

Table 1. Crystal data and structure refinement for mm10-2.

Identification code mm10-2

Empirical formula C21 H22 Fe O

Formula weight 346.24

Temperature 123(2) K

Wavelength 0.71073 Å

Crystal system Monoclinic

Space group P 1 21/n 1

Unit cell dimensions a = 10.9164(6) Å = 90°.

b = 25.1685(13) Å = 91.060(5)°.

c = 18.3340(11) Å  = 90°.

Volume 5036.4(5) Å3

Z 12

Density (calculated) 1.370 Mg/m3

Absorption coefficient 0.900 mm-1

F(000) 2184

Crystal size 0.3 x 0.05 x 0.05 mm3

Theta range for data collection 2.99 to 27.00°.

Index ranges -13<=h<=13, -32<=k<=32, -23<=l<=23

Reflections collected 45919

Independent reflections 10967 [R(int) = 0.1130]

Completeness to theta = 27.00° 99.9 %

Absorption correction Semi-empirical from equivalents

Max. and min. transmission 1.00000 and 0.83390

Refinement method Full-matrix least-squares on F2

Data / restraints / parameters 10967 / 0 / 631

Goodness-of-fit on F2 0.990

Final R indices [I>2sigma(I)] R1 = 0.0580, wR2 = 0.1008

R indices (all data) R1 = 0.1196, wR2 = 0.1252

Largest diff. peak and hole 0.502 and -0.618 e.Å-3

Table 2. Atomic coordinates ( x 104) and equivalent isotropic displacement parameters (Å2x 103)

for mm10-2. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

x y z U(eq)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Fe(1A) 3352(1) 1922(1) 6276(1) 19(1)

Fe(1B) 3199(1) 2052(1) 2919(1) 21(1)

O(1A) 1700(2) 1204(1) 7654(2) 31(1)

O(1B) 1035(2) 1511(1) 4413(2) 31(1)

C(1A) -719(3) 1372(1) 6341(2) 23(1)

C(1B) 146(3) 1230(1) 2552(2) 20(1)

C(2A) -1636(3) 1087(1) 5978(2) 23(1)

C(2B) -723(3) 937(1) 2159(2) 18(1)

C(3A) -1614(3) 534(1) 5951(2) 20(1)

C(3B) -1752(3) 720(1) 2491(2) 19(1)

C(4A) -670(3) 278(1) 6331(2) 26(1)

C(4B) -1847(3) 795(1) 3239(2) 22(1)

C(5A) 233(3) 556(1) 6706(2) 24(1)

C(5B) -977(3) 1075(1) 3640(2) 23(1)

C(6A) 241(3) 1114(1) 6699(2) 20(1)

C(6B) 26(3) 1309(1) 3299(2) 19(1)

C(7A) -2548(3) 207(1) 5504(2) 26(1)

C(7B) -2752(3) 438(1) 2032(2) 23(1)

C(8A) -3224(4) -172(2) 6020(3) 46(1)

C(8B) -3625(3) 114(1) 2505(2) 34(1)

C(9A) -1853(3) -121(1) 4940(2) 36(1)

C(9B) -2184(3) 55(1) 1475(2) 30(1)

C(10A) -3487(3) 557(1) 5106(2) 31(1)

C(10B) -3499(3) 867(1) 1627(2) 28(1)

C(11A) 1253(3) 1398(1) 7097(2) 21(1)

C(11B) 906(3) 1623(1) 3764(2) 23(1)

C(12A) 1728(3) 1905(1) 6805(2) 19(1)

C(12B) 1590(3) 2081(1) 3465(2) 21(1)

C(13A) 1576(3) 2132(1) 6092(2) 22(1)

C(13B) 2542(3) 2344(1) 3870(2) 26(1)

C(14A) 2610(3) 2229(1) 7194(2) 24(1)

C(14B) 1468(3) 2352(1) 2777(2) 22(1)

C(15A) 2962(3) 2649(1) 6737(2) 28(1)

C(15B) 2991(3) 2769(1) 3452(2) 27(1)

C(16A) 2331(3) 2590(1) 6054(2) 27(1)

C(16B) 2338(3) 2778(1) 2776(2) 27(1)

C(17A) 5208(3) 1860(1) 6154(2) 26(1)

C(17B) 5041(3) 1917(2) 2805(2) 31(1)

C(18A) 4777(3) 1435(1) 6581(2) 31(1)

C(18B) 4465(3) 1977(1) 2108(2) 26(1)

C(19A) 3896(3) 1149(1) 6159(2) 27(1)

C(19B) 4487(3) 1484(1) 3166(2) 32(1)

C(20A) 3784(3) 1396(1) 5468(2) 24(1)

C(20B) 3567(3) 1270(1) 2689(2) 27(1)

C(21A) 4607(3) 1837(1) 5465(2) 27(1)

C(21B) 3544(3) 1574(1) 2044(2) 23(1)

Fe(1) 3444(1) 1973(1) 9561(1) 19(1)

O(1) 891(2) 1765(1) 10990(2) 30(1)

C(1) 381(3) 1200(1) 9211(2) 20(1)

C(2) -449(3) 868(1) 8843(2) 22(1)

C(3) -1597(3) 750(1) 9137(2) 19(1)

C(4) -1888(3) 979(1) 9799(2) 22(1)

C(5) -1058(3) 1310(1) 10172(2) 20(1)

C(6) 82(3) 1423(1) 9873(2) 19(1)

C(7) -2476(3) 375(1) 8719(2) 26(1)

C(8) -2889(3) 645(2) 8004(2) 40(1)

C(9) -1810(3) -147(1) 8547(3) 49(2)

C(10) -3617(3) 243(1) 9168(2) 34(1)

C(11) 923(3) 1772(1) 10321(2) 19(1)

C(12) 1756(3) 2149(1) 9957(2) 19(1)

C(13) 2696(3) 2449(1) 10340(2) 24(1)

C(14) 1824(3) 2291(1) 9207(2) 22(1)

C(15) 3313(3) 2767(1) 9829(2) 24(1)

C(16) 2780(3) 2672(1) 9127(2) 24(1)

C(17) 4771(3) 1691(1) 8873(2) 26(1)

C(18) 5270(3) 1793(2) 9579(2) 29(1)

C(20) 3821(3) 1307(1) 8953(2) 26(1)

C(21) 3751(3) 1176(1) 9701(2) 29(1)

C(22) 4652(3) 1478(1) 10089(2) 31(1)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for mm10-2.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Fe(1A)-C(13A) 2.031(3)

Fe(1A)-C(14A) 2.034(4)

Fe(1A)-C(12A) 2.036(3)

Fe(1A)-C(19A) 2.045(3)

Fe(1A)-C(20A) 2.047(4)

Fe(1A)-C(17A) 2.049(3)

Fe(1A)-C(18A) 2.050(3)

Fe(1A)-C(21A) 2.053(4)

Fe(1A)-C(16A) 2.055(3)

Fe(1A)-C(15A) 2.065(4)

Fe(1B)-C(13B) 2.035(4)

Fe(1B)-C(12B) 2.039(3)

Fe(1B)-C(21B) 2.046(4)

Fe(1B)-C(14B) 2.047(3)

Fe(1B)-C(19B) 2.050(3)

Fe(1B)-C(17B) 2.054(3)

Fe(1B)-C(20B) 2.055(3)

Fe(1B)-C(18B) 2.057(4)

Fe(1B)-C(15B) 2.066(3)

Fe(1B)-C(16B) 2.068(3)

O(1A)-C(11A) 1.224(4)

O(1B)-C(11B) 1.229(5)

C(1A)-C(6A) 1.388(5)

C(1A)-C(2A) 1.390(5)

C(1A)-H(1A) 0.9500

C(1B)-C(2B) 1.391(4)

C(1B)-C(6B) 1.392(5)

C(1B)-H(1B) 0.9500

C(2A)-C(3A) 1.394(4)

C(2A)-H(2A) 0.9500

C(2B)-C(3B) 1.398(4)

C(2B)-H(2B) 0.9500

C(3A)-C(4A) 1.390(5)

C(3A)-C(7A) 1.535(5)

C(3B)-C(4B) 1.392(5)

C(3B)-C(7B) 1.540(5)

C(4A)-C(5A) 1.380(5)

C(4A)-H(4A) 0.9500

C(4B)-C(5B) 1.383(5)

C(4B)-H(4B) 0.9500

C(5A)-C(6A) 1.404(4)

C(5A)-H(5A) 0.9500

C(5B)-C(6B) 1.400(5)

C(5B)-H(5B) 0.9500

C(6A)-C(11A) 1.495(5)

C(6B)-C(11B) 1.498(5)

C(7A)-C(10A) 1.527(5)

C(7A)-C(9A) 1.535(5)

C(7A)-C(8A) 1.543(5)

C(7B)-C(8B) 1.535(5)

C(7B)-C(10B) 1.537(4)

C(7B)-C(9B) 1.542(5)

C(8A)-H(8A1) 0.9800

C(8A)-H(8A2) 0.9800

C(8A)-H(8A3) 0.9800

C(8B)-H(8B1) 0.9800

C(8B)-H(8B2) 0.9800

C(8B)-H(8B3) 0.9800

C(9A)-H(9A1) 0.9800

C(9A)-H(9A2) 0.9800

C(9A)-H(9A3) 0.9800

C(9B)-H(9B1) 0.9800

C(9B)-H(9B2) 0.9800

C(9B)-H(9B3) 0.9800

C(10A)-H(10A) 0.9800

C(10A)-H(10B) 0.9800

C(10A)-H(10C) 0.9800

C(10B)-H(10D) 0.9800

C(10B)-H(10E) 0.9800

C(10B)-H(10F) 0.9800

C(11A)-C(12A) 1.480(5)

