

Table 1. Crystal data and structure refinement for mm7.

Identification code mm7

Empirical formula C21 H23 Fe I O

Formula weight 474.14

Temperature 123(2) K

Wavelength 0.71073 Å

Crystal system qmonoclinic’

Space group ‘P21/c’

Unit cell dimensions a = 9.6150(3) Å = 90°.

b = 11.7549(4) Å = 105.283(3)°.

c = 17.2226(5) Å  = 90°.

Volume 1877.72(10) Å3

Z 4

Density (calculated) 1.677 Mg/m3

Absorption coefficient 2.452 mm-1

F(000) 944

Crystal size 0.1 x 0.1 x 0.1 mm3

Theta range for data collection 2.83 to 30.15°.

Index ranges -13<=h<=12, -16<=k<=16, -23<=l<=24

Reflections collected 27212

Independent reflections 5212 [R(int) = 0.0547]

Completeness to theta = 27.00° 99.9 %

Absorption correction Semi-empirical from equivalents

Max. and min. transmission 1.00000 and 0.84395

Refinement method Full-matrix least-squares on F2

Data / restraints / parameters 5212 / 3 / 206

Goodness-of-fit on F2 1.128

Final R indices [I>2sigma(I)] R1 = 0.0505, wR2 = 0.1106

R indices (all data) R1 = 0.0653, wR2 = 0.1161

Largest diff. peak and hole 1.336 and -0.621 e.Å-3

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

for mm7. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

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

x y z U(eq)

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

I(1) 1676(1) 6694(1) 816(1) 25(1)

Fe(1) 1473(1) 6843(1) -1355(1) 16(1)

O(1) -1503(3) 6514(2) -406(2) 19(1)

C(1) 483(4) 8398(4) -1521(3) 20(1)

C(2) 8(4) 7762(3) -929(2) 15(1)

C(3) 1307(4) 7510(4) -304(2) 16(1)

C(4) 2522(5) 7985(4) -515(3) 22(1)

C(5) 2001(5) 8536(4) -1266(3) 24(1)

C(6) 1737(5) 5119(5) -1244(3) 25(1)

C(7) 499(5) 5378(4) -1877(3) 23(1)

C(8) 942(5) 6052(4) -2453(3) 25(1)

C(9) 2456(6) 6199(5) -2181(3) 28(1)

C(10) 2954(5) 5629(5) -1432(3) 26(1)

C(11) -1548(4) 7466(4) -934(2) 15(1)

C(12) -2267(4) 8444(4) -550(3) 19(1)

C(13) -1425(5) 8632(4) 327(3) 26(1)

C(14) -2306(5) 9585(4) -998(3) 26(1)

C(15) -3821(5) 8111(4) -568(3) 28(1)

C(16) -2696(5) 7824(4) -2462(3) 26(1)

C(17) -3222(4) 6093(4) -1876(3) 20(1)

C(18) -4076(5) 5739(4) -2618(3) 27(1)

C(19) -4248(5) 6430(5) -3290(3) 34(1)

C(20) -3563(6) 7467(5) -3204(3) 35(1)

C(21) -2493(4) 7138(4) -1780(2) 18(1)

C(6A) 1330(30) 5100(60) -1390(30) 25(1)

C(7A) 420(30) 5620(60) -2080(40) 23(1)

C(8A) 1290(50) 6270(60) -2470(30) 25(1)

C(9A) 2750(50) 6140(70) -2020(30) 28(1)

C(10A) 2780(30) 5410(60) -1350(30) 26(1)

I(2) 4634(6) 5065(5) -443(3) 25(1)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for mm7.

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

I(1)-C(3) 2.099(4)

Fe(1)-C(8A) 1.99(7)

Fe(1)-C(7A) 1.99(7)

Fe(1)-C(3) 2.017(4)

Fe(1)-C(4) 2.036(4)

Fe(1)-C(6) 2.045(5)

Fe(1)-C(10) 2.045(6)

Fe(1)-C(1) 2.045(4)

Fe(1)-C(8) 2.048(5)

Fe(1)-C(9) 2.049(6)

Fe(1)-C(5) 2.050(4)

Fe(1)-C(7) 2.051(5)

Fe(1)-C(9A) 2.06(8)

O(1)-C(11) 1.436(5)

O(1)-H(1) 0.8400

C(1)-C(5) 1.418(6)

C(1)-C(2) 1.432(6)

C(1)-H(1A) 0.9500

C(2)-C(3) 1.447(5)

C(2)-C(11) 1.535(5)

C(3)-C(4) 1.426(6)

C(4)-C(5) 1.415(7)

C(4)-H(4) 0.9500

C(5)-H(5) 0.9500

C(6)-C(7) 1.419(7)

C(6)-C(10) 1.426(7)

C(6)-H(6) 0.9500

C(7)-C(8) 1.420(7)

C(7)-H(7) 0.9500

C(8)-C(9) 1.418(7)

C(8)-H(8) 0.9500

C(9)-C(10) 1.421(7)

C(9)-H(9) 0.9500

C(10)-H(10) 0.9500

C(11)-C(21) 1.549(5)

C(11)-C(12) 1.574(6)

C(12)-C(13) 1.529(6)

C(12)-C(15) 1.537(6)

C(12)-C(14) 1.543(6)

C(13)-H(13A) 0.9800

C(13)-H(13B) 0.9800

C(13)-H(13C) 0.9800

C(14)-H(14A) 0.9800

C(14)-H(14B) 0.9800

C(14)-H(14C) 0.9800

C(15)-H(15A) 0.9800

C(15)-H(15B) 0.9800

C(15)-H(15C) 0.9800

C(16)-C(20) 1.394(7)

