)-C(10B)-H(10B)	125.5(12)
C(5B)-C(1B)-Fe(2)	68.64(10)	C(6B)-C(10B)-H(10B)	126.4(12)
C(2B)-C(1B)-Fe(2)	68.09(10)	Fe(2)-C(10B)-H(10B)	126.2(12)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	108.05(16)	C(12B)-C(11B)-C(16B)	118.49(17)
C(3B)-C(2B)-Fe(2)	69.16(11)	C(12B)-C(11B)-N(2)	123.42(16)
C(1B)-C(2B)-Fe(2)	71.44(10)	C(16B)-C(11B)-N(2)	118.08(16)
C(3B)-C(2B)-H(2B)	125.8(11)	C(11B)-C(12B)-C(13B)	119.86(17)
C(1B)-C(2B)-H(2B)	126.1(11)	C(11B)-C(12B)-H(12B)	119.9(12)
Fe(2)-C(2B)-H(2B)	125.7(11)	C(13B)-C(12B)-H(12B)	120.3(12)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	108.08(17)	C(14B)-C(13B)-C(12B)	122.12(17)
C(4B)-C(3B)-Fe(2)	69.86(11)	C(14B)-C(13B)-H(13B)	118.5(12)
C(2B)-C(3B)-Fe(2)	69.91(11)	C(12B)-C(13B)-H(13B)	119.3(12)
C(4B)-C(3B)-H(3B)	124.6(12)	C(13B)-C(14B)-C(15B)	117.15(17)
C(2B)-C(3B)-H(3B)	127.3(12)	C(13B)-C(14B)-C(17B)	122.20(17)
Fe(2)-C(3B)-H(3B)	125.2(11)	C(15B)-C(14B)-C(17B)	120.64(17)
C(3B)-C(4B)-C(5B)	108.18(16)	C(16B)-C(15B)-C(14B)	121.60(17)
C(3B)-C(4B)-Fe(2)	69.32(11)	C(16B)-C(15B)-H(15B)	117.8(12)
C(5B)-C(4B)-Fe(2)	70.26(10)	C(14B)-C(15B)-H(15B)	120.6(12)
C(3B)-C(4B)-H(4B)	127.1(11)	C(15B)-C(16B)-C(11B)	120.72(17)
C(5B)-C(4B)-H(4B)	124.7(11)	C(15B)-C(16B)-H(16B)	121.9(12)
Fe(2)-C(4B)-H(4B)	125.9(11)	C(11B)-C(16B)-H(16B)	117.4(12)
C(1B)-C(5B)-C(4B)	108.04(16)	C(14B)-C(17B)-H(17D)	110.4(13)
C(1B)-C(5B)-Fe(2)	71.01(10)	C(14B)-C(17B)-H(17E)	113.0(14)
C(4B)-C(5B)-Fe(2)	69.06(11)	H(17D)-C(17B)-H(17E)	106.4(18)
C(1B)-C(5B)-H(5B)	125.8(11)	C(14B)-C(17B)-H(17F)	111.3(15)
C(4B)-C(5B)-H(5B)	126.1(11)	H(17D)-C(17B)-H(17F)	108.1(19)
Fe(2)-C(5B)-H(5B)	127.6(11)	H(17E)-C(17B)-H(17F)	107.3(19)
C(10B)-C(6B)-C(7B)	107.85(17)	C(23B)-C(18B)-C(19B)	119.03(16)
C(10B)-C(6B)-Fe(2)	69.59(10)	C(23B)-C(18B)-N(2)	121.15(16)
C(7B)-C(6B)-Fe(2)	69.52(11)	C(19B)-C(18B)-N(2)	119.81(16)
C(10B)-C(6B)-H(6B)	127.3(12)	C(20B)-C(19B)-C(18B)	120.41(17)
C(7B)-C(6B)-H(6B)	124.8(12)	C(20B)-C(19B)-H(19B)	120.3(12)
Fe(2)-C(6B)-H(6B)	124.6(12)	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.2(12)
C(8B)-C(7B)-C(6B)	108.17(17)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	121.22(18)
C(8B)-C(7B)-Fe(2)	70.05(11)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	119.0(11)
C(6B)-C(7B)-Fe(2)	69.92(11)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	119.8(11)
C(8B)-C(7B)-H(7B)	127.4(12)	C(20B)-C(21B)-C(22B)	117.82(17)
C(6B)-C(7B)-H(7B)	124.4(12)	C(20B)-C(21B)-C(24B)	121.03(18)
Fe(2)-C(7B)-H(7B)	123.0(12)	C(22B)-C(21B)-C(24B)	121.14(18)
C(7B)-C(8B)-C(9B)	107.93(17)	C(23B)-C(22B)-C(21B)	121.37(17)
C(7B)-C(8B)-Fe(2)	69.35(11)	C(23B)-C(22B)-H(22B)	119.5(11)
C(9B)-C(8B)-Fe(2)	69.71(11)	C(21B)-C(22B)-H(22B)	119.1(11)
C(7B)-C(8B)-H(8B)	125.9(13)	C(18B)-C(23B)-C(22B)	120.14(17)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	126.2(13)	C(18B)-C(23B)-H(23B)	118.6(13)

