

Table S1. Positional parameters and B_{eq} for 1.

ATOM	X	Y	Z	B (EQ)
Fe(1)	0.64487(9)	0.59790(7)	0.24054(8)	2.75(3)
Fe(2)	1.89323(8)	0.25609(7)	0.53217(7)	2.18(2)
O(13A)	0.6518(6)	0.7843(4)	0.3083(5)	5.3(2)
O(13B)	1.8211(5)	0.2867(4)	0.6931(4)	3.9(1)
O(14A)	0.6781(6)	0.6392(5)	0.0721(5)	5.5(2)
O(14B)	1.9001(6)	0.4498(4)	0.4838(4)	4.7(2)
C(1)	0.7868(7)	0.5857(5)	0.2611(6)	3.2(2)
C(2)	0.8787(6)	0.5706(5)	0.2748(5)	2.7(2)
C(3)	0.9766(6)	0.5432(5)	0.2936(5)	2.5(1)
C(4)	1.0617(6)	0.5139(5)	0.3067(6)	3.0(2)
C(5)	1.1549(6)	0.4769(5)	0.3237(6)	2.9(2)
C(6)	1.2362(7)	0.4396(6)	0.3414(5)	3.0(2)
C(7)	1.3244(7)	0.3976(5)	0.3644(6)	3.3(2)
C(8)	1.4032(7)	0.3578(5)	0.3870(5)	3.0(2)
C(9)	1.4922(7)	0.3178(6)	0.4144(6)	3.1(2)
C(10)	1.5717(7)	0.2888(5)	0.4413(6)	3.5(2)
C(11)	1.6680(7)	0.2650(5)	0.4714(6)	3.2(2)
C(12)	1.7552(6)	0.2555(5)	0.4951(5)	3.2(2)
C(13A)	0.6483(7)	0.7115(6)	0.2783(6)	3.5(2)
C(13B)	1.8501(6)	0.2753(5)	0.6303(5)	2.5(1)
C(14A)	0.6651(7)	0.6263(6)	0.1394(7)	3.6(2)
C(14B)	1.8986(7)	0.3737(6)	0.5053(6)	3.3(2)
C(20A)	0.5974(6)	0.5209(5)	0.3397(6)	3.0(2)
C(20B)	2.0160(6)	0.1736(5)	0.5734(5)	2.2(1)
C(21A)	0.6324(7)	0.4585(5)	0.2807(6)	3.1(2)
C(21B)	2.0502(6)	0.2335(5)	0.5123(5)	2.5(1)
C(22A)	0.5730(7)	0.4702(5)	0.2100(6)	3.3(2)
C(22B)	1.9914(6)	0.2136(5)	0.4404(5)	2.5(1)
C(23A)	0.4963(7)	0.5407(6)	0.2262(6)	3.7(2)
C(23B)	1.9231(6)	0.1395(5)	0.4579(5)	2.3(1)
C(24A)	0.5116(6)	0.5701(6)	0.3067(6)	3.3(2)
C(24B)	1.9351(6)	0.1162(4)	0.5404(5)	2.4(1)
C(25A)	0.6381(9)	0.5301(6)	0.4238(6)	4.5(2)
C(25B)	2.0611(7)	0.1689(6)	0.6566(6)	3.6(2)
C(26A)	0.7167(8)	0.3883(6)	0.2923(7)	4.4(2)
C(26B)	2.1377(7)	0.3018(5)	0.5185(6)	3.4(2)
C(27A)	0.5809(9)	0.4134(7)	0.1353(7)	5.4(2)
C(27B)	2.0075(8)	0.2547(6)	0.3605(6)	4.2(2)
C(28A)	0.4098(8)	0.5683(9)	0.1708(8)	6.1(3)
C(28B)	1.8525(7)	0.0934(6)	0.4000(5)	3.4(2)
C(29A)	0.4443(8)	0.6370(7)	0.3493(8)	5.5(3)
C(29B)	1.8811(7)	0.0389(5)	0.5823(6)	3.6(2)

Table S2. Anisotropic thermal parameters for 1.