C(16)-C(21) 1.395(6)

C(16)-H(16) 0.9500

C(17)-C(18) 1.389(6)

C(17)-C(21) 1.402(6)

C(17)-H(17) 0.9500

C(18)-C(19) 1.387(7)

C(18)-H(18) 0.9500

C(19)-C(20) 1.374(8)

C(19)-H(19) 0.9500

C(20)-H(20) 0.9500

C(6A)-C(7A) 1.4200

C(6A)-C(10A) 1.4200

C(6A)-H(6A) 0.9500

C(7A)-C(8A) 1.4200

C(7A)-H(7A) 0.9500

C(8A)-C(9A) 1.4200

C(8A)-H(8A) 0.9500

C(9A)-C(10A) 1.4200

C(9A)-H(9A) 0.9500

C(10A)-I(2) 2.084(9)

I(2)-I(2)#1 1.510(11)

C(8A)-Fe(1)-C(7A) 41.7(13)

C(8A)-Fe(1)-C(3) 170.2(13)

C(7A)-Fe(1)-C(3) 133.8(19)

C(8A)-Fe(1)-C(4) 144(2)

C(7A)-Fe(1)-C(4) 173.8(19)

C(3)-Fe(1)-C(4) 41.19(16)

C(8A)-Fe(1)-C(6) 74.4(18)

C(7A)-Fe(1)-C(6) 51.4(13)

C(3)-Fe(1)-C(6) 109.76(19)

C(4)-Fe(1)-C(6) 124.12(19)

C(8A)-Fe(1)-C(10) 65.7(12)

C(7A)-Fe(1)-C(10) 73.0(13)

C(3)-Fe(1)-C(10) 123.39(19)

C(4)-Fe(1)-C(10) 106.45(19)

C(6)-Fe(1)-C(10) 40.82(19)

C(8A)-Fe(1)-C(1) 104.5(15)

C(7A)-Fe(1)-C(1) 114.4(12)

C(3)-Fe(1)-C(1) 68.52(17)

C(4)-Fe(1)-C(1) 68.58(18)

C(6)-Fe(1)-C(1) 160.06(18)

C(10)-Fe(1)-C(1) 157.07(18)

C(8A)-Fe(1)-C(8) 11.9(19)

C(7A)-Fe(1)-C(8) 30.0(19)

C(3)-Fe(1)-C(8) 161.07(18)

C(4)-Fe(1)-C(8) 155.80(19)

C(6)-Fe(1)-C(8) 68.4(2)

C(10)-Fe(1)-C(8) 68.4(2)

C(1)-Fe(1)-C(8) 106.49(19)

C(8A)-Fe(1)-C(9) 31.6(14)

C(7A)-Fe(1)-C(9) 63.5(19)

C(3)-Fe(1)-C(9) 157.90(18)

C(4)-Fe(1)-C(9) 120.26(19)

C(6)-Fe(1)-C(9) 68.3(2)

C(10)-Fe(1)-C(9) 40.6(2)

C(1)-Fe(1)-C(9) 121.07(19)

C(8)-Fe(1)-C(9) 40.5(2)

C(8A)-Fe(1)-C(5) 111(2)

C(7A)-Fe(1)-C(5) 145.1(16)

C(3)-Fe(1)-C(5) 68.42(18)

C(4)-Fe(1)-C(5) 40.53(19)

C(6)-Fe(1)-C(5) 158.90(19)

C(10)-Fe(1)-C(5) 121.29(19)

C(1)-Fe(1)-C(5) 40.53(17)

C(8)-Fe(1)-C(5) 120.4(2)

C(9)-Fe(1)-C(5) 105.0(2)

C(8A)-Fe(1)-C(7) 52(2)

C(7A)-Fe(1)-C(7) 12.4(16)

C(3)-Fe(1)-C(7) 125.79(18)

C(4)-Fe(1)-C(7) 161.58(19)

C(6)-Fe(1)-C(7) 40.55(19)

C(10)-Fe(1)-C(7) 68.3(2)

C(1)-Fe(1)-C(7) 123.18(18)

C(8)-Fe(1)-C(7) 40.52(19)

C(9)-Fe(1)-C(7) 68.1(2)

C(5)-Fe(1)-C(7) 157.44(19)

C(8A)-Fe(1)-C(9A) 41.0(14)

C(7A)-Fe(1)-C(9A) 69.1(17)

C(3)-Fe(1)-C(9A) 148.7(11)

C(4)-Fe(1)-C(9A) 113.8(17)

C(6)-Fe(1)-C(9A) 64.8(16)

C(10)-Fe(1)-C(9A) 32.4(8)

C(1)-Fe(1)-C(9A) 127.4(12)

C(8)-Fe(1)-C(9A) 49.0(13)

C(9)-Fe(1)-C(9A) 9.8(7)

C(5)-Fe(1)-C(9A) 105.1(19)

C(7)-Fe(1)-C(9A) 71.8(19)

C(5)-C(1)-C(2) 109.6(4)

C(5)-C(1)-Fe(1) 69.9(2)

C(2)-C(1)-Fe(1) 70.1(2)

C(1)-C(2)-C(3) 105.2(3)

C(1)-C(2)-C(11) 127.4(4)

C(3)-C(2)-C(11) 127.4(3)