C(22B)-C(23B)-H(23B)	121.2(13)	C(21B)-C(24B)-H(24F)	108.8(15)
C(21B)-C(24B)-H(24D)	111.7(13)	H(24D)-C(24B)-H(24F)	110.4(19)
C(21B)-C(24B)-H(24E)	109.8(15)	H(24E)-C(24B)-H(24F)	110(2)
H(24D)-C(24B)-H(24E)	106.3(19)		

Table 4 Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (1). The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Fe(1)	104(1)	102(1)	155(1)	14(1)	3(1)	-15(1)
N(1)	87(7)	102(7)	159(8)	-9(6)	6(6)	-6(6)
C(1A)	101(9)	82(8)	160(9)	1(7)	1(7)	-25(7)
C(2A)	163(10)	120(9)	135(10)	31(7)	-9(8)	-19(7)
C(3A)	135(10)	110(9)	218(11)	47(8)	-41(8)	0(7)
C(4A)	127(10)	110(9)	268(11)	-35(8)	31(8)	0(7)
C(5A)	154(10)	136(9)	155(10)	-33(7)	-2(8)	-17(7)
C(6A)	190(11)	90(9)	369(13)	32(8)	48(9)	-22(8)
C(7A)	314(12)	117(9)	249(12)	-28(8)	43(9)	-94(8)
C(8A)	180(10)	166(10)	291(12)	23(8)	-40(9)	-88(8)
C(9A)	148(10)	168(9)	259(11)	38(8)	52(8)	-69(8)
C(10A)	269(11)	186(10)	223(11)	101(8)	-35(9)	-83(9)
C(11A)	132(9)	134(9)	77(9)	5(7)	-20(7)	-21(7)
C(12A)	127(10)	151(9)	110(9)	-1(7)	15(7)	12(7)
C(13A)	190(10)	100(9)	125(9)	4(7)	2(8)	-13(7)
C(14A)	149(10)	176(9)	97(9)	4(7)	-24(7)	-48(8)
C(15A)	103(9)	199(10)	154(10)	2(8)	-1(8)	-9(8)
C(16A)	150(10)	122(9)	164(10)	-6(7)	-8(8)	14(7)
C(17A)	176(11)	198(10)	163(11)	30(8)	-4(8)	-54(8)
C(18A)	57(8)	106(8)	165(10)	-3(7)	12(7)	-10(7)
C(19A)	157(10)	152(9)	117(9)	38(7)	-1(7)	0(7)
C(20A)	171(10)	167(9)	121(10)	-34(8)	18(8)	-7(8)
C(21A)	80(9)	127(9)	167(10)	-5(7)	7(7)	2(7)
C(22A)	130(9)	141(9)	142(10)	29(7)	-23(8)	18(7)
C(23A)	125(9)	165(9)	103(9)	-29(7)	-11(7)	0(7)
C(24A)	180(11)	155(10)	198(11)	-20(8)	17(9)	20(8)
Fe(2)	120(1)	124(1)	108(1)	-15(1)	10(1)	5(1)
N(2)	105(8)	119(7)	190(8)	-12(6)	31(6)	26(6)
C(1B)	142(9)	167(9)	94(9)	-11(7)	5(7)	12(7)
C(2B)	169(10)	159(10)	124(10)	17(7)	16(8)	-3(7)
C(3B)	138(10)	240(10)	125(10)	11(8)	24(8)	-14(8)
C(4B)	144(10)	230(10)	107(10)	-42(8)	11(8)	61(8)
C(5B)	161(10)	150(9)	112(9)	-37(7)	-14(8)	19(8)
C(6B)	179(10)	243(10)	91(9)	-24(8)	15(7)	36(8)
C(7B)	253(11)	163(10)	129(10)	-51(8)	-25(8)	20(8)
C(8B)	162(10)	236(10)	147(10)	-26(8)	-18(8)	-36(8)
C(9B)	183(10)	182(10)	137(10)	-9(8)	-27(8)	44(8)
C(10B)	213(11)	175(9)	103(9)	21(7)	-13(8)	-16(8)
C(11B)	134(9)	132(9)	137(9)	-45(7)	46(7)	17(7)
C(12B)	111(9)	188(9)	137(9)	-16(7)	-7(8)	25(7)
C(13B)	174(10)	148(9)	145(10)	27(8)	18(8)	45(8)
C(14B)	135(9)	151(9)	143(9)	-35(7)	36(8)	20(7)
C(15B)	91(9)	199(9)	144(9)	-26(7)	-4(7)	42(7)
C(16B)	162(10)	139(9)	132(10)	9(7)	9(8)	44(7)
C(17B)	181(11)	203(10)	221(11)	6(9)	23(9)	1(8)
C(18B)	94(9)	123(9)	147(9)	-7(7)	-12(7)	6(7)
C(19B)	156(10)	170(9)	137(10)	26(8)	7(8)	13(8)