ATOM	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Fe(1)	0.0222(6)	0.0369(5)	0.0453(8)	0.0046(5)	-0.0022(5)	0.0037(5)
Fe(2)	0.0222(6)	0.0310(5)	0.0295(6)	0.0035(5)	-0.0039(4)	0.0006(5)
O(13A)	0.073(6)	0.050(4)	0.081(6)	0.003(4)	0.004(5)	-0.007(4)
O(13B)	0.051(4)	0.054(3)	0.042(4)	-0.001(3)	0.012(4)	-0.004(3)
O(14A)	0.083(6)	0.068(4)	0.059(5)	0.013(4)	0.014(5)	0.018(4)
O(14B)	0.063(5)	0.040(3)	0.073(5)	0.003(3)	-0.011(4)	0.013(3)
C(1)	0.034(5)	0.030(4)	0.056(6)	0.007(3)	-0.004(4)	-0.004(4)
C(2)	0.031(5)	0.035(4)	0.037(5)	0.004(3)	-0.006(4)	-0.007(3)
C(3)	0.027(4)	0.038(4)	0.032(5)	-0.002(3)	-0.003(4)	-0.004(3)
C(4)	0.026(5)	0.037(4)	0.052(6)	0.005(3)	-0.010(4)	-0.005(4)
C(5)	0.025(5)	0.044(4)	0.040(5)	0.002(3)	-0.007(4)	-0.005(4)
C(6)	0.027(5)	0.045(4)	0.042(6)	-0.001(4)	-0.004(4)	-0.003(4)
C(7)	0.032(5)	0.032(3)	0.060(6)	-0.002(4)	-0.006(4)	0.005(4)
C(8)	0.029(5)	0.042(4)	0.042(6)	0.001(4)	-0.011(4)	-0.007(4)
C(9)	0.022(4)	0.052(4)	0.044(6)	0.003(4)	-0.006(4)	-0.006(4)
C(10)	0.033(5)	0.038(4)	0.061(7)	0.003(4)	-0.008(5)	-0.001(4)
C(11)	0.029(5)	0.047(4)	0.043(5)	0.007(4)	0.000(4)	0.003(4)
C(12)	0.031(5)	0.040(4)	0.049(5)	0.007(4)	-0.005(4)	0.002(4)
C(13A)	0.032(5)	0.049(5)	0.053(6)	0.005(4)	-0.003(5)	0.003(4)
C(13B)	0.025(4)	0.034(4)	0.036(5)	0.001(3)	0.003(4)	0.003(3)
C(14A)	0.036(5)	0.045(5)	0.057(7)	0.008(4)	0.003(5)	0.006(4)
C(14B)	0.035(5)	0.050(5)	0.040(6)	-0.003(4)	-0.006(4)	0.001(4)
C(20A)	0.025(4)	0.042(4)	0.047(6)	-0.002(3)	0.004(4)	-0.005(4)
C(20B)	0.024(4)	0.038(4)	0.023(4)	0.007(3)	-0.001(3)	0.002(3)
C(21A)	0.035(5)	0.037(4)	0.047(6)	0.003(4)	0.000(4)	0.002(4)
C(21B)	0.025(4)	0.033(4)	0.038(5)	0.002(3)	0.002(4)	0.000(3)
C(22A)	0.037(5)	0.043(4)	0.045(6)	-0.007(4)	-0.002(5)	0.003(4)
C(22B)	0.022(4)	0.037(4)	0.035(5)	0.006(3)	-0.002(4)	-0.004(3)
C(23A)	0.027(5)	0.062(5)	0.051(7)	-0.002(4)	-0.006(5)	0.014(4)
C(23B)	0.023(4)	0.041(4)	0.024(4)	0.001(3)	-0.007(3)	0.001(3)
C(24A)	0.017(4)	0.045(4)	0.065(7)	0.007(3)	0.002(4)	0.003(4)
C(24B)	0.024(4)	0.028(3)	0.038(5)	0.007(3)	0.005(4)	0.002(3)
C(25A)	0.063(7)	0.057(5)	0.052(7)	-0.002(5)	-0.003(6)	-0.007(4)
C(25B)	0.042(6)	0.046(4)	0.048(6)	0.002(4)	-0.006(5)	0.004(4)
C(26A)	0.050(6)	0.037(4)	0.079(8)	0.007(4)	0.014(6)	0.010(5)
C(26B)	0.034(5)	0.048(4)	0.047(6)	-0.010(4)	-0.004(4)	0.000(4)
C(27A)	0.061(7)	0.071(6)	0.073(8)	-0.023(6)	0.013(6)	-0.012(6)
C(27B)	0.062(7)	0.056(5)	0.042(5)	-0.009(5)	0.006(5)	0.001(5)
C(28A)	0.025(5)	0.107(8)	0.10(1)	-0.004(6)	-0.027(6)	0.026(7)
C(28B)	0.037(5)	0.051(5)	0.042(5)	-0.007(4)	-0.009(4)	-0.006(4)
C(29A)	0.045(6)	0.058(5)	0.11(1)	0.012(5)	0.037(7)	0.005(6)
C(29B)	0.044(6)	0.038(4)	0.055(6)	0.004(4)	0.010(5)	0.007(4)

Table S3. Interatomic distances (Å) and bond angles (deg) for **1**.