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

C(3)-C(2)-Fe(1) 67.7(2)

C(11)-C(2)-Fe(1) 129.5(3)

C(4)-C(3)-C(2) 109.6(4)

C(4)-C(3)-Fe(1) 70.1(2)

C(2)-C(3)-Fe(1) 70.7(2)

C(4)-C(3)-I(1) 117.5(3)

C(2)-C(3)-I(1) 132.9(3)

Fe(1)-C(3)-I(1) 127.8(2)

C(5)-C(4)-C(3) 107.2(4)

C(5)-C(4)-Fe(1) 70.3(3)

C(3)-C(4)-Fe(1) 68.7(2)

C(4)-C(5)-C(1) 108.5(4)

C(4)-C(5)-Fe(1) 69.2(2)

C(1)-C(5)-Fe(1) 69.6(2)

C(7)-C(6)-C(10) 107.9(4)

C(7)-C(6)-Fe(1) 70.0(3)

C(10)-C(6)-Fe(1) 69.6(3)

C(6)-C(7)-C(8) 108.2(4)

C(6)-C(7)-Fe(1) 69.5(3)

C(8)-C(7)-Fe(1) 69.6(3)

C(9)-C(8)-C(7) 108.0(4)

C(9)-C(8)-Fe(1) 69.8(3)

C(7)-C(8)-Fe(1) 69.9(3)

C(8)-C(9)-C(10) 108.2(5)

C(8)-C(9)-Fe(1) 69.7(3)

C(10)-C(9)-Fe(1) 69.5(3)

C(9)-C(10)-C(6) 107.7(4)

C(9)-C(10)-Fe(1) 69.9(3)

C(6)-C(10)-Fe(1) 69.6(3)

O(1)-C(11)-C(2) 107.9(3)

O(1)-C(11)-C(21) 108.4(3)

C(2)-C(11)-C(21) 113.0(3)

O(1)-C(11)-C(12) 104.2(3)

C(2)-C(11)-C(12) 111.5(3)

C(21)-C(11)-C(12) 111.3(3)

C(13)-C(12)-C(15) 108.4(4)

C(13)-C(12)-C(14) 107.8(4)

C(15)-C(12)-C(14) 108.4(4)

C(13)-C(12)-C(11) 110.1(3)

C(15)-C(12)-C(11) 109.7(3)

C(14)-C(12)-C(11) 112.4(3)

C(20)-C(16)-C(21) 120.9(5)

C(18)-C(17)-C(21) 121.8(4)

C(19)-C(18)-C(17) 120.2(5)

C(20)-C(19)-C(18) 118.8(4)

C(19)-C(20)-C(16) 121.3(5)

C(16)-C(21)-C(17) 116.9(4)

C(16)-C(21)-C(11) 124.4(4)

C(17)-C(21)-C(11) 118.7(4)

C(7A)-C(6A)-C(10A) 108.0

C(7A)-C(6A)-Fe(1) 67(3)

C(10A)-C(6A)-Fe(1) 71(3)

C(6A)-C(7A)-C(8A) 108.0

C(6A)-C(7A)-Fe(1) 72(3)

C(8A)-C(7A)-Fe(1) 69(3)

C(7A)-C(8A)-C(9A) 108.0

C(7A)-C(8A)-Fe(1) 69(3)

C(9A)-C(8A)-Fe(1) 72(3)

C(10A)-C(9A)-Fe(1) 71(3)

C(8A)-C(9A)-Fe(1) 67(3)

C(6A)-C(10A)-C(9A) 108.0

C(6A)-C(10A)-I(2) 128.0(11)

C(9A)-C(10A)-I(2) 123.7(11)

C(6A)-C(10A)-Fe(1) 69(3)

C(9A)-C(10A)-Fe(1) 69(3)

I(2)-C(10A)-Fe(1) 124(4)

I(2)#1-I(2)-C(10A) 149.2(19)

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

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,-y+1,-z

Table 4. Anisotropic displacement parameters (Å2x 103)for mm7. The anisotropic

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

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

U11 U22 U33 U23 U13 U12

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

I(1) 25(1) 29(1) 18(1) 1(1) 1(1) 4(1)

Fe(1) 15(1) 17(1) 18(1) -2(1) 7(1) 1(1)

O(1) 18(1) 18(1) 21(2) 2(1) 6(1) -1(1)

C(1) 20(2) 18(2) 25(2) 1(2) 11(2) 0(2)

C(2) 15(2) 14(2) 17(2) -1(2) 5(2) -2(1)

C(3) 14(2) 15(2) 21(2) -2(2) 6(2) 1(1)

C(4) 14(2) 25(2) 28(2) -7(2) 7(2) -2(2)

C(5) 25(2) 16(2) 36(2) 0(2) 19(2) -3(2)

C(11) 14(2) 17(2) 14(2) 3(2) 4(1) -1(1)

C(12) 14(2) 24(2) 20(2) -4(2) 7(2) -1(2)

C(13) 23(2) 31(2) 25(2) -10(2) 9(2) 2(2)

C(14) 21(2) 24(2) 33(2) -1(2) 8(2) 4(2)

C(15) 13(2) 41(3) 33(2) -9(2) 11(2) -1(2)

C(16) 23(2) 32(2) 21(2) 3(2) 5(2) -5(2)

C(17) 14(2) 23(2) 23(2) -2(2) 4(2) 0(2)

C(18) 21(2) 31(2) 28(2) -9(2) 3(2) -3(2)

C(19) 23(2) 53(3) 23(2) -9(2) 2(2) -8(2)

C(20) 32(3) 51(3) 20(2) 4(2) 3(2) -4(2)

C(21) 15(2) 23(2) 16(2) -1(2) 5(2) 0(2)

I(2) 25(1) 29(1) 18(1) 1(1) 1(1) 4(1)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Table 5. Torsion angles [°] for mm7.