C(11B)-C(12B) 1.482(5)

C(12A)-C(13A) 1.433(5)

C(12A)-C(14A) 1.441(4)

C(12B)-C(13B) 1.430(5)

C(12B)-C(14B) 1.439(5)

C(13A)-C(16A) 1.420(4)

C(13A)-H(13A) 0.9500

C(13B)-C(15B) 1.408(5)

C(13B)-H(13B) 0.9500

C(14A)-C(15A) 1.408(5)

C(14A)-H(14A) 0.9500

C(14B)-C(16B) 1.432(4)

C(14B)-H(14B) 0.9500

C(15A)-C(16A) 1.425(5)

C(15A)-H(15A) 0.9500

C(15B)-C(16B) 1.419(5)

C(15B)-H(15B) 0.9500

C(16A)-H(16A) 0.9500

C(16B)-H(16B) 0.9500

C(17A)-C(18A) 1.412(5)

C(17A)-C(21A) 1.414(5)

C(17A)-H(17A) 0.9500

C(17B)-C(19B) 1.415(5)

C(17B)-C(18B) 1.422(6)

C(17B)-H(17B) 0.9500

C(18A)-C(19A) 1.418(5)

C(18A)-H(18A) 0.9500

C(18B)-C(21B) 1.431(4)

C(18B)-H(18B) 0.9500

C(19A)-C(20A) 1.414(5)

C(19A)-H(19A) 0.9500

C(19B)-C(20B) 1.426(5)

C(19B)-H(19B) 0.9500

C(20A)-C(21A) 1.427(4)

C(20A)-H(20A) 0.9500

C(20B)-C(21B) 1.408(5)

C(20B)-H(20B) 0.9500

C(21A)-H(21A) 0.9500

C(21B)-H(21B) 0.9500

Fe(1)-C(14) 2.036(3)

Fe(1)-C(12) 2.042(3)

Fe(1)-C(18) 2.044(3)

Fe(1)-C(22) 2.046(4)

Fe(1)-C(13) 2.046(4)

Fe(1)-C(21) 2.050(3)

Fe(1)-C(20) 2.058(4)

Fe(1)-C(16) 2.059(3)

Fe(1)-C(17) 2.063(4)

Fe(1)-C(15) 2.064(3)

O(1)-C(11) 1.226(4)

C(1)-C(6) 1.381(5)

C(1)-C(2) 1.398(5)

C(1)-H(1) 0.9500

C(2)-C(3) 1.406(4)

C(2)-H(2) 0.9500

C(3)-C(4) 1.387(5)

C(3)-C(7) 1.540(5)

C(4)-C(5) 1.399(4)

C(4)-H(4) 0.9500

C(5)-C(6) 1.398(4)

C(5)-H(5) 0.9500

C(6)-C(11) 1.504(5)

C(7)-C(9) 1.536(5)

C(7)-C(8) 1.536(5)

C(7)-C(10) 1.542(5)

C(8)-H(8A) 0.9800

C(8)-H(8B) 0.9800

C(8)-H(8C) 0.9800

C(9)-H(9A) 0.9800

C(9)-H(9B) 0.9800

C(9)-H(9C) 0.9800

C(10)-H(10G) 0.9800

C(10)-H(10H) 0.9800

C(10)-H(10I) 0.9800

C(11)-C(12) 1.482(5)

C(12)-C(14) 1.424(5)

C(12)-C(13) 1.445(4)

C(13)-C(15) 1.413(5)

C(13)-H(13) 0.9500

C(14)-C(16) 1.427(4)

C(14)-H(14) 0.9500

C(15)-C(16) 1.423(5)

C(15)-H(15) 0.9500

C(16)-H(16) 0.9500

C(17)-C(18) 1.417(5)

C(17)-C(20) 1.427(5)

C(17)-H(17) 0.9500

C(18)-C(22) 1.408(5)

C(18)-H(18) 0.9500

C(20)-C(21) 1.415(6)

C(20)-H(20) 0.9500

C(21)-C(22) 1.423(5)

C(21)-H(21) 0.9500

C(22)-H(22) 0.9500

C(13A)-Fe(1A)-C(14A) 69.20(15)

C(13A)-Fe(1A)-C(12A) 41.27(14)

C(14A)-Fe(1A)-C(12A) 41.47(13)

C(13A)-Fe(1A)-C(19A) 120.60(14)

C(14A)-Fe(1A)-C(19A) 124.72(16)

C(12A)-Fe(1A)-C(19A) 106.71(14)

C(13A)-Fe(1A)-C(20A) 106.28(15)

C(14A)-Fe(1A)-C(20A) 160.92(14)

C(12A)-Fe(1A)-C(20A) 123.05(14)

C(19A)-Fe(1A)-C(20A) 40.44(15)

C(13A)-Fe(1A)-C(17A) 160.74(16)

C(14A)-Fe(1A)-C(17A) 121.95(15)

C(12A)-Fe(1A)-C(17A) 157.22(16)

C(19A)-Fe(1A)-C(17A) 68.07(14)

C(20A)-Fe(1A)-C(17A) 68.29(14)

C(13A)-Fe(1A)-C(18A) 156.69(14)

C(14A)-Fe(1A)-C(18A) 108.31(16)

C(12A)-Fe(1A)-C(18A) 121.41(16)

C(19A)-Fe(1A)-C(18A) 40.52(14)

C(20A)-Fe(1A)-C(18A) 68.10(15)

C(17A)-Fe(1A)-C(18A) 40.29(14)

C(13A)-Fe(1A)-C(21A) 123.66(16)

C(14A)-Fe(1A)-C(21A) 157.03(14)

C(12A)-Fe(1A)-C(21A) 160.32(15)

C(19A)-Fe(1A)-C(21A) 68.03(15)

C(20A)-Fe(1A)-C(21A) 40.74(13)

C(17A)-Fe(1A)-C(21A) 40.34(15)

C(18A)-Fe(1A)-C(21A) 67.77(16)

C(13A)-Fe(1A)-C(16A) 40.66(12)

C(14A)-Fe(1A)-C(16A) 68.25(16)

C(12A)-Fe(1A)-C(16A) 68.78(14)

C(19A)-Fe(1A)-C(16A) 156.26(15)

C(20A)-Fe(1A)-C(16A) 121.14(16)

C(17A)-Fe(1A)-C(16A) 125.01(15)

C(18A)-Fe(1A)-C(16A) 161.69(14)

C(21A)-Fe(1A)-C(16A) 107.94(16)

C(13A)-Fe(1A)-C(15A) 68.49(14)

C(14A)-Fe(1A)-C(15A) 40.18(14)

C(12A)-Fe(1A)-C(15A) 68.67(14)

C(19A)-Fe(1A)-C(15A) 161.56(17)

C(20A)-Fe(1A)-C(15A) 157.05(16)

C(17A)-Fe(1A)-C(15A) 108.87(14)

C(18A)-Fe(1A)-C(15A) 125.44(15)

C(21A)-Fe(1A)-C(15A) 122.26(15)

C(16A)-Fe(1A)-C(15A) 40.47(15)

C(13B)-Fe(1B)-C(12B) 41.08(13)

C(13B)-Fe(1B)-C(21B) 163.14(14)

C(12B)-Fe(1B)-C(21B) 125.33(14)

C(13B)-Fe(1B)-C(14B) 68.70(15)

C(12B)-Fe(1B)-C(14B) 41.23(14)

C(21B)-Fe(1B)-C(14B) 107.50(15)

C(13B)-Fe(1B)-C(19B) 108.27(16)

C(12B)-Fe(1B)-C(19B) 120.62(16)

C(21B)-Fe(1B)-C(19B) 68.09(16)

C(14B)-Fe(1B)-C(19B) 155.93(14)

C(13B)-Fe(1B)-C(17B) 120.55(15)

C(12B)-Fe(1B)-C(17B) 155.42(17)

C(21B)-Fe(1B)-C(17B) 68.12(15)

C(14B)-Fe(1B)-C(17B) 162.11(16)

C(19B)-Fe(1B)-C(17B) 40.32(14)

C(13B)-Fe(1B)-C(20B) 126.50(16)

C(12B)-Fe(1B)-C(20B) 107.90(14)

C(21B)-Fe(1B)-C(20B) 40.15(15)

C(14B)-Fe(1B)-C(20B) 120.71(14)

C(19B)-Fe(1B)-C(20B) 40.64(14)

C(17B)-Fe(1B)-C(20B) 67.93(14)

C(13B)-Fe(1B)-C(18B) 154.78(14)

C(12B)-Fe(1B)-C(18B) 162.63(15)

C(21B)-Fe(1B)-C(18B) 40.82(13)

C(14B)-Fe(1B)-C(18B) 124.99(16)

C(19B)-Fe(1B)-C(18B) 68.15(16)

C(17B)-Fe(1B)-C(18B) 40.46(15)

C(20B)-Fe(1B)-C(18B) 68.09(15)

C(13B)-Fe(1B)-C(15B) 40.14(14)

C(12B)-Fe(1B)-C(15B) 68.52(14)

C(21B)-Fe(1B)-C(15B) 155.30(16)

C(14B)-Fe(1B)-C(15B) 68.24(13)