ATOM	ATOM	DISTANCE	ATOM	ATOM	DISTANCE
Fe(1)	C(1)	1.878(9)	C(7)	C(8)	1.23(1)
Fe(1)	C(13A)	1.753(9)	C(8)	C(9)	1.36(1)
Fe(1)	C(14A)	1.76(1)	C(9)	C(10)	1.19(1)
Fe(1)	C(20A)	2.096(9)	C(10)	C(11)	1.38(1)
Fe(1)	C(21A)	2.122(8)	C(11)	C(12)	1.20(1)
Fe(1)	C(22A)	2.119(8)	C(20A)	C(21A)	1.42(1)
Fe(1)	C(23A)	2.109(9)	C(20A)	C(24A)	1.42(1)
Fe(1)	C(24A)	2.110(9)	C(20A)	C(25A)	1.50(1)
Fe(2)	C(12)	1.888(8)	C(20B)	C(21B)	1.41(1)
Fe(2)	C(13B)	1.764(9)	C(20B)	C(24B)	1.44(1)
Fe(2)	C(14B)	1.752(8)	C(20B)	C(25B)	1.50(1)
Fe(2)	C(20B)	2.096(8)	C(21A)	C(22A)	1.41(1)
Fe(2)	C(21B)	2.098(8)	C(21A)	C(26A)	1.50(1)
Fe(2)	C(22B)	2.103(8)	C(21B)	C(22B)	1.44(1)
Fe(2)	C(23B)	2.127(8)	C(21B)	C(26B)	1.51(1)
Fe(2)	C(24B)	2.089(7)	C(22A)	C(23A)	1.45(1)
O(13A)	C(13A)	1.16(1)	C(22A)	C(27A)	1.50(1)
O(13B)	C(13B)	1.13(1)	C(22B)	C(23B)	1.42(1)
O(14A)	C(14A)	1.16(1)	C(22B)	C(27B)	1.48(1)
O(14B)	C(14B)	1.15(1)	C(23A)	C(24A)	1.42(1)
C(1)	C(2)	1.23(1)	C(23A)	C(28A)	1.50(1)
C(2)	C(3)	1.36(1)	C(23B)	C(24B)	1.42(1)
C(3)	C(4)	1.20(1)	C(23B)	C(28B)	1.48(1)
C(4)	C(5)	1.35(1)	C(24A)	C(29A)	1.49(1)
C(5)	C(6)	1.22(1)	C(24B)	C(29B)	1.50(1)
C(6)	C(7)	1.35(1)			

ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE	ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE
C(1)	Fe(1)	C(13A)	90.2(4)	C(22A)	Fe(1)	C(24A)	66.4(3)
C(1)	Fe(1)	C(14A)	91.9(4)	C(23A)	Fe(1)	C(24A)	39.3(4)
C(1)	Fe(1)	C(20A)	96.2(4)	C(12)	Fe(2)	C(13B)	89.4(4)
C(1)	Fe(1)	C(21A)	86.2(3)	C(12)	Fe(2)	C(14B)	87.8(4)
C(1)	Fe(1)	C(22A)	112.9(3)	C(12)	Fe(2)	C(20B)	145.0(3)
C(1)	Fe(1)	C(23A)	151.4(3)	C(12)	Fe(2)	C(21B)	150.3(4)
C(1)	Fe(1)	C(24A)	134.4(4)	C(12)	Fe(2)	C(22B)	110.2(4)
C(13A)	Fe(1)	C(14A)	97.2(4)	C(12)	Fe(2)	C(23B)	89.3(3)
C(13A)	Fe(1)	C(20A)	102.4(4)	C(12)	Fe(2)	C(24B)	105.2(3)
C(13A)	Fe(1)	C(21A)	140.3(4)	C(13B)	Fe(2)	C(14B)	95.8(4)
C(13A)	Fe(1)	C(22A)	154.6(4)	C(13B)	Fe(2)	C(20B)	92.1(3)
C(13A)	Fe(1)	C(23A)	115.0(4)	C(13B)	Fe(2)	C(21B)	119.9(4)
C(13A)	Fe(1)	C(24A)	90.2(4)	C(13B)	Fe(2)	C(22B)	158.5(3)
C(14A)	Fe(1)	C(20A)	158.7(4)	C(13B)	Fe(2)	C(23B)	136.9(3)
C(14A)	Fe(1)	C(21A)	122.4(4)	C(13B)	Fe(2)	C(24B)	100.2(3)
C(14A)	Fe(1)	C(22A)	92.4(4)	C(14B)	Fe(2)	C(20B)	126.7(4)
C(14A)	Fe(1)	C(23A)	97.7(4)	C(14B)	Fe(2)	C(21B)	93.8(4)
C(14A)	Fe(1)	C(24A)	133.2(4)	C(14B)	Fe(2)	C(22B)	93.8(4)
C(20A)	Fe(1)	C(21A)	39.2(3)	C(14B)	Fe(2)	C(23B)	127.1(4)
C(20A)	Fe(1)	C(22A)	66.2(3)	C(14B)	Fe(2)	C(24B)	159.3(4)
C(20A)	Fe(1)	C(23A)	66.5(4)	C(20B)	Fe(2)	C(21B)	39.4(3)
C(20A)	Fe(1)	C(24A)	39.6(3)	C(20B)	Fe(2)	C(22B)	66.8(3)
C(21A)	Fe(1)	C(22A)	38.8(4)	C(20B)	Fe(2)	C(23B)	66.4(3)
C(21A)	Fe(1)	C(23A)	65.9(3)	C(20B)	Fe(2)	C(24B)	40.2(3)
C(21A)	Fe(1)	C(24A)	65.6(3)	C(21B)	Fe(2)	C(22B)	40.1(3)
C(22A)	Fe(1)	C(23A)	40.1(3)	C(21B)	Fe(2)	C(23B)	66.2(3)