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

C(8A)-Fe(1)-C(1)-C(5) -105.6(19)

C(7A)-Fe(1)-C(1)-C(5) -149(2)

C(3)-Fe(1)-C(1)-C(5) 81.5(3)

C(4)-Fe(1)-C(1)-C(5) 37.1(3)

C(6)-Fe(1)-C(1)-C(5) 170.4(5)

C(10)-Fe(1)-C(1)-C(5) -44.5(6)

C(8)-Fe(1)-C(1)-C(5) -117.8(3)

C(9)-Fe(1)-C(1)-C(5) -76.2(3)

C(7)-Fe(1)-C(1)-C(5) -158.9(3)

C(9A)-Fe(1)-C(1)-C(5) -67(2)

C(8A)-Fe(1)-C(1)-C(2) 133.6(19)

C(7A)-Fe(1)-C(1)-C(2) 90(2)

C(3)-Fe(1)-C(1)-C(2) -39.3(2)

C(4)-Fe(1)-C(1)-C(2) -83.7(3)

C(6)-Fe(1)-C(1)-C(2) 49.5(6)

C(10)-Fe(1)-C(1)-C(2) -165.3(4)

C(8)-Fe(1)-C(1)-C(2) 121.4(3)

C(9)-Fe(1)-C(1)-C(2) 163.0(3)

C(5)-Fe(1)-C(1)-C(2) -120.8(4)

C(7)-Fe(1)-C(1)-C(2) 80.3(3)

C(9A)-Fe(1)-C(1)-C(2) 172.0(19)

C(5)-C(1)-C(2)-C(3) -0.5(5)

Fe(1)-C(1)-C(2)-C(3) 58.3(3)

C(5)-C(1)-C(2)-C(11) 176.7(4)

Fe(1)-C(1)-C(2)-C(11) -124.4(4)

C(5)-C(1)-C(2)-Fe(1) -58.9(3)

C(8A)-Fe(1)-C(2)-C(1) -64(3)

C(7A)-Fe(1)-C(2)-C(1) -106.3(18)

C(3)-Fe(1)-C(2)-C(1) 117.4(3)

C(4)-Fe(1)-C(2)-C(1) 80.1(3)

C(6)-Fe(1)-C(2)-C(1) -161.6(3)

C(10)-Fe(1)-C(2)-C(1) 162.7(5)

C(8)-Fe(1)-C(2)-C(1) -76.8(3)

C(9)-Fe(1)-C(2)-C(1) -41.7(6)

C(5)-Fe(1)-C(2)-C(1) 36.7(3)

C(7)-Fe(1)-C(2)-C(1) -119.4(3)

C(9A)-Fe(1)-C(2)-C(1) -29(8)

C(8A)-Fe(1)-C(2)-C(3) 179(3)

C(7A)-Fe(1)-C(2)-C(3) 136.4(18)

C(4)-Fe(1)-C(2)-C(3) -37.3(2)

C(6)-Fe(1)-C(2)-C(3) 81.0(3)

C(10)-Fe(1)-C(2)-C(3) 45.3(6)

C(1)-Fe(1)-C(2)-C(3) -117.4(3)

C(8)-Fe(1)-C(2)-C(3) 165.8(3)

C(9)-Fe(1)-C(2)-C(3) -159.0(5)

C(5)-Fe(1)-C(2)-C(3) -80.7(3)

C(7)-Fe(1)-C(2)-C(3) 123.2(3)

C(9A)-Fe(1)-C(2)-C(3) -147(8)

C(8A)-Fe(1)-C(2)-C(11) 58(3)

C(7A)-Fe(1)-C(2)-C(11) 15.6(18)

C(3)-Fe(1)-C(2)-C(11) -120.8(4)

C(4)-Fe(1)-C(2)-C(11) -158.1(4)

C(6)-Fe(1)-C(2)-C(11) -39.8(4)

C(10)-Fe(1)-C(2)-C(11) -75.4(7)

C(1)-Fe(1)-C(2)-C(11) 121.9(5)

C(8)-Fe(1)-C(2)-C(11) 45.0(4)

C(9)-Fe(1)-C(2)-C(11) 80.2(6)

C(5)-Fe(1)-C(2)-C(11) 158.5(4)

C(7)-Fe(1)-C(2)-C(11) 2.4(4)

C(9A)-Fe(1)-C(2)-C(11) 93(8)

C(1)-C(2)-C(3)-C(4) 0.3(5)

C(11)-C(2)-C(3)-C(4) -176.9(4)

Fe(1)-C(2)-C(3)-C(4) 59.6(3)

C(1)-C(2)-C(3)-Fe(1) -59.3(3)

C(11)-C(2)-C(3)-Fe(1) 123.5(4)

C(1)-C(2)-C(3)-I(1) 176.5(3)

C(11)-C(2)-C(3)-I(1) -0.7(6)

Fe(1)-C(2)-C(3)-I(1) -124.2(4)

C(7A)-Fe(1)-C(3)-C(4) 174.6(17)

C(6)-Fe(1)-C(3)-C(4) 119.6(3)

C(10)-Fe(1)-C(3)-C(4) 76.2(3)