C(19B)-Fe(1B)-C(15B) 125.79(16)

C(17B)-Fe(1B)-C(15B) 108.04(14)

C(20B)-Fe(1B)-C(15B) 163.13(17)

C(18B)-Fe(1B)-C(15B) 120.28(15)

C(13B)-Fe(1B)-C(16B) 67.84(16)

C(12B)-Fe(1B)-C(16B) 68.76(14)

C(21B)-Fe(1B)-C(16B) 120.73(16)

C(14B)-Fe(1B)-C(16B) 40.73(12)

C(19B)-Fe(1B)-C(16B) 162.15(15)

C(17B)-Fe(1B)-C(16B) 125.28(15)

C(20B)-Fe(1B)-C(16B) 155.57(16)

C(18B)-Fe(1B)-C(16B) 107.49(15)

C(15B)-Fe(1B)-C(16B) 40.14(15)

C(6A)-C(1A)-C(2A) 121.1(3)

C(2B)-C(1B)-C(6B) 120.6(3)

C(1A)-C(2A)-C(3A) 121.3(3)

C(1B)-C(2B)-C(3B) 121.8(4)

C(4A)-C(3A)-C(2A) 117.2(3)

C(4A)-C(3A)-C(7A) 120.0(3)

C(2A)-C(3A)-C(7A) 122.8(3)

C(4B)-C(3B)-C(2B) 116.9(3)

C(4B)-C(3B)-C(7B) 122.4(3)

C(2B)-C(3B)-C(7B) 120.6(4)

C(5A)-C(4A)-C(3A) 122.1(3)

C(5B)-C(4B)-C(3B) 121.9(3)

C(4A)-C(5A)-C(6A) 120.4(3)

C(4B)-C(5B)-C(6B) 120.8(4)

C(1A)-C(6A)-C(5A) 117.8(3)

C(1A)-C(6A)-C(11A) 123.5(3)

C(5A)-C(6A)-C(11A) 118.6(3)

C(1B)-C(6B)-C(5B) 117.9(3)

C(1B)-C(6B)-C(11B) 124.3(3)

C(5B)-C(6B)-C(11B) 117.8(4)

C(10A)-C(7A)-C(9A) 109.0(3)

C(10A)-C(7A)-C(3A) 112.4(3)

C(9A)-C(7A)-C(3A) 108.4(3)

C(10A)-C(7A)-C(8A) 109.0(3)

C(9A)-C(7A)-C(8A) 109.1(3)

C(3A)-C(7A)-C(8A) 108.9(3)

C(8B)-C(7B)-C(10B) 108.5(3)

C(8B)-C(7B)-C(3B) 112.2(3)

C(10B)-C(7B)-C(3B) 107.7(3)

C(8B)-C(7B)-C(9B) 107.7(3)

C(10B)-C(7B)-C(9B) 109.6(3)

C(3B)-C(7B)-C(9B) 111.2(3)

O(1A)-C(11A)-C(12A) 120.5(3)

O(1A)-C(11A)-C(6A) 119.7(3)

C(12A)-C(11A)-C(6A) 119.7(3)

O(1B)-C(11B)-C(12B) 119.1(3)

O(1B)-C(11B)-C(6B) 119.4(3)

C(12B)-C(11B)-C(6B) 121.4(4)

C(13A)-C(12A)-C(14A) 106.8(3)

C(13A)-C(12A)-C(11A) 129.7(3)

C(14A)-C(12A)-C(11A) 123.0(3)

C(13A)-C(12A)-Fe(1A) 69.2(2)

C(14A)-C(12A)-Fe(1A) 69.17(19)

C(11A)-C(12A)-Fe(1A) 120.3(2)

C(13B)-C(12B)-C(14B) 106.8(3)

C(13B)-C(12B)-C(11B) 122.3(4)

C(14B)-C(12B)-C(11B) 130.8(3)

C(13B)-C(12B)-Fe(1B) 69.3(2)

C(14B)-C(12B)-Fe(1B) 69.7(2)

C(11B)-C(12B)-Fe(1B) 126.8(2)

C(16A)-C(13A)-C(12A) 108.2(3)

C(16A)-C(13A)-Fe(1A) 70.55(19)

C(12A)-C(13A)-Fe(1A) 69.55(19)

C(15B)-C(13B)-C(12B) 109.1(4)

C(15B)-C(13B)-Fe(1B) 71.1(2)

C(12B)-C(13B)-Fe(1B) 69.6(2)

C(15A)-C(14A)-C(12A) 108.6(3)

C(15A)-C(14A)-Fe(1A) 71.1(2)

C(12A)-C(14A)-Fe(1A) 69.4(2)

C(16B)-C(14B)-C(12B) 107.8(3)

C(16B)-C(14B)-Fe(1B) 70.43(18)

C(12B)-C(14B)-Fe(1B) 69.09(18)

C(14A)-C(15A)-C(16A) 108.1(3)

C(14A)-C(15A)-Fe(1A) 68.7(2)

C(16A)-C(15A)-Fe(1A) 69.4(2)

C(13B)-C(15B)-C(16B) 108.2(3)

C(13B)-C(15B)-Fe(1B) 68.7(2)

C(16B)-C(15B)-Fe(1B) 70.0(2)

C(13A)-C(16A)-C(15A) 108.3(4)

C(13A)-C(16A)-Fe(1A) 68.79(19)

C(15A)-C(16A)-Fe(1A) 70.1(2)

C(15B)-C(16B)-C(14B) 108.1(4)

C(15B)-C(16B)-Fe(1B) 69.9(2)

C(14B)-C(16B)-Fe(1B) 68.85(19)

C(18A)-C(17A)-C(21A) 108.1(3)

C(18A)-C(17A)-Fe(1A) 69.90(19)

C(21A)-C(17A)-Fe(1A) 70.0(2)

C(19B)-C(17B)-C(18B) 108.5(3)

C(19B)-C(17B)-Fe(1B) 69.7(2)

C(18B)-C(17B)-Fe(1B) 69.9(2)

C(17A)-C(18A)-C(19A) 108.2(4)

C(17A)-C(18A)-Fe(1A) 69.8(2)

C(19A)-C(18A)-Fe(1A) 69.55(19)

C(17B)-C(18B)-C(21B) 107.2(3)

C(17B)-C(18B)-Fe(1B) 69.7(2)

C(21B)-C(18B)-Fe(1B) 69.2(2)

C(20A)-C(19A)-C(18A) 108.2(3)

C(20A)-C(19A)-Fe(1A) 69.85(19)

C(18A)-C(19A)-Fe(1A) 69.93(19)

C(17B)-C(19B)-C(20B) 107.9(4)

C(17B)-C(19B)-Fe(1B) 70.0(2)

C(20B)-C(19B)-Fe(1B) 69.9(2)

C(19A)-C(20A)-C(21A) 107.6(3)

C(19A)-C(20A)-Fe(1A) 69.7(2)

C(21A)-C(20A)-Fe(1A) 69.8(2)

C(21B)-C(20B)-C(19B) 108.1(3)

C(21B)-C(20B)-Fe(1B) 69.59(19)

C(19B)-C(20B)-Fe(1B) 69.5(2)

C(17A)-C(21A)-C(20A) 108.0(4)

C(17A)-C(21A)-Fe(1A) 69.7(2)

C(20A)-C(21A)-Fe(1A) 69.4(2)

C(20B)-C(21B)-C(18B) 108.4(3)

C(20B)-C(21B)-Fe(1B) 70.3(2)

C(18B)-C(21B)-Fe(1B) 70.0(2)

C(14)-Fe(1)-C(12) 40.88(14)

C(14)-Fe(1)-C(18) 158.93(17)

C(12)-Fe(1)-C(18) 158.24(17)

C(14)-Fe(1)-C(22) 159.91(15)

C(12)-Fe(1)-C(22) 122.85(16)

C(18)-Fe(1)-C(22) 40.28(15)

C(14)-Fe(1)-C(13) 68.71(15)

C(12)-Fe(1)-C(13) 41.41(13)

C(18)-Fe(1)-C(13) 121.35(15)

C(22)-Fe(1)-C(13) 106.78(16)

C(14)-Fe(1)-C(21) 124.35(14)

C(12)-Fe(1)-C(21) 108.36(14)

C(18)-Fe(1)-C(21) 67.88(15)

C(22)-Fe(1)-C(21) 40.66(14)

C(13)-Fe(1)-C(21) 123.53(16)

C(14)-Fe(1)-C(20) 109.18(15)

C(12)-Fe(1)-C(20) 124.09(14)

C(18)-Fe(1)-C(20) 67.88(14)

C(22)-Fe(1)-C(20) 68.09(16)

C(13)-Fe(1)-C(20) 160.29(15)

C(21)-Fe(1)-C(20) 40.30(15)

C(14)-Fe(1)-C(16) 40.80(12)

C(12)-Fe(1)-C(16) 68.79(14)

C(18)-Fe(1)-C(16) 122.14(15)

C(22)-Fe(1)-C(16) 157.45(14)

C(13)-Fe(1)-C(16) 68.08(15)

C(21)-Fe(1)-C(16) 160.30(16)

C(20)-Fe(1)-C(16) 124.00(16)

C(14)-Fe(1)-C(17) 123.76(16)

C(12)-Fe(1)-C(17) 160.11(15)

C(18)-Fe(1)-C(17) 40.36(15)

C(22)-Fe(1)-C(17) 68.02(16)

C(13)-Fe(1)-C(17) 157.14(14)