Table S3. Interatomic distances (Å) and bond angles (deg) for 1. (cont'd.)

ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE	ATOM	ATOM	ATOM	ANGLE
C(21B)	Fe(2)	C(24B)	66.9(3)	Fe(2)	C(20B)	C(21B)	70.4(4)
C(22B)	Fe(2)	C(23B)	39.3(3)	Fe(2)	C(20B)	C(24B)	69.6(4)
C(22B)	Fe(2)	C(24B)	66.8(3)	Fe(2)	C(20B)	C(25B)	127.8(6)
C(23B)	Fe(2)	C(24B)	39.5(3)	C(21B)	C(20B)	C(24B)	108.0(7)
Fe(1)	C(1)	C(2)	175.2(6)	C(21B)	C(20B)	C(25B)	125.0(7)
C(1)	C(2)	C(3)	172.7(8)	C(24B)	C(20B)	C(25B)	126.9(7)
C(2)	C(3)	C(4)	175.5(8)	Fe(1)	C(21A)	C(20A)	69.4(4)
C(3)	C(4)	C(5)	176.8(9)	Fe(1)	C(21A)	C(22A)	70.5(5)
C(4)	C(5)	C(6)	176.3(9)	Fe(1)	C(21A)	C(26A)	128.1(6)
C(5)	C(6)	C(7)	177(1)	C(20A)	C(21A)	C(22A)	109.3(7)
C(6)	C(7)	C(8)	178(1)	C(20A)	C(21A)	C(26A)	125.5(9)
C(7)	C(8)	C(9)	176.9(9)	C(22A)	C(21A)	C(26A)	125.2(8)
C(8)	C(9)	C(10)	175.1(9)	Fe(2)	C(21B)	C(20B)	70.2(4)
C(9)	C(10)	C(11)	173.8(9)	Fe(2)	C(21B)	C(22B)	70.2(4)
C(10)	C(11)	C(12)	171.7(9)	Fe(2)	C(21B)	C(26B)	128.6(5)
Fe(2)	C(12)	C(11)	173.3(7)	C(20B)	C(21B)	C(22B)	108.2(6)
Fe(1)	C(13A)	O(13A)	175.5(9)	C(20B)	C(21B)	C(26B)	126.5(7)
Fe(2)	C(13B)	O(13B)	178.9(7)	C(22B)	C(21B)	C(26B)	125.2(7)
Fe(1)	C(14A)	O(14A)	175.9(8)	Fe(1)	C(22A)	C(21A)	70.7(5)
Fe(2)	C(14B)	O(14B)	176.5(8)	Fe(1)	C(22A)	C(23A)	69.5(5)
Fe(1)	C(20A)	C(21A)	71.4(5)	Fe(1)	C(22A)	C(27A)	129.6(7)
Fe(1)	C(20A)	C(24A)	70.7(5)	C(21A)	C(22A)	C(23A)	107.1(8)
Fe(1)	C(20A)	C(25A)	126.2(6)	C(21A)	C(22A)	C(27A)	126.0(8)
C(21A)	C(20A)	C(24A)	107.7(8)	C(23A)	C(22A)	C(27A)	126.6(9)
C(21A)	C(20A)	C(25A)	126.7(8)	Fe(2)	C(22B)	C(21B)	69.8(5)
C(24A)	C(20A)	C(25A)	125.5(8)	Fe(2)	C(22B)	C(23B)	71.3(5)
Fe(2)	C(22B)	C(27B)	129.7(6)	C(20B)	C(24B)	C(29B)	126.3(7)
C(21B)	C(22B)	C(23B)	107.6(7)	C(23B)	C(24B)	C(29B)	125.7(7)
C(21B)	C(22B)	C(27B)	126.3(7)				
C(23B)	C(22B)	C(27B)	125.8(8)				
Fe(1)	C(23A)	C(22A)	70.3(5)				
Fe(1)	C(23A)	C(24A)	70.4(5)				
Fe(1)	C(23A)	C(28A)	130.0(7)				
C(22A)	C(23A)	C(24A)	107.5(8)				
C(22A)	C(23A)	C(28A)	125.5(9)				
C(24A)	C(23A)	C(28A)	126.7(9)				
Fe(2)	C(23B)	C(22B)	69.5(4)				
Fe(2)	C(23B)	C(24B)	68.8(4)				
Fe(2)	C(23B)	C(28B)	128.2(6)				
C(22B)	C(23B)	C(24B)	108.5(7)				
C(22B)	C(23B)	C(28B)	125.8(7)				
C(24B)	C(23B)	C(28B)	125.7(7)				
Fe(1)	C(24A)	C(20A)	69.7(5)				
Fe(1)	C(24A)	C(23A)	70.3(5)				
Fe(1)	C(24A)	C(29A)	128.5(6)				
C(20A)	C(24A)	C(23A)	108.3(8)				
C(20A)	C(24A)	C(29A)	126.7(9)				
C(23A)	C(24A)	C(29A)	124.9(8)				
Fe(2)	C(24B)	C(20B)	70.1(4)				
Fe(2)	C(24B)	C(23B)	71.7(4)				
Fe(2)	C(24B)	C(29B)	128.5(6)				
C(20B)	C(24B)	C(23B)	107.7(6)				