C(1)-Fe(1)-C(3)-C(4) -81.6(3)

C(8)-Fe(1)-C(3)-C(4) -159.6(5)

C(9)-Fe(1)-C(3)-C(4) 38.7(6)

C(5)-Fe(1)-C(3)-C(4) -37.9(3)

C(7)-Fe(1)-C(3)-C(4) 162.2(3)

C(9A)-Fe(1)-C(3)-C(4) 46(3)

C(7A)-Fe(1)-C(3)-C(2) -65.1(17)

C(4)-Fe(1)-C(3)-C(2) 120.2(3)

C(6)-Fe(1)-C(3)-C(2) -120.1(2)

C(10)-Fe(1)-C(3)-C(2) -163.6(2)

C(1)-Fe(1)-C(3)-C(2) 38.6(2)

C(8)-Fe(1)-C(3)-C(2) -39.4(7)

C(9)-Fe(1)-C(3)-C(2) 158.9(5)

C(5)-Fe(1)-C(3)-C(2) 82.3(3)

C(7)-Fe(1)-C(3)-C(2) -77.6(3)

C(9A)-Fe(1)-C(3)-C(2) 166(3)

C(7A)-Fe(1)-C(3)-I(1) 64.7(17)

C(4)-Fe(1)-C(3)-I(1) -109.9(3)

C(6)-Fe(1)-C(3)-I(1) 9.7(3)

C(10)-Fe(1)-C(3)-I(1) -33.7(3)

C(1)-Fe(1)-C(3)-I(1) 168.5(3)

C(8)-Fe(1)-C(3)-I(1) 90.4(6)

C(9)-Fe(1)-C(3)-I(1) -71.2(6)

C(5)-Fe(1)-C(3)-I(1) -147.8(3)

C(7)-Fe(1)-C(3)-I(1) 52.3(3)

C(9A)-Fe(1)-C(3)-I(1) -64(3)

C(2)-C(3)-C(4)-C(5) 0.0(5)

Fe(1)-C(3)-C(4)-C(5) 60.0(3)

I(1)-C(3)-C(4)-C(5) -176.9(3)

C(2)-C(3)-C(4)-Fe(1) -60.0(3)

I(1)-C(3)-C(4)-Fe(1) 123.2(3)

C(8A)-Fe(1)-C(4)-C(5) 48(2)

C(3)-Fe(1)-C(4)-C(5) -118.5(4)

C(6)-Fe(1)-C(4)-C(5) 160.4(3)

C(10)-Fe(1)-C(4)-C(5) 119.2(3)

C(1)-Fe(1)-C(4)-C(5) -37.1(2)

C(8)-Fe(1)-C(4)-C(5) 45.5(6)

C(9)-Fe(1)-C(4)-C(5) 77.3(3)

C(7)-Fe(1)-C(4)-C(5) -170.2(5)

C(9A)-Fe(1)-C(4)-C(5) 85.6(11)

C(8A)-Fe(1)-C(4)-C(3) 167(2)

C(6)-Fe(1)-C(4)-C(3) -81.1(3)

C(10)-Fe(1)-C(4)-C(3) -122.3(3)

C(1)-Fe(1)-C(4)-C(3) 81.4(3)

C(8)-Fe(1)-C(4)-C(3) 164.0(4)

C(9)-Fe(1)-C(4)-C(3) -164.2(3)

C(5)-Fe(1)-C(4)-C(3) 118.5(4)

C(7)-Fe(1)-C(4)-C(3) -51.6(7)

C(9A)-Fe(1)-C(4)-C(3) -155.9(11)

C(3)-C(4)-C(5)-C(1) -0.4(5)

Fe(1)-C(4)-C(5)-C(1) 58.6(3)

C(3)-C(4)-C(5)-Fe(1) -59.0(3)

C(2)-C(1)-C(5)-C(4) 0.6(5)

Fe(1)-C(1)-C(5)-C(4) -58.4(3)

C(2)-C(1)-C(5)-Fe(1) 59.0(3)

C(8A)-Fe(1)-C(5)-C(4) -152.0(14)

C(7A)-Fe(1)-C(5)-C(4) 176(3)

C(3)-Fe(1)-C(5)-C(4) 38.5(2)

C(6)-Fe(1)-C(5)-C(4) -50.6(6)

C(10)-Fe(1)-C(5)-C(4) -78.4(3)

C(1)-Fe(1)-C(5)-C(4) 120.2(4)

C(8)-Fe(1)-C(5)-C(4) -160.2(3)

C(9)-Fe(1)-C(5)-C(4) -119.2(3)

C(7)-Fe(1)-C(5)-C(4) 171.9(4)

C(9A)-Fe(1)-C(5)-C(4) -109.1(7)

C(8A)-Fe(1)-C(5)-C(1) 87.8(14)

C(7A)-Fe(1)-C(5)-C(1) 56(3)

C(3)-Fe(1)-C(5)-C(1) -81.7(3)

C(4)-Fe(1)-C(5)-C(1) -120.2(4)

C(6)-Fe(1)-C(5)-C(1) -170.9(5)

C(10)-Fe(1)-C(5)-C(1) 161.4(3)

C(8)-Fe(1)-C(5)-C(1) 79.6(3)

C(9)-Fe(1)-C(5)-C(1) 120.5(3)

C(7)-Fe(1)-C(5)-C(1) 51.7(6)

C(9A)-Fe(1)-C(5)-C(1) 130.6(7)