C(21)-Fe(1)-C(17) 67.97(15)

C(20)-Fe(1)-C(17) 40.50(13)

C(16)-Fe(1)-C(17) 107.69(16)

C(14)-Fe(1)-C(15) 68.39(13)

C(12)-Fe(1)-C(15) 68.78(13)

C(18)-Fe(1)-C(15) 106.41(14)

C(22)-Fe(1)-C(15) 121.61(15)

C(13)-Fe(1)-C(15) 40.20(14)

C(21)-Fe(1)-C(15) 158.43(17)

C(20)-Fe(1)-C(15) 158.86(17)

C(16)-Fe(1)-C(15) 40.39(14)

C(17)-Fe(1)-C(15) 122.05(15)

C(6)-C(1)-C(2) 120.3(3)

C(1)-C(2)-C(3) 121.1(4)

C(4)-C(3)-C(2) 117.9(3)

C(4)-C(3)-C(7) 122.7(3)

C(2)-C(3)-C(7) 119.4(3)

C(3)-C(4)-C(5) 121.3(3)

C(6)-C(5)-C(4) 120.2(4)

C(1)-C(6)-C(5) 119.2(3)

C(1)-C(6)-C(11) 124.4(3)

C(5)-C(6)-C(11) 116.3(3)

C(9)-C(7)-C(8) 109.7(4)

C(9)-C(7)-C(3) 109.4(3)

C(8)-C(7)-C(3) 108.8(3)

C(9)-C(7)-C(10) 108.4(3)

C(8)-C(7)-C(10) 108.9(3)

C(3)-C(7)-C(10) 111.6(3)

O(1)-C(11)-C(12) 119.3(3)

O(1)-C(11)-C(6) 120.6(3)

C(12)-C(11)-C(6) 120.0(3)

C(14)-C(12)-C(13) 106.8(3)

C(14)-C(12)-C(11) 129.8(3)

C(13)-C(12)-C(11) 123.4(4)

C(14)-C(12)-Fe(1) 69.3(2)

C(13)-C(12)-Fe(1) 69.44(19)

C(11)-C(12)-Fe(1) 125.9(2)

C(15)-C(13)-C(12) 108.5(4)

C(15)-C(13)-Fe(1) 70.6(2)

C(12)-C(13)-Fe(1) 69.1(2)

C(12)-C(14)-C(16) 108.6(3)

C(12)-C(14)-Fe(1) 69.78(19)

C(16)-C(14)-Fe(1) 70.45(19)

C(13)-C(15)-C(16) 108.2(3)

C(13)-C(15)-Fe(1) 69.20(19)

C(16)-C(15)-Fe(1) 69.59(19)

C(15)-C(16)-C(14) 107.9(4)

C(15)-C(16)-Fe(1) 70.0(2)

C(14)-C(16)-Fe(1) 68.75(19)

C(18)-C(17)-C(20) 107.3(4)

C(18)-C(17)-Fe(1) 69.1(2)

C(20)-C(17)-Fe(1) 69.5(2)

C(22)-C(18)-C(17) 108.9(3)

C(22)-C(18)-Fe(1) 69.9(2)

C(17)-C(18)-Fe(1) 70.6(2)

C(21)-C(20)-C(17) 108.0(3)

C(21)-C(20)-Fe(1) 69.5(2)

C(17)-C(20)-Fe(1) 70.0(2)

C(20)-C(21)-C(22) 108.1(3)

C(20)-C(21)-Fe(1) 70.2(2)

C(22)-C(21)-Fe(1) 69.5(2)

C(18)-C(22)-C(21) 107.7(4)

C(18)-C(22)-Fe(1) 69.8(2)

C(21)-C(22)-Fe(1) 69.8(2)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters (Å2x 103)for mm10-2. The anisotropic

displacement factor exponent takes the form: -22[ h2a\*2U11 + ... + 2 h k a\* b\* U12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

U11 U22 U33 U23 U13 U12

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Fe(1A) 18(1) 20(1) 21(1) -1(1) -3(1) -2(1)

Fe(1B) 18(1) 20(1) 24(1) -3(1) -2(1) -1(1)

O(1A) 27(2) 38(2) 26(2) 9(1) -6(1) -6(1)

O(1B) 31(2) 40(2) 23(2) 0(1) -6(1) -7(1)

C(1A) 23(2) 17(2) 28(3) 3(2) 2(2) -1(2)

C(1B) 16(2) 20(2) 22(2) 2(2) -1(2) 0(1)

C(2A) 19(2) 22(2) 27(3) 5(2) -2(2) 6(2)

C(2B) 19(2) 20(2) 15(2) 0(2) 1(2) 3(2)

C(3A) 17(2) 23(2) 21(2) -1(2) 1(2) -4(2)

C(3B) 17(2) 14(2) 25(2) 1(2) 0(2) 2(1)

C(4A) 25(2) 15(2) 38(3) 1(2) -2(2) -2(2)

C(4B) 18(2) 21(2) 28(3) -2(2) 5(2) -2(2)

C(5A) 23(2) 24(2) 24(2) 3(2) -5(2) 4(2)

C(5B) 27(2) 20(2) 22(2) 2(2) 2(2) 4(2)

C(6A) 20(2) 21(2) 19(2) -2(2) 2(2) 1(2)

C(6B) 18(2) 12(2) 27(3) 2(2) -6(2) 2(1)

C(7A) 23(2) 25(2) 30(3) 3(2) -1(2) -7(2)

C(7B) 20(2) 18(2) 30(3) 3(2) -4(2) -3(2)

C(8A) 45(3) 51(3) 41(3) 7(3) -5(2) -29(2)

C(8B) 27(2) 37(2) 39(3) 8(2) -9(2) -9(2)

C(9A) 40(2) 25(2) 44(3) -7(2) -10(2) -1(2)

C(9B) 31(2) 19(2) 40(3) 1(2) -10(2) -2(2)

C(10A) 22(2) 39(2) 32(3) -7(2) -7(2) -5(2)

C(10B) 23(2) 26(2) 34(3) 2(2) 0(2) 2(2)

C(11A) 17(2) 27(2) 20(2) -4(2) 3(2) 2(2)

C(11B) 20(2) 23(2) 25(3) -2(2) -2(2) 7(2)

C(12A) 15(2) 21(2) 20(2) -8(2) 1(2) 1(2)

C(12B) 16(2) 22(2) 25(2) -5(2) 0(2) 7(2)

C(13A) 18(2) 17(2) 30(3) 0(2) -2(2) 1(2)

C(13B) 20(2) 31(2) 27(3) -6(2) -3(2) 2(2)

C(14A) 19(2) 28(2) 26(3) -7(2) -3(2) 2(2)

C(14B) 17(2) 20(2) 27(3) 1(2) -3(2) 1(2)

C(15A) 24(2) 19(2) 41(3) -5(2) -4(2) -4(2)

C(15B) 19(2) 24(2) 39(3) -13(2) -1(2) -2(2)

C(16A) 23(2) 22(2) 37(3) 1(2) -3(2) 2(2)

C(16B) 20(2) 21(2) 39(3) -2(2) 4(2) 2(2)

C(17A) 13(2) 32(2) 32(3) -4(2) -2(2) -3(2)

C(17B) 18(2) 33(2) 44(3) -16(2) 0(2) 1(2)

C(18A) 26(2) 36(2) 30(3) 1(2) -4(2) 14(2)

C(18B) 25(2) 22(2) 31(3) 0(2) 8(2) 2(2)

C(19A) 28(2) 17(2) 36(3) 0(2) 3(2) 3(2)

C(19B) 28(2) 36(2) 32(3) -1(2) -1(2) 14(2)

C(20A) 22(2) 22(2) 27(3) -8(2) -1(2) 2(2)

C(20B) 27(2) 18(2) 35(3) -2(2) 7(2) 1(2)

C(21A) 26(2) 28(2) 27(3) 0(2) 4(2) -4(2)

C(21B) 19(2) 25(2) 25(3) -7(2) -1(2) 1(2)

Fe(1) 17(1) 19(1) 20(1) 0(1) -3(1) 0(1)

O(1) 29(1) 38(2) 21(2) 0(1) -1(1) -9(1)

C(1) 17(2) 18(2) 27(2) 1(2) 0(2) -1(2)

C(2) 19(2) 22(2) 26(3) -4(2) 4(2) 7(2)

C(3) 19(2) 15(2) 23(2) -3(2) -1(2) 4(1)

C(4) 18(2) 19(2) 29(3) 2(2) 3(2) 1(2)

C(5) 20(2) 20(2) 21(2) -3(2) 1(2) 4(2)

C(6) 17(2) 16(2) 25(2) 1(2) 0(2) 1(1)

C(7) 21(2) 23(2) 32(3) -6(2) 2(2) -2(2)

C(8) 34(2) 55(3) 30(3) -2(2) -8(2) -15(2)

C(9) 32(2) 28(2) 86(5) -23(3) 5(3) -2(2)

C(10) 28(2) 32(2) 40(3) -6(2) -4(2) -9(2)

C(11) 16(2) 20(2) 22(2) -3(2) -1(2) 5(1)

C(12) 17(2) 17(2) 23(2) -2(2) -4(2) 5(1)

C(13) 23(2) 19(2) 28(3) -7(2) -2(2) 2(2)

C(14) 19(2) 17(2) 30(3) 1(2) -6(2) 1(2)

C(15) 21(2) 15(2) 36(3) -4(2) -2(2) -4(2)