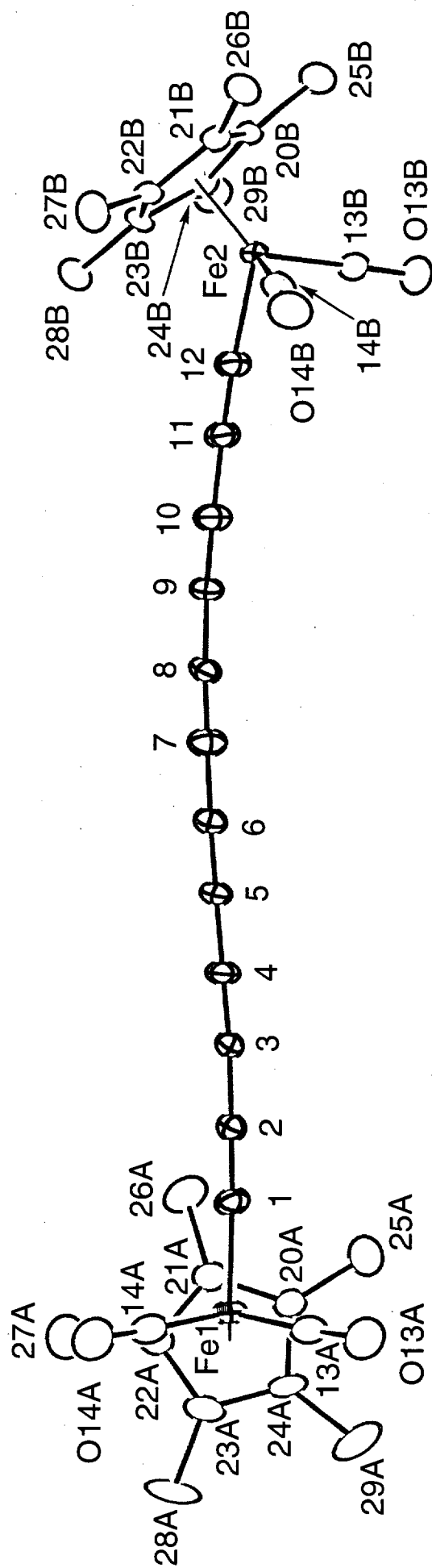


Figure S1. Atomic numbering scheme for **1**. Labels without atom names are for carbon atoms.