C(20B)	172(10)	183(10)	163(10)	-41(8)	13(8)	15(8)
C(21B)	90(9)	137(9)	257(11)	1(8)	-42(8)	-11(7)
C(22B)	116(9)	186(9)	195(10)	84(8)	-50(8)	-29(8)
C(23B)	110(9)	210(10)	129(10)	3(8)	9(7)	-10(7)
C(24B)	226(12)	146(10)	396(14)	-14(9)	-49(11)	4(9)

Table (S) Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (1).

	x	y	z	U_{iso}
H(2A)	6819(14)	-696(16)	2188(10)	24(6)
H(3A)	8400(15)	-1397(16)	1859(10)	26(6)
H(4A)	8403(15)	-1608(16)	595(10)	28(6)
H(5A)	6791(13)	-1047(14)	117(9)	13(5)
H(6A)	6712(14)	1966(15)	1038(10)	21(5)
H(7A)	7778(15)	1638(17)	2055(11)	35(6)
H(8A)	9303(15)	811(16)	1639(11)	30(6)
H(9A)	9068(14)	610(15)	336(10)	20(5)
H(10A)	7515(14)	1300(16)	-23(10)	24(6)
H(12A)	5733(14)	-2505(14)	1073(10)	19(5)
H(13A)	4664(13)	-3795(15)	1230(9)	12(5)
H(15A)	2687(14)	-1722(14)	1630(9)	16(5)
H(16A)	3715(12)	-399(14)	1447(8)	5(4)
H(17A)	3010(14)	-4085(16)	2015(11)	24(6)
H(17B)	2242(16)	-3553(17)	1580(11)	33(6)
H(17C)	2949(14)	-4352(17)	1247(11)	27(6)
H(19A)	5405(13)	614(15)	2241(10)	17(5)
H(20A)	5049(14)	2346(15)	2373(10)	20(5)
H(22A)	4568(14)	2633(14)	358(10)	18(5)
H(23A)	4971(12)	895(14)	218(9)	13(5)
H(24A)	4005(17)	4031(18)	1202(12)	44(7)
H(24B)	5037(17)	4228(19)	1332(12)	41(7)
H(24C)	4461(16)	3975(17)	1918(12)	36(7)
H(2B)	8015(12)	-1640(14)	6725(9)	9(5)
H(3B)	6462(14)	-816(15)	6999(9)	14(5)
H(4B)	6664(13)	1123(14)	7011(9)	13(5)
H(5B)	8347(12)	1527(14)	6752(9)	11(5)
H(6B)	8567(14)	-344(15)	4952(10)	21(5)
H(7B)	7293(13)	-1613(16)	5162(10)	21(5)
H(8B)	5806(14)	-617(15)	5382(10)	20(5)
H(9B)	6199(14)	1287(16)	5333(10)	20(5)
H(10B)	7877(13)	1480(15)	5064(9)	18(5)
H(12B)	9264(14)	1423(15)	5809(10)	25(6)
H(13B)	10334(13)	2748(14)	5639(9)	12(5)
H(15B)	12279(13)	1282(14)	6801(9)	16(5)
H(16B)	11209(13)	-16(14)	6992(9)	15(5)
H(17D)	12701(17)	2810(18)	5986(11)	40(7)
H(17E)	11875(16)	3555(18)	5773(12)	39(7)
H(17F)	12169(16)	3454(18)	6520(12)	41(7)
H(19B)	10255(13)	-1140(15)	5562(10)	18(5)
H(20B)	10853(13)	-2807(15)	5438(10)	18(5)
H(22B)	10259(12)	-3404(15)	7410(9)	14(5)
H(23B)	9630(14)	-1742(15)	7485(10)	22(6)
H(24D)	11552(17)	-4392(17)	6048(11)	38(7)
H(24E)	10532(18)	-4780(19)	6124(12)	45(7)
H(24F)	11124(17)	-4645(19)	6787(13)	46(7)