C(16) 28(2) 17(2) 28(3) 5(2) -3(2) 1(2)

C(17) 20(2) 31(2) 26(3) -1(2) 6(2) 9(2)

C(18) 19(2) 33(2) 35(3) -10(2) -3(2) -2(2)

C(20) 20(2) 22(2) 37(3) -6(2) -4(2) 3(2)

C(21) 27(2) 20(2) 41(3) 5(2) 4(2) 7(2)

C(22) 27(2) 37(2) 30(3) -1(2) -3(2) 14(2)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Table 5. Torsion angles [°] for mm10-2.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

C(6A)-C(1A)-C(2A)-C(3A) -1.1(6)

C(6B)-C(1B)-C(2B)-C(3B) 1.1(5)

C(1A)-C(2A)-C(3A)-C(4A) 3.0(6)

C(1A)-C(2A)-C(3A)-C(7A) -174.7(4)

C(1B)-C(2B)-C(3B)-C(4B) -2.2(5)

C(1B)-C(2B)-C(3B)-C(7B) 174.9(3)

C(2A)-C(3A)-C(4A)-C(5A) -1.7(6)

C(7A)-C(3A)-C(4A)-C(5A) 176.1(4)

C(2B)-C(3B)-C(4B)-C(5B) 0.8(5)

C(7B)-C(3B)-C(4B)-C(5B) -176.3(3)

C(3A)-C(4A)-C(5A)-C(6A) -1.6(6)

C(3B)-C(4B)-C(5B)-C(6B) 1.7(5)

C(2A)-C(1A)-C(6A)-C(5A) -2.2(6)

C(2A)-C(1A)-C(6A)-C(11A) 179.9(4)

C(4A)-C(5A)-C(6A)-C(1A) 3.5(6)

C(4A)-C(5A)-C(6A)-C(11A) -178.5(4)

C(2B)-C(1B)-C(6B)-C(5B) 1.4(5)

C(2B)-C(1B)-C(6B)-C(11B) -179.3(3)

C(4B)-C(5B)-C(6B)-C(1B) -2.8(5)

C(4B)-C(5B)-C(6B)-C(11B) 177.8(3)

C(4A)-C(3A)-C(7A)-C(10A) -178.1(3)

C(2A)-C(3A)-C(7A)-C(10A) -0.4(5)

C(4A)-C(3A)-C(7A)-C(9A) -57.6(5)

C(2A)-C(3A)-C(7A)-C(9A) 120.1(4)

C(4A)-C(3A)-C(7A)-C(8A) 61.1(5)

C(2A)-C(3A)-C(7A)-C(8A) -121.3(4)

C(4B)-C(3B)-C(7B)-C(8B) -17.1(4)

C(2B)-C(3B)-C(7B)-C(8B) 166.0(3)

C(4B)-C(3B)-C(7B)-C(10B) 102.2(4)

C(2B)-C(3B)-C(7B)-C(10B) -74.7(4)

C(4B)-C(3B)-C(7B)-C(9B) -137.7(3)

C(2B)-C(3B)-C(7B)-C(9B) 45.3(4)

C(1A)-C(6A)-C(11A)-O(1A) 144.9(4)

C(5A)-C(6A)-C(11A)-O(1A) -32.9(5)

C(1A)-C(6A)-C(11A)-C(12A) -36.6(5)

C(5A)-C(6A)-C(11A)-C(12A) 145.6(3)

C(1B)-C(6B)-C(11B)-O(1B) -151.4(3)

C(5B)-C(6B)-C(11B)-O(1B) 28.0(5)

C(1B)-C(6B)-C(11B)-C(12B) 31.0(5)

C(5B)-C(6B)-C(11B)-C(12B) -149.6(3)

O(1A)-C(11A)-C(12A)-C(13A) 162.5(4)

C(6A)-C(11A)-C(12A)-C(13A) -16.0(5)

O(1A)-C(11A)-C(12A)-C(14A) -8.1(5)

C(6A)-C(11A)-C(12A)-C(14A) 173.4(3)

O(1A)-C(11A)-C(12A)-Fe(1A) 75.4(4)

C(6A)-C(11A)-C(12A)-Fe(1A) -103.1(3)

C(14A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) 118.4(3)

C(19A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) -117.6(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) -76.5(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) 169.4(3)

C(18A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) -159.3(2)

C(21A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) -46.3(5)

C(16A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) 37.7(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(12A)-C(13A) 81.3(2)

C(13A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) -118.4(3)

C(19A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) 123.9(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) 165.1(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) 50.9(4)

C(18A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) 82.2(2)

C(21A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) -164.7(4)

C(16A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) -80.7(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(12A)-C(14A) -37.2(2)

C(13A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) 124.7(4)

C(14A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) -116.9(4)

C(19A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) 7.1(3)

C(20A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) 48.2(4)

C(17A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) -65.9(5)

C(18A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) -34.6(4)

C(21A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) 78.4(5)

C(16A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) 162.4(3)

C(15A)-Fe(1A)-C(12A)-C(11A) -154.0(3)

O(1B)-C(11B)-C(12B)-C(13B) 10.3(5)

C(6B)-C(11B)-C(12B)-C(13B) -172.1(3)

O(1B)-C(11B)-C(12B)-C(14B) -168.3(4)

C(6B)-C(11B)-C(12B)-C(14B) 9.3(6)

O(1B)-C(11B)-C(12B)-Fe(1B) 97.5(4)

C(6B)-C(11B)-C(12B)-Fe(1B) -84.9(4)

C(21B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) 166.4(2)

C(14B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) -118.0(3)

C(19B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) 82.8(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) 49.6(4)

C(20B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) 125.5(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) -160.8(4)

C(15B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) -37.0(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(12B)-C(13B) -80.2(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) 118.0(3)

C(21B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) -75.5(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) -159.1(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) 167.6(3)

C(20B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) -116.5(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) -42.8(5)

C(15B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) 81.1(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(12B)-C(14B) 37.8(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) -115.6(4)

C(21B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) 50.9(4)

C(14B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) 126.4(4)

C(19B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) -32.7(4)

C(17B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) -66.0(5)

C(20B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) 9.9(4)

C(18B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) 83.6(6)

C(15B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) -152.5(4)

C(16B)-Fe(1B)-C(12B)-C(11B) 164.2(4)

C(14A)-C(12A)-C(13A)-C(16A) -1.1(4)

C(11A)-C(12A)-C(13A)-C(16A) -172.9(3)

Fe(1A)-C(12A)-C(13A)-C(16A) -60.2(2)

C(14A)-C(12A)-C(13A)-Fe(1A) 59.2(2)

C(11A)-C(12A)-C(13A)-Fe(1A) -112.7(4)

C(14A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) 80.4(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) 119.0(3)

C(19A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) -160.7(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) -119.1(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) -48.5(5)

C(18A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) 168.6(4)

C(21A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) -78.0(3)

C(15A)-Fe(1A)-C(13A)-C(16A) 37.2(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) -38.5(2)

C(19A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) 80.4(3)

C(20A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) 121.9(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) -167.5(4)

C(18A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) 49.6(5)

C(21A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) 163.0(2)

C(16A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) -119.0(3)

C(15A)-Fe(1A)-C(13A)-C(12A) -81.7(2)

C(14B)-C(12B)-C(13B)-C(15B) 0.5(4)

C(11B)-C(12B)-C(13B)-C(15B) -178.4(3)

Fe(1B)-C(12B)-C(13B)-C(15B) 60.4(2)

C(14B)-C(12B)-C(13B)-Fe(1B) -59.9(2)

C(11B)-C(12B)-C(13B)-Fe(1B) 121.2(3)

C(12B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) -119.7(3)

C(21B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) -161.1(4)

C(14B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) -81.1(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) 124.3(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) 81.8(2)

C(20B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) 165.7(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) 47.0(4)

C(16B)-Fe(1B)-C(13B)-C(15B) -37.10(19)

C(21B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) -41.3(6)

C(14B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) 38.65(19)

C(19B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) -115.9(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) -158.4(2)

C(20B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) -74.5(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) 166.7(3)

C(15B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) 119.7(3)

C(16B)-Fe(1B)-C(13B)-C(12B) 82.6(2)

C(13A)-C(12A)-C(14A)-C(15A) 1.4(4)

C(11A)-C(12A)-C(14A)-C(15A) 173.9(3)

Fe(1A)-C(12A)-C(14A)-C(15A) 60.5(2)

C(13A)-C(12A)-C(14A)-Fe(1A) -59.2(2)

C(11A)-C(12A)-C(14A)-Fe(1A) 113.3(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) -80.9(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) -119.3(3)

C(19A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) 165.6(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) -160.5(4)

C(17A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) 81.5(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) 123.7(2)

C(21A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) 47.6(5)

C(16A)-Fe(1A)-C(14A)-C(15A) -37.14(19)

C(13A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) 38.35(19)

C(19A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) -75.2(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) -41.2(5)

C(17A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) -159.2(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) -117.0(2)

C(21A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) 166.9(3)

C(16A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) 82.1(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(14A)-C(12A) 119.3(3)

C(13B)-C(12B)-C(14B)-C(16B) -0.4(4)

C(11B)-C(12B)-C(14B)-C(16B) 178.4(3)

Fe(1B)-C(12B)-C(14B)-C(16B) -60.1(2)

C(13B)-C(12B)-C(14B)-Fe(1B) 59.6(2)

C(11B)-C(12B)-C(14B)-Fe(1B) -121.6(4)

