

Electronic Supplementary Information

to

**Binding of ligands containing carbonyl and phenol groups to
iron(III): New Fe₆, Fe₁₀ and Fe₁₂ coordination clusters**

Alexandros A. Kitos,^a Constantina Papatriantafyllopoulou,^{b,c} Anastasios J. Tasiopoulos,^b
Spyros P. Perlepes,^a Albert Escuer^d and Vassilios Nastopoulos^a

^{a.} Department of Chemistry, University of Patras, 26504 Patras, Greece. E-mail: nastopoulos@chemistry.upatras.gr

^{b.} Department of Chemistry, University of Cyprus, 1678 Nicosia, Cyprus

^{c.} School of Chemistry, National University of Ireland Galway, Galway, Ireland

^{d.} Departament de Química Inorgànica i Orgànica, seccio Inorgànica and Institute of Nanoscience and Nanotechnology (IN2UB), Universitat de Barcelona, Diagonal 645, 08028 Barcelona, Spain. E-mail: albert.escuer@qi.ub.es

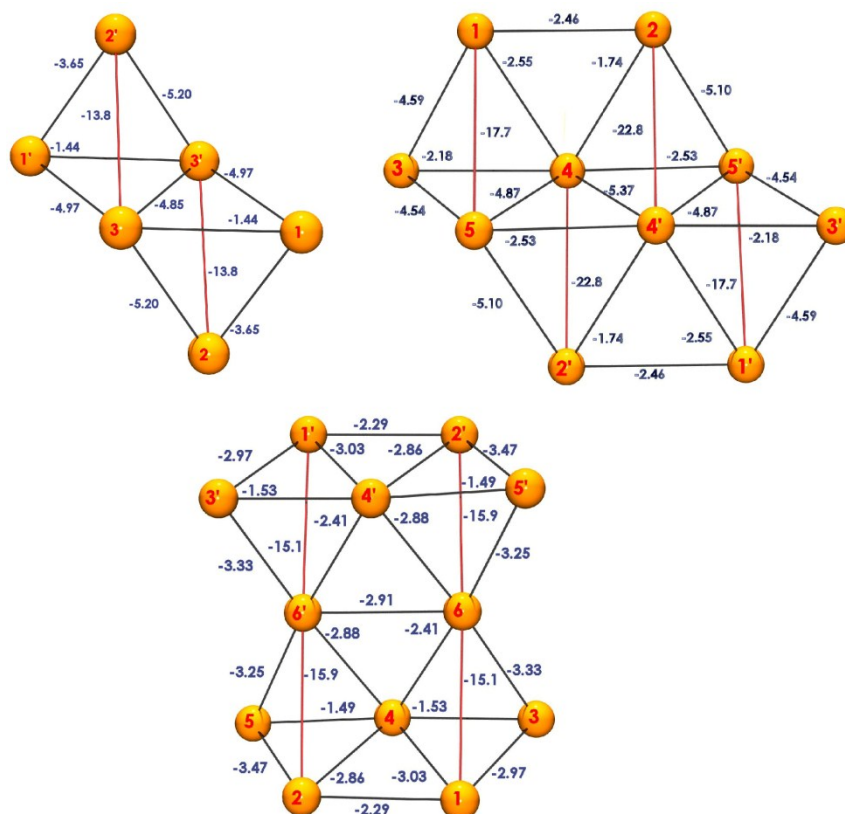


Fig. S1 Prediction of the J values for clusters **2** (bottom), **3** (up right) and **5** (up left) employing the approach of Christou.⁵³ The model confirms unambiguously the stronger antiferromagnetic interactions mediated by the Fe-O-Fe pathways with short Fe-O bond distances and large bond angles. For the hexanuclear cluster **5**, the $S=5$ ground state can be inferred from the J values and it is confirmed by the fit of the reduced magnetization plots (Fig. 5, right) and by the $\chi_M T$ vs. T simulation applying the J values calculated with Christou's model.⁵³ In contrast, no reliable predictions of the ground-state spin S can be made for **2** and **3** due to the similar J value for most interactions and to the triangular arrangements of the Fe^{III} atoms.

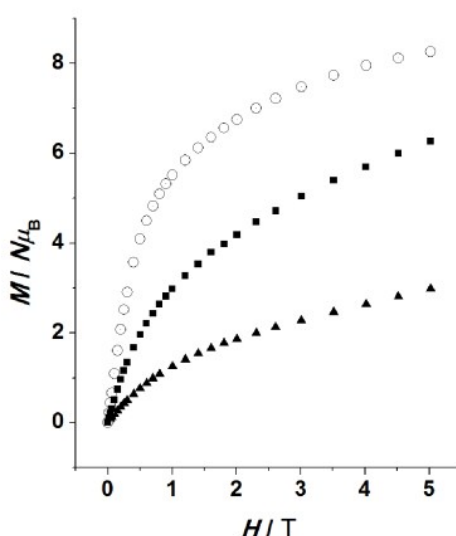


Fig. S2 Magnetization plots for **5** (circles), **3** (solid triangles) and **2** (solid squares) at 2 K.

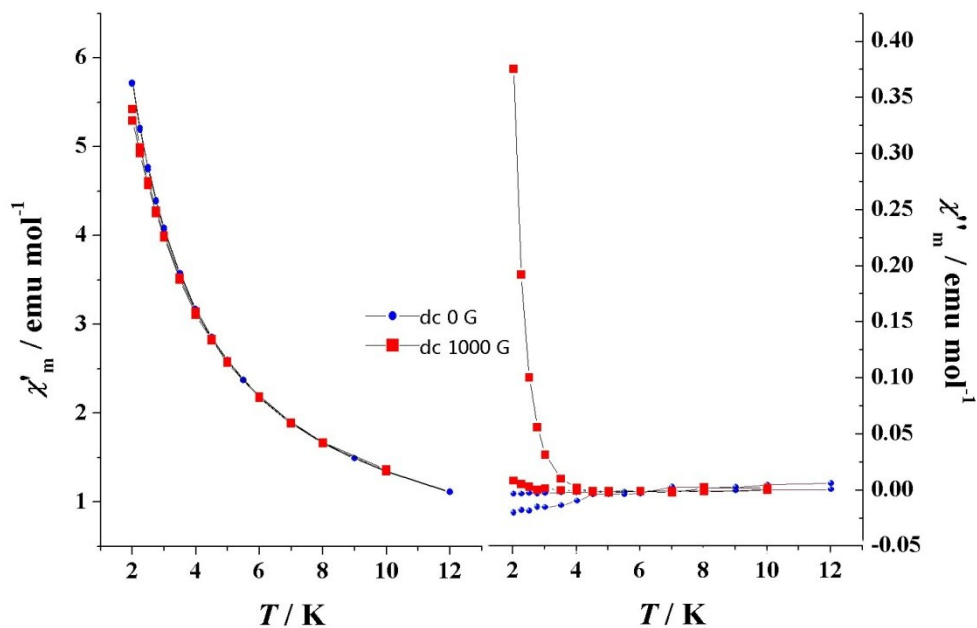


Fig. S3 In-phase (χ'_M) and out-of-phase (χ''_M) ac magnetic susceptibilities for complex **5** as a function of temperature in zero and applied dc field of 0.1 T. Ac frequencies: 10 and 1000 Hz.