C(8A)-Fe(1)-C(6)-C(7) -48.3(17)

C(7A)-Fe(1)-C(6)-C(7) -8(2)

C(3)-Fe(1)-C(6)-C(7) 122.4(3)

C(4)-Fe(1)-C(6)-C(7) 166.2(3)

C(10)-Fe(1)-C(6)-C(7) -119.0(4)

C(1)-Fe(1)-C(6)-C(7) 41.1(7)

C(8)-Fe(1)-C(6)-C(7) -37.4(3)

C(9)-Fe(1)-C(6)-C(7) -81.1(3)

C(5)-Fe(1)-C(6)-C(7) -156.5(5)

C(9A)-Fe(1)-C(6)-C(7) -91.1(13)

C(8A)-Fe(1)-C(6)-C(10) 70.7(17)

C(7A)-Fe(1)-C(6)-C(10) 110(2)

C(3)-Fe(1)-C(6)-C(10) -118.6(3)

C(4)-Fe(1)-C(6)-C(10) -74.9(3)

C(1)-Fe(1)-C(6)-C(10) 160.1(5)

C(8)-Fe(1)-C(6)-C(10) 81.5(3)

C(9)-Fe(1)-C(6)-C(10) 37.8(3)

C(5)-Fe(1)-C(6)-C(10) -37.5(7)

C(7)-Fe(1)-C(6)-C(10) 119.0(4)

C(9A)-Fe(1)-C(6)-C(10) 27.9(13)

C(10)-C(6)-C(7)-C(8) -0.5(6)

Fe(1)-C(6)-C(7)-C(8) 59.1(3)

C(10)-C(6)-C(7)-Fe(1) -59.5(4)

C(8A)-Fe(1)-C(7)-C(6) 113.4(16)

C(7A)-Fe(1)-C(7)-C(6) 148(8)

C(3)-Fe(1)-C(7)-C(6) -78.4(3)

C(4)-Fe(1)-C(7)-C(6) -38.8(7)

C(10)-Fe(1)-C(7)-C(6) 38.0(3)

C(1)-Fe(1)-C(7)-C(6) -164.5(3)

C(8)-Fe(1)-C(7)-C(6) 119.6(4)

C(9)-Fe(1)-C(7)-C(6) 81.9(3)

C(5)-Fe(1)-C(7)-C(6) 158.0(4)

C(9A)-Fe(1)-C(7)-C(6) 72.3(7)

C(8A)-Fe(1)-C(7)-C(8) -6.2(16)

C(7A)-Fe(1)-C(7)-C(8) 28(8)

C(3)-Fe(1)-C(7)-C(8) 162.0(3)

C(4)-Fe(1)-C(7)-C(8) -158.4(5)

C(6)-Fe(1)-C(7)-C(8) -119.6(4)

C(10)-Fe(1)-C(7)-C(8) -81.6(3)

C(1)-Fe(1)-C(7)-C(8) 75.9(3)

C(9)-Fe(1)-C(7)-C(8) -37.7(3)

C(5)-Fe(1)-C(7)-C(8) 38.4(6)

C(9A)-Fe(1)-C(7)-C(8) -47.3(7)

C(6)-C(7)-C(8)-C(9) 0.7(6)

Fe(1)-C(7)-C(8)-C(9) 59.6(4)

C(6)-C(7)-C(8)-Fe(1) -59.0(3)

C(8A)-Fe(1)-C(8)-C(9) 37(7)

C(7A)-Fe(1)-C(8)-C(9) -131(2)

C(3)-Fe(1)-C(8)-C(9) -169.5(5)

C(4)-Fe(1)-C(8)-C(9) 44.5(6)

C(6)-Fe(1)-C(8)-C(9) -81.6(3)

C(10)-Fe(1)-C(8)-C(9) -37.5(3)

C(1)-Fe(1)-C(8)-C(9) 118.8(3)

C(5)-Fe(1)-C(8)-C(9) 77.0(3)

C(7)-Fe(1)-C(8)-C(9) -119.0(4)

C(9A)-Fe(1)-C(8)-C(9) -7(2)

C(8A)-Fe(1)-C(8)-C(7) 156(7)

C(7A)-Fe(1)-C(8)-C(7) -12(2)

C(3)-Fe(1)-C(8)-C(7) -50.5(7)

C(4)-Fe(1)-C(8)-C(7) 163.5(4)

C(6)-Fe(1)-C(8)-C(7) 37.5(3)

C(10)-Fe(1)-C(8)-C(7) 81.5(3)

C(1)-Fe(1)-C(8)-C(7) -122.2(3)

C(9)-Fe(1)-C(8)-C(7) 119.0(4)

C(5)-Fe(1)-C(8)-C(7) -164.0(3)

C(9A)-Fe(1)-C(8)-C(7) 112(2)

C(7)-C(8)-C(9)-C(10) -0.6(6)

Fe(1)-C(8)-C(9)-C(10) 59.0(4)

C(7)-C(8)-C(9)-Fe(1) -59.7(3)

C(8A)-Fe(1)-C(9)-C(8) -14(4)

C(7A)-Fe(1)-C(9)-C(8) 25.1(15)

C(3)-Fe(1)-C(9)-C(8) 171.0(4)

C(4)-Fe(1)-C(9)-C(8) -160.6(3)

C(6)-Fe(1)-C(9)-C(8) 81.6(3)

C(10)-Fe(1)-C(9)-C(8) 119.6(4)

C(1)-Fe(1)-C(9)-C(8) -78.7(3)