C(13B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) 80.4(2)

C(12B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) 118.9(3)

C(21B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) -117.1(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) 167.6(4)

C(17B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) -44.2(6)

C(20B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) -158.9(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) -75.5(3)

C(15B)-Fe(1B)-C(14B)-C(16B) 37.1(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) -38.5(2)

C(21B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) 124.1(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) 48.7(5)

C(17B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) -163.1(4)

C(20B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) 82.2(3)

C(18B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) 165.7(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) -81.8(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(14B)-C(12B) -118.9(3)

C(12A)-C(14A)-C(15A)-C(16A) -1.1(4)

Fe(1A)-C(14A)-C(15A)-C(16A) 58.3(3)

C(12A)-C(14A)-C(15A)-Fe(1A) -59.5(2)

C(13A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) 82.8(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) 38.3(2)

C(19A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) -40.4(5)

C(20A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) 163.7(3)

C(17A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) -117.5(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) -75.8(3)

C(21A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) -160.1(2)

C(16A)-Fe(1A)-C(15A)-C(14A) 120.2(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) -37.4(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) -120.2(3)

C(12A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) -81.9(2)

C(19A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) -160.6(4)

C(20A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) 43.5(4)

C(17A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) 122.2(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) 164.0(2)

C(21A)-Fe(1A)-C(15A)-C(16A) 79.7(3)

C(12B)-C(13B)-C(15B)-C(16B) -0.4(4)

Fe(1B)-C(13B)-C(15B)-C(16B) 59.0(3)

C(12B)-C(13B)-C(15B)-Fe(1B) -59.5(2)

C(12B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) 37.8(2)

C(21B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) 167.0(3)

C(14B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) 82.3(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) -75.2(3)

C(17B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) -116.3(2)

C(20B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) -43.0(6)

C(18B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) -158.9(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(15B)-C(13B) 119.9(3)

C(13B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) -119.9(3)

C(12B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) -82.1(2)

C(21B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) 47.1(4)

C(14B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) -37.6(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) 164.9(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) 123.8(2)

C(20B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) -162.9(4)

C(18B)-Fe(1B)-C(15B)-C(16B) 81.2(3)

C(12A)-C(13A)-C(16A)-C(15A) 0.4(4)

Fe(1A)-C(13A)-C(16A)-C(15A) -59.2(3)

C(12A)-C(13A)-C(16A)-Fe(1A) 59.6(2)

C(14A)-C(15A)-C(16A)-C(13A) 0.4(4)

Fe(1A)-C(15A)-C(16A)-C(13A) 58.4(2)

C(14A)-C(15A)-C(16A)-Fe(1A) -57.9(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) -83.0(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) -38.2(2)

C(19A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) 45.1(5)

C(20A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) 78.4(3)

C(17A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) 162.4(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) -165.6(5)

C(21A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) 121.1(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(16A)-C(13A) -119.8(4)

C(13A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) 119.8(4)

C(14A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) 36.9(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) 81.6(2)

C(19A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) 164.9(4)

C(20A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) -161.7(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) -77.7(3)

C(18A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) -45.7(6)

C(21A)-Fe(1A)-C(16A)-C(15A) -119.0(2)

C(13B)-C(15B)-C(16B)-C(14B) 0.1(4)

Fe(1B)-C(15B)-C(16B)-C(14B) 58.4(2)

C(13B)-C(15B)-C(16B)-Fe(1B) -58.3(2)

C(12B)-C(14B)-C(16B)-C(15B) 0.2(4)

Fe(1B)-C(14B)-C(16B)-C(15B) -59.0(2)

C(12B)-C(14B)-C(16B)-Fe(1B) 59.2(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) 37.1(2)

C(12B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) 81.5(2)

C(21B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) -159.1(2)

C(14B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) 119.7(3)

C(19B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) -43.7(7)

C(17B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) -75.5(3)

C(20B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) 168.1(3)

C(18B)-Fe(1B)-C(16B)-C(15B) -116.5(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) -82.6(2)

C(12B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) -38.3(2)

C(21B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) 81.1(3)

C(19B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) -163.4(5)

C(17B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) 164.8(2)

C(20B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) 48.4(5)

C(18B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) 123.7(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(16B)-C(14B) -119.7(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) -158.3(4)

C(14A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) 80.6(3)

C(12A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) 43.3(5)

C(19A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) -37.6(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) -81.3(3)

C(21A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) -119.0(3)

C(16A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) 165.1(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(17A)-C(18A) 123.0(2)

C(13A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) -39.3(5)

C(14A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) -160.4(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) 162.3(3)

C(19A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) 81.4(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) 37.7(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) 119.0(3)

C(16A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) -75.9(3)

C(15A)-Fe(1A)-C(17A)-C(21A) -118.0(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) 82.4(3)

C(12B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) 46.9(4)

C(21B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) -81.5(3)

C(14B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) -160.6(4)

C(20B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) -38.0(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) -119.7(3)

C(15B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) 124.5(3)

C(16B)-Fe(1B)-C(17B)-C(19B) 165.5(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) -158.0(2)

C(12B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) 166.5(3)

C(21B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) 38.2(2)

C(14B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) -40.9(6)

C(19B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) 119.7(3)

C(20B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) 81.6(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) -115.8(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(17B)-C(18B) -74.8(3)

C(21A)-C(17A)-C(18A)-C(19A) -0.6(4)

Fe(1A)-C(17A)-C(18A)-C(19A) 59.2(2)

C(21A)-C(17A)-C(18A)-Fe(1A) -59.8(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) 162.1(4)

C(14A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) -118.1(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) -161.9(2)

C(19A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) 119.4(4)

C(20A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) 81.8(3)

C(21A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) 37.7(2)

C(16A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) -42.2(7)

C(15A)-Fe(1A)-C(18A)-C(17A) -76.9(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) 42.6(5)

C(14A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) 122.4(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) 78.7(3)

C(20A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) -37.6(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) -119.4(4)

C(21A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) -81.7(3)

C(16A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) -161.6(5)

C(15A)-Fe(1A)-C(18A)-C(19A) 163.6(2)

C(19B)-C(17B)-C(18B)-C(21B) 0.0(4)

Fe(1B)-C(17B)-C(18B)-C(21B) -59.2(2)

C(19B)-C(17B)-C(18B)-Fe(1B) 59.2(3)

C(13B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) 49.3(4)

C(12B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) -161.1(4)

C(21B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) -118.6(3)

C(14B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) 165.8(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) -37.3(2)

C(20B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) -81.2(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) 82.4(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(18B)-C(17B) 124.3(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) 168.0(3)

C(12B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) -42.5(5)

C(14B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) -75.6(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) 81.3(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) 118.6(3)

C(20B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) 37.4(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) -159.0(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(18B)-C(21B) -117.1(2)

C(17A)-C(18A)-C(19A)-C(20A) 0.3(4)

Fe(1A)-C(18A)-C(19A)-C(20A) 59.6(2)

C(17A)-C(18A)-C(19A)-Fe(1A) -59.3(2)

C(13A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) 78.9(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) 163.7(2)

C(12A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) 121.7(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) -81.8(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) -119.2(3)

C(21A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) -38.2(2)

C(16A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) 46.6(5)

C(15A)-Fe(1A)-C(19A)-C(20A) -165.8(4)

C(13A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) -161.9(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) -77.1(3)

C(12A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) -119.1(3)

C(20A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) 119.2(3)

C(17A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) 37.4(2)

C(21A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) 81.0(3)

C(16A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) 165.7(4)

C(15A)-Fe(1A)-C(19A)-C(18A) -46.6(6)

C(18B)-C(17B)-C(19B)-C(20B) 0.5(4)

Fe(1B)-C(17B)-C(19B)-C(20B) 59.8(2)

C(18B)-C(17B)-C(19B)-Fe(1B) -59.3(3)

C(13B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) -116.0(2)

C(12B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) -159.4(2)

C(21B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) 81.6(3)

C(14B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) 165.5(4)

C(20B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) 118.8(4)

C(18B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) 37.4(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) -75.0(3)

C(16B)-Fe(1B)-C(19B)-C(17B) -41.7(7)

C(13B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) 125.2(2)

C(12B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) 81.9(3)

C(21B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) -37.2(2)

C(14B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) 46.7(5)

C(17B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) -118.8(4)

C(18B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) -81.4(3)

C(15B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) 166.3(2)

C(16B)-Fe(1B)-C(19B)-C(20B) -160.5(5)

C(18A)-C(19A)-C(20A)-C(21A) 0.2(4)

Fe(1A)-C(19A)-C(20A)-C(21A) 59.8(2)

C(18A)-C(19A)-C(20A)-Fe(1A) -59.7(2)

C(13A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) -118.3(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) -45.0(5)

C(12A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) -76.4(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) 81.2(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) 37.7(2)

C(21A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) 118.6(3)

C(16A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) -160.0(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(20A)-C(19A) 168.5(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) 123.1(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) -163.6(4)

C(12A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) 165.0(2)

C(19A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) -118.6(3)

C(17A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) -37.4(2)

C(18A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) -80.9(2)

C(16A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) 81.4(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(20A)-C(21A) 49.9(4)

C(17B)-C(19B)-C(20B)-C(21B) -0.8(4)

Fe(1B)-C(19B)-C(20B)-C(21B) 59.1(2)

C(17B)-C(19B)-C(20B)-Fe(1B) -59.9(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) 165.75(19)

C(12B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) 124.0(2)

C(14B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) 80.7(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) -119.5(3)

C(17B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) -81.8(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) -38.0(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) -161.1(4)

C(16B)-Fe(1B)-C(20B)-C(21B) 46.1(4)

C(13B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) -74.7(3)

C(12B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) -116.5(2)

C(21B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) 119.5(3)

C(14B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) -159.8(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) 37.7(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) 81.5(2)

C(15B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) -41.6(6)

C(16B)-Fe(1B)-C(20B)-C(19B) 165.6(3)

C(18A)-C(17A)-C(21A)-C(20A) 0.7(4)

Fe(1A)-C(17A)-C(21A)-C(20A) -59.0(2)

C(18A)-C(17A)-C(21A)-Fe(1A) 59.7(3)

C(19A)-C(20A)-C(21A)-C(17A) -0.6(4)

Fe(1A)-C(20A)-C(21A)-C(17A) 59.2(3)

C(19A)-C(20A)-C(21A)-Fe(1A) -59.8(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) 165.5(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) 46.9(5)

C(12A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) -159.6(4)

C(19A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) -81.5(2)

C(20A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) -119.4(3)

C(18A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) -37.6(2)

C(16A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) 123.4(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(21A)-C(17A) 81.2(3)

C(13A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) -75.1(2)

C(14A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) 166.4(3)

C(12A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) -40.2(5)

C(19A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) 37.9(2)

C(17A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) 119.4(3)

C(18A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) 81.8(2)

C(16A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) -117.2(2)

C(15A)-Fe(1A)-C(21A)-C(20A) -159.3(2)

C(19B)-C(20B)-C(21B)-C(18B) 0.8(4)

Fe(1B)-C(20B)-C(21B)-C(18B) 59.9(2)

C(19B)-C(20B)-C(21B)-Fe(1B) -59.0(2)

C(17B)-C(18B)-C(21B)-C(20B) -0.5(4)

Fe(1B)-C(18B)-C(21B)-C(20B) -60.0(3)

C(17B)-C(18B)-C(21B)-Fe(1B) 59.5(3)

C(13B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) -43.0(6)

C(12B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) -75.2(3)

C(14B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) -117.2(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) 37.7(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) 81.3(2)

C(18B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) 119.1(3)

C(15B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) 167.0(3)

C(16B)-Fe(1B)-C(21B)-C(20B) -159.7(2)

C(13B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) -162.2(4)

C(12B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) 165.7(2)

C(14B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) 123.7(2)

C(19B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) -81.5(2)

C(17B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) -37.9(2)

C(20B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) -119.1(3)

C(15B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) 47.9(4)

C(16B)-Fe(1B)-C(21B)-C(18B) 81.2(2)

C(6)-C(1)-C(2)-C(3) -0.4(5)

C(1)-C(2)-C(3)-C(4) 0.9(5)

C(1)-C(2)-C(3)-C(7) -179.1(3)

C(2)-C(3)-C(4)-C(5) -1.3(5)

C(7)-C(3)-C(4)-C(5) 178.7(3)

C(3)-C(4)-C(5)-C(6) 1.1(5)

C(2)-C(1)-C(6)-C(5) 0.3(5)

C(2)-C(1)-C(6)-C(11) 178.1(3)

C(4)-C(5)-C(6)-C(1) -0.6(5)

C(4)-C(5)-C(6)-C(11) -178.6(3)

C(4)-C(3)-C(7)-C(9) -126.6(4)

C(2)-C(3)-C(7)-C(9) 53.4(5)

C(4)-C(3)-C(7)-C(8) 113.6(4)

C(2)-C(3)-C(7)-C(8) -66.4(4)

C(4)-C(3)-C(7)-C(10) -6.6(5)

C(2)-C(3)-C(7)-C(10) 173.4(3)

C(1)-C(6)-C(11)-O(1) -147.1(4)

C(5)-C(6)-C(11)-O(1) 30.8(5)

C(1)-C(6)-C(11)-C(12) 36.2(5)

C(5)-C(6)-C(11)-C(12) -145.9(3)

O(1)-C(11)-C(12)-C(14) -169.1(3)

C(6)-C(11)-C(12)-C(14) 7.6(5)

O(1)-C(11)-C(12)-C(13) 11.2(5)

C(6)-C(11)-C(12)-C(13) -172.0(3)

O(1)-C(11)-C(12)-Fe(1) 98.9(4)

C(6)-C(11)-C(12)-Fe(1) -84.4(4)

C(18)-Fe(1)-C(12)-C(14) 162.1(3)

C(22)-Fe(1)-C(12)-C(14) -164.2(2)

C(13)-Fe(1)-C(12)-C(14) 118.1(3)

C(21)-Fe(1)-C(12)-C(14) -121.7(2)

C(20)-Fe(1)-C(12)-C(14) -79.9(2)

C(16)-Fe(1)-C(12)-C(14) 37.6(2)

C(17)-Fe(1)-C(12)-C(14) -45.8(5)

C(15)-Fe(1)-C(12)-C(14) 81.1(2)

C(14)-Fe(1)-C(12)-C(13) -118.1(3)

C(18)-Fe(1)-C(12)-C(13) 44.0(5)

C(22)-Fe(1)-C(12)-C(13) 77.7(2)

C(21)-Fe(1)-C(12)-C(13) 120.2(2)

C(20)-Fe(1)-C(12)-C(13) 162.0(2)

C(16)-Fe(1)-C(12)-C(13) -80.5(2)

C(17)-Fe(1)-C(12)-C(13) -163.9(4)

C(15)-Fe(1)-C(12)-C(13) -37.0(2)

C(14)-Fe(1)-C(12)-C(11) 124.8(4)

C(18)-Fe(1)-C(12)-C(11) -73.0(5)

C(22)-Fe(1)-C(12)-C(11) -39.3(4)

C(13)-Fe(1)-C(12)-C(11) -117.1(4)

C(21)-Fe(1)-C(12)-C(11) 3.2(4)

C(20)-Fe(1)-C(12)-C(11) 44.9(4)

C(16)-Fe(1)-C(12)-C(11) 162.4(4)

C(17)-Fe(1)-C(12)-C(11) 79.0(6)

C(15)-Fe(1)-C(12)-C(11) -154.1(4)

C(14)-C(12)-C(13)-C(15) 0.3(4)

C(11)-C(12)-C(13)-C(15) -180.0(3)

Fe(1)-C(12)-C(13)-C(15) 59.9(2)

C(14)-C(12)-C(13)-Fe(1) -59.6(2)

C(11)-C(12)-C(13)-Fe(1) 120.2(3)

C(14)-Fe(1)-C(13)-C(15) -81.3(2)

C(12)-Fe(1)-C(13)-C(15) -119.6(3)

C(18)-Fe(1)-C(13)-C(15) 78.0(3)

C(22)-Fe(1)-C(13)-C(15) 119.4(2)

C(21)-Fe(1)-C(13)-C(15) 160.8(2)

C(20)-Fe(1)-C(13)-C(15) -168.9(4)

C(16)-Fe(1)-C(13)-C(15) -37.3(2)

C(17)-Fe(1)-C(13)-C(15) 46.4(5)

C(14)-Fe(1)-C(13)-C(12) 38.3(2)

C(18)-Fe(1)-C(13)-C(12) -162.4(2)

C(22)-Fe(1)-C(13)-C(12) -121.0(2)

C(21)-Fe(1)-C(13)-C(12) -79.6(2)

C(20)-Fe(1)-C(13)-C(12) -49.3(5)

C(16)-Fe(1)-C(13)-C(12) 82.3(2)

C(17)-Fe(1)-C(13)-C(12) 165.9(4)

C(15)-Fe(1)-C(13)-C(12) 119.6(3)

C(13)-C(12)-C(14)-C(16) -0.3(4)

C(11)-C(12)-C(14)-C(16) 180.0(3)

Fe(1)-C(12)-C(14)-C(16) -60.0(2)

C(13)-C(12)-C(14)-Fe(1) 59.6(2)

C(11)-C(12)-C(14)-Fe(1) -120.1(4)

C(18)-Fe(1)-C(14)-C(12) -161.6(4)

C(22)-Fe(1)-C(14)-C(12) 41.8(5)

C(13)-Fe(1)-C(14)-C(12) -38.78(19)

C(21)-Fe(1)-C(14)-C(12) 78.1(3)

C(20)-Fe(1)-C(14)-C(12) 120.3(2)

C(16)-Fe(1)-C(14)-C(12) -119.5(3)

C(17)-Fe(1)-C(14)-C(12) 162.9(2)

C(15)-Fe(1)-C(14)-C(12) -82.1(2)

C(12)-Fe(1)-C(14)-C(16) 119.5(3)

C(18)-Fe(1)-C(14)-C(16) -42.1(5)

C(22)-Fe(1)-C(14)-C(16) 161.3(4)

C(13)-Fe(1)-C(14)-C(16) 80.7(2)

C(21)-Fe(1)-C(14)-C(16) -162.4(2)

C(20)-Fe(1)-C(14)-C(16) -120.2(2)

C(17)-Fe(1)-C(14)-C(16) -77.6(3)

C(15)-Fe(1)-C(14)-C(16) 37.4(2)

C(12)-C(13)-C(15)-C(16) -0.1(4)

Fe(1)-C(13)-C(15)-C(16) 58.8(2)

C(12)-C(13)-C(15)-Fe(1) -59.0(2)

C(14)-Fe(1)-C(15)-C(13) 82.2(2)