C(5)-Fe(1)-C(9)-C(8) -119.5(3)

C(7)-Fe(1)-C(9)-C(8) 37.8(3)

C(9A)-Fe(1)-C(9)-C(8) 149(11)

C(8A)-Fe(1)-C(9)-C(10) -133(4)

C(7A)-Fe(1)-C(9)-C(10) -94.5(16)

C(3)-Fe(1)-C(9)-C(10) 51.3(7)

C(4)-Fe(1)-C(9)-C(10) 79.8(3)

C(6)-Fe(1)-C(9)-C(10) -38.0(3)

C(1)-Fe(1)-C(9)-C(10) 161.7(3)

C(8)-Fe(1)-C(9)-C(10) -119.6(4)

C(5)-Fe(1)-C(9)-C(10) 120.8(3)

C(7)-Fe(1)-C(9)-C(10) -81.8(3)

C(9A)-Fe(1)-C(9)-C(10) 29(11)

C(8)-C(9)-C(10)-C(6) 0.3(6)

Fe(1)-C(9)-C(10)-C(6) 59.5(3)

C(8)-C(9)-C(10)-Fe(1) -59.1(4)

C(7)-C(6)-C(10)-C(9) 0.1(6)

Fe(1)-C(6)-C(10)-C(9) -59.7(4)

C(7)-C(6)-C(10)-Fe(1) 59.7(3)

C(8A)-Fe(1)-C(10)-C(9) 25(2)

C(7A)-Fe(1)-C(10)-C(9) 69(2)

C(3)-Fe(1)-C(10)-C(9) -159.4(3)

C(4)-Fe(1)-C(10)-C(9) -117.6(3)

C(6)-Fe(1)-C(10)-C(9) 118.9(4)

C(1)-Fe(1)-C(10)-C(9) -43.8(6)

C(8)-Fe(1)-C(10)-C(9) 37.4(3)

C(5)-Fe(1)-C(10)-C(9) -76.0(3)

C(7)-Fe(1)-C(10)-C(9) 81.1(3)

C(9A)-Fe(1)-C(10)-C(9) -9(3)

C(8A)-Fe(1)-C(10)-C(6) -94(2)

C(7A)-Fe(1)-C(10)-C(6) -50(2)

C(3)-Fe(1)-C(10)-C(6) 81.7(3)

C(4)-Fe(1)-C(10)-C(6) 123.6(3)

C(1)-Fe(1)-C(10)-C(6) -162.7(4)

C(8)-Fe(1)-C(10)-C(6) -81.5(3)

C(9)-Fe(1)-C(10)-C(6) -118.9(4)

C(5)-Fe(1)-C(10)-C(6) 165.1(3)

C(7)-Fe(1)-C(10)-C(6) -37.7(3)

C(9A)-Fe(1)-C(10)-C(6) -128(3)

C(1)-C(2)-C(11)-O(1) 159.8(4)

C(3)-C(2)-C(11)-O(1) -23.6(5)

Fe(1)-C(2)-C(11)-O(1) 67.0(4)

C(1)-C(2)-C(11)-C(21) 40.0(6)

C(3)-C(2)-C(11)-C(21) -143.4(4)

Fe(1)-C(2)-C(11)-C(21) -52.8(5)

C(1)-C(2)-C(11)-C(12) -86.4(5)

C(3)-C(2)-C(11)-C(12) 90.3(5)

Fe(1)-C(2)-C(11)-C(12) -179.1(3)

O(1)-C(11)-C(12)-C(13) 55.3(4)

C(2)-C(11)-C(12)-C(13) -60.8(4)

C(21)-C(11)-C(12)-C(13) 171.9(3)

O(1)-C(11)-C(12)-C(15) -63.9(4)

C(2)-C(11)-C(12)-C(15) -180.0(4)

C(21)-C(11)-C(12)-C(15) 52.7(4)

O(1)-C(11)-C(12)-C(14) 175.5(3)

C(2)-C(11)-C(12)-C(14) 59.3(4)

C(21)-C(11)-C(12)-C(14) -67.9(4)

C(21)-C(17)-C(18)-C(19) -1.1(7)

C(17)-C(18)-C(19)-C(20) -0.2(7)

C(18)-C(19)-C(20)-C(16) 0.6(8)

C(21)-C(16)-C(20)-C(19) 0.1(8)

C(20)-C(16)-C(21)-C(17) -1.3(7)

C(20)-C(16)-C(21)-C(11) 179.9(4)

C(18)-C(17)-C(21)-C(16) 1.8(6)

C(18)-C(17)-C(21)-C(11) -179.4(4)

O(1)-C(11)-C(21)-C(16) -175.2(4)

C(2)-C(11)-C(21)-C(16) -55.7(5)

C(12)-C(11)-C(21)-C(16) 70.7(5)

O(1)-C(11)-C(21)-C(17) 6.0(5)

C(2)-C(11)-C(21)-C(17) 125.5(4)

C(12)-C(11)-C(21)-C(17) -108.1(4)

C(8A)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) -38.9(13)

C(3)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) 131(2)

C(4)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) 175(3)

C(6)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) -155(9)

C(10)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) -114(2)

C(1)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) 44(3)

C(8)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) -29(2)

C(9)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) -72.8(19)

C(5)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) -132(10)

C(7)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) 9(4)

C(9A)-Fe(1)-C(6A)-C(7A) -83.1(19)

C(8A)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 81(2)

C(7A)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 119.7(17)

C(3)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) -109.4(18)

C(4)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) -66(3)

C(6)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) -35(9)

C(10)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 5.4(18)

C(1)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 164(3)

C(8)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 90.8(19)

C(9)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 46.9(17)

C(5)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) -12(10)

C(7)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 128(4)

C(9A)-Fe(1)-C(6A)-C(10A) 36.6(12)

C(10A)-C(6A)-C(7A)-C(8A) 0.0

Fe(1)-C(6A)-C(7A)-C(8A) 60(3)

C(10A)-C(6A)-C(7A)-Fe(1) -60(3)

C(8A)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) 118.2(16)

C(3)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) -74(2)

C(6)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) 6(2)

C(10)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) 45.9(17)

C(1)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) -157.4(18)

C(8)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) 122(3)

C(9)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) 88.6(18)

C(5)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) 167(3)

C(7)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) -20(7)

C(9A)-Fe(1)-C(7A)-C(6A) 79.9(18)

C(3)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) 167.5(17)

C(6)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) -112(2)

C(10)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) -72.3(18)

C(1)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) 84.4(19)

C(8)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) 4(2)

C(9)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) -29.6(17)

C(5)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) 48(3)

C(7)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) -139(8)

C(9A)-Fe(1)-C(7A)-C(8A) -38.3(13)

C(6A)-C(7A)-C(8A)-C(9A) 0.0

Fe(1)-C(7A)-C(8A)-C(9A) 62(3)

C(6A)-C(7A)-C(8A)-Fe(1) -62(3)

C(4)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) 176(2)

C(6)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) 48.8(17)

C(10)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) 91.4(18)

C(1)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) -110.6(17)

C(8)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) -9(6)

C(9)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) 123(4)

C(5)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) -152.7(16)

C(7)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) 10.5(16)

C(9A)-Fe(1)-C(8A)-C(7A) 118.2(15)

C(7A)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) -118.2(15)

C(4)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) 58(2)

C(6)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) -69.4(17)

C(10)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) -26.8(18)

C(1)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) 131.2(17)

C(8)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) -127(7)

C(9)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) 5(3)

C(5)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) 89.1(17)

C(7)-Fe(1)-C(8A)-C(9A) -107.7(19)

C(7A)-C(8A)-C(9A)-C(10A) 0.0

Fe(1)-C(8A)-C(9A)-C(10A) 60(3)

C(7A)-C(8A)-C(9A)-Fe(1) -60(3)

C(8A)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) -119.7(16)

C(7A)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) -81(2)

C(3)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) 62(4)

C(4)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) 93.3(19)

C(6)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) -24.7(16)

C(10)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) 10(3)

C(1)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) 173.8(17)

C(8)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) -107(2)

C(9)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) -134(12)

C(5)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) 135.5(17)

C(7)-Fe(1)-C(9A)-C(10A) -67.9(17)

C(7A)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) 38.9(13)

C(3)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) -178(4)

C(4)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) -147(2)

C(6)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) 95(2)

C(10)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) 130(3)

C(1)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) -66(2)

C(8)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) 13(3)

C(9)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) -14(12)

C(5)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) -105(2)

C(7)-Fe(1)-C(9A)-C(8A) 52(2)

C(7A)-C(6A)-C(10A)-C(9A) 0.0

Fe(1)-C(6A)-C(10A)-C(9A) -57(3)

C(7A)-C(6A)-C(10A)-I(2) 174(7)

Fe(1)-C(6A)-C(10A)-I(2) 117(6)

C(7A)-C(6A)-C(10A)-Fe(1) 57(3)

C(8A)-C(9A)-C(10A)-C(6A) 0.0

Fe(1)-C(9A)-C(10A)-C(6A) 57(3)

C(8A)-C(9A)-C(10A)-I(2) -174(6)

Fe(1)-C(9A)-C(10A)-I(2) -117(5)

C(8A)-C(9A)-C(10A)-Fe(1) -57(3)

C(8A)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -83(2)

C(7A)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -37.8(15)

C(3)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) 91(2)

C(4)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) 136(2)

C(6)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) 13(3)

C(10)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -155(9)

C(1)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -142(6)

C(8)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -70(2)

C(9)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -111(3)

C(5)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) 177(2)

C(7)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -26(2)

C(9A)-Fe(1)-C(10A)-C(6A) -120.7(15)

C(8A)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) 37.8(15)

C(7A)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) 83(2)

C(3)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) -148(2)

C(4)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) -104(2)

C(6)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) 133(3)

C(10)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) -34(8)

C(1)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) -22(6)

C(8)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) 51(2)

C(9)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) 10(2)

C(5)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) -62(3)

C(7)-Fe(1)-C(10A)-C(9A) 95(2)

C(8A)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 154.9(14)

C(7A)-Fe(1)-C(10A)-I(2) -160.1(14)

C(3)-Fe(1)-C(10A)-I(2) -31(2)

C(4)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 14(2)

C(6)-Fe(1)-C(10A)-I(2) -110(3)

C(10)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 83(9)

C(1)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 95(6)

C(8)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 168(2)

C(9)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 127(3)

C(5)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 55(3)

C(7)-Fe(1)-C(10A)-I(2) -148(2)

C(9A)-Fe(1)-C(10A)-I(2) 117(2)

C(6A)-C(10A)-I(2)-I(2)#1 -38(8)

C(9A)-C(10A)-I(2)-I(2)#1 135(4)

Fe(1)-C(10A)-I(2)-I(2)#1 50(4)

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

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,-y+1,-z