C(12)-Fe(1)-C(15)-C(13) 38.1(2)

C(18)-Fe(1)-C(15)-C(13) -119.5(2)

C(22)-Fe(1)-C(15)-C(13) -78.3(2)

C(21)-Fe(1)-C(15)-C(13) -48.3(5)

C(20)-Fe(1)-C(15)-C(13) 169.6(3)

C(16)-Fe(1)-C(15)-C(13) 119.9(3)

C(17)-Fe(1)-C(15)-C(13) -160.6(2)

C(14)-Fe(1)-C(15)-C(16) -37.7(2)

C(12)-Fe(1)-C(15)-C(16) -81.8(2)

C(18)-Fe(1)-C(15)-C(16) 120.6(2)

C(22)-Fe(1)-C(15)-C(16) 161.8(2)

C(13)-Fe(1)-C(15)-C(16) -119.9(3)

C(21)-Fe(1)-C(15)-C(16) -168.2(3)

C(20)-Fe(1)-C(15)-C(16) 49.7(5)

C(17)-Fe(1)-C(15)-C(16) 79.5(3)

C(13)-C(15)-C(16)-C(14) -0.1(4)

Fe(1)-C(15)-C(16)-C(14) 58.5(2)

C(13)-C(15)-C(16)-Fe(1) -58.6(2)

C(12)-C(14)-C(16)-C(15) 0.3(4)

Fe(1)-C(14)-C(16)-C(15) -59.3(2)

C(12)-C(14)-C(16)-Fe(1) 59.5(2)

C(14)-Fe(1)-C(16)-C(15) 119.5(3)

C(12)-Fe(1)-C(16)-C(15) 81.8(2)

C(18)-Fe(1)-C(16)-C(15) -77.1(3)

C(22)-Fe(1)-C(16)-C(15) -43.8(5)

C(13)-Fe(1)-C(16)-C(15) 37.1(2)

C(21)-Fe(1)-C(16)-C(15) 167.1(4)

C(20)-Fe(1)-C(16)-C(15) -160.6(2)

C(17)-Fe(1)-C(16)-C(15) -119.0(2)

C(12)-Fe(1)-C(16)-C(14) -37.7(2)

C(18)-Fe(1)-C(16)-C(14) 163.5(2)

C(22)-Fe(1)-C(16)-C(14) -163.3(4)

C(13)-Fe(1)-C(16)-C(14) -82.4(2)

C(21)-Fe(1)-C(16)-C(14) 47.6(6)

C(20)-Fe(1)-C(16)-C(14) 79.9(3)

C(17)-Fe(1)-C(16)-C(14) 121.5(2)

C(15)-Fe(1)-C(16)-C(14) -119.5(3)

C(14)-Fe(1)-C(17)-C(18) 161.2(2)

C(12)-Fe(1)-C(17)-C(18) -164.4(4)

C(22)-Fe(1)-C(17)-C(18) -37.3(2)

C(13)-Fe(1)-C(17)-C(18) 43.7(5)

C(21)-Fe(1)-C(17)-C(18) -81.3(2)

C(20)-Fe(1)-C(17)-C(18) -118.8(3)

C(16)-Fe(1)-C(17)-C(18) 119.1(2)

C(15)-Fe(1)-C(17)-C(18) 77.2(3)

C(14)-Fe(1)-C(17)-C(20) -80.0(3)

C(12)-Fe(1)-C(17)-C(20) -45.6(5)

C(18)-Fe(1)-C(17)-C(20) 118.8(3)

C(22)-Fe(1)-C(17)-C(20) 81.5(2)

C(13)-Fe(1)-C(17)-C(20) 162.6(4)

C(21)-Fe(1)-C(17)-C(20) 37.5(2)

C(16)-Fe(1)-C(17)-C(20) -122.0(2)

C(15)-Fe(1)-C(17)-C(20) -164.0(2)

C(20)-C(17)-C(18)-C(22) 0.4(4)

Fe(1)-C(17)-C(18)-C(22) 59.6(3)

C(20)-C(17)-C(18)-Fe(1) -59.3(2)

C(14)-Fe(1)-C(18)-C(22) -167.8(4)

C(12)-Fe(1)-C(18)-C(22) 46.1(5)

C(13)-Fe(1)-C(18)-C(22) 78.7(3)

C(21)-Fe(1)-C(18)-C(22) -38.1(2)

C(20)-Fe(1)-C(18)-C(22) -81.7(2)

C(16)-Fe(1)-C(18)-C(22) 161.0(2)

C(17)-Fe(1)-C(18)-C(22) -119.6(3)

C(15)-Fe(1)-C(18)-C(22) 119.8(2)

C(14)-Fe(1)-C(18)-C(17) -48.2(5)

C(12)-Fe(1)-C(18)-C(17) 165.8(3)

C(22)-Fe(1)-C(18)-C(17) 119.6(3)

C(13)-Fe(1)-C(18)-C(17) -161.7(2)

C(21)-Fe(1)-C(18)-C(17) 81.6(2)

C(20)-Fe(1)-C(18)-C(17) 37.9(2)

C(16)-Fe(1)-C(18)-C(17) -79.3(3)

C(15)-Fe(1)-C(18)-C(17) -120.5(2)

C(18)-C(17)-C(20)-C(21) -0.4(4)

Fe(1)-C(17)-C(20)-C(21) -59.3(2)

C(18)-C(17)-C(20)-Fe(1) 59.0(2)

C(14)-Fe(1)-C(20)-C(21) -120.9(2)

C(12)-Fe(1)-C(20)-C(21) -77.9(3)

C(18)-Fe(1)-C(20)-C(21) 81.4(2)

C(22)-Fe(1)-C(20)-C(21) 37.8(2)

C(13)-Fe(1)-C(20)-C(21) -40.6(5)

C(16)-Fe(1)-C(20)-C(21) -163.8(2)

C(17)-Fe(1)-C(20)-C(21) 119.2(3)

C(15)-Fe(1)-C(20)-C(21) 159.6(3)

C(14)-Fe(1)-C(20)-C(17) 119.9(2)

C(12)-Fe(1)-C(20)-C(17) 162.9(2)

C(18)-Fe(1)-C(20)-C(17) -37.8(2)

C(22)-Fe(1)-C(20)-C(17) -81.4(2)

C(13)-Fe(1)-C(20)-C(17) -159.8(4)

C(21)-Fe(1)-C(20)-C(17) -119.2(3)

C(16)-Fe(1)-C(20)-C(17) 77.0(3)

C(15)-Fe(1)-C(20)-C(17) 40.4(5)

C(17)-C(20)-C(21)-C(22) 0.2(4)

Fe(1)-C(20)-C(21)-C(22) -59.4(2)

C(17)-C(20)-C(21)-Fe(1) 59.6(2)

C(14)-Fe(1)-C(21)-C(20) 79.0(3)

C(12)-Fe(1)-C(21)-C(20) 121.4(2)

C(18)-Fe(1)-C(21)-C(20) -81.4(2)

C(22)-Fe(1)-C(21)-C(20) -119.2(3)

C(13)-Fe(1)-C(21)-C(20) 164.73(19)

C(16)-Fe(1)-C(21)-C(20) 43.2(5)

C(17)-Fe(1)-C(21)-C(20) -37.7(2)

C(15)-Fe(1)-C(21)-C(20) -160.0(3)

C(14)-Fe(1)-C(21)-C(22) -161.8(2)

C(12)-Fe(1)-C(21)-C(22) -119.4(2)

C(18)-Fe(1)-C(21)-C(22) 37.7(2)

C(13)-Fe(1)-C(21)-C(22) -76.1(3)

C(20)-Fe(1)-C(21)-C(22) 119.2(3)

C(16)-Fe(1)-C(21)-C(22) 162.4(4)

C(17)-Fe(1)-C(21)-C(22) 81.5(3)

C(15)-Fe(1)-C(21)-C(22) -40.8(5)

C(17)-C(18)-C(22)-C(21) -0.2(4)

Fe(1)-C(18)-C(22)-C(21) 59.8(2)

C(17)-C(18)-C(22)-Fe(1) -60.0(3)

C(20)-C(21)-C(22)-C(18) 0.0(4)

Fe(1)-C(21)-C(22)-C(18) -59.8(2)

C(20)-C(21)-C(22)-Fe(1) 59.8(2)

C(14)-Fe(1)-C(22)-C(18) 167.3(4)

C(12)-Fe(1)-C(22)-C(18) -161.5(2)

C(13)-Fe(1)-C(22)-C(18) -119.0(2)

C(21)-Fe(1)-C(22)-C(18) 118.7(4)

C(20)-Fe(1)-C(22)-C(18) 81.2(2)

C(16)-Fe(1)-C(22)-C(18) -45.9(5)

C(17)-Fe(1)-C(22)-C(18) 37.4(2)

C(15)-Fe(1)-C(22)-C(18) -77.7(3)

C(14)-Fe(1)-C(22)-C(21) 48.6(6)

C(12)-Fe(1)-C(22)-C(21) 79.8(3)

C(18)-Fe(1)-C(22)-C(21) -118.7(4)

C(13)-Fe(1)-C(22)-C(21) 122.3(2)

C(20)-Fe(1)-C(22)-C(21) -37.5(2)

C(16)-Fe(1)-C(22)-C(21) -164.6(4)

C(17)-Fe(1)-C(22)-C(21) -81.3(3)

C(15)-Fe(1)-C(22)-C(21) 163.6(2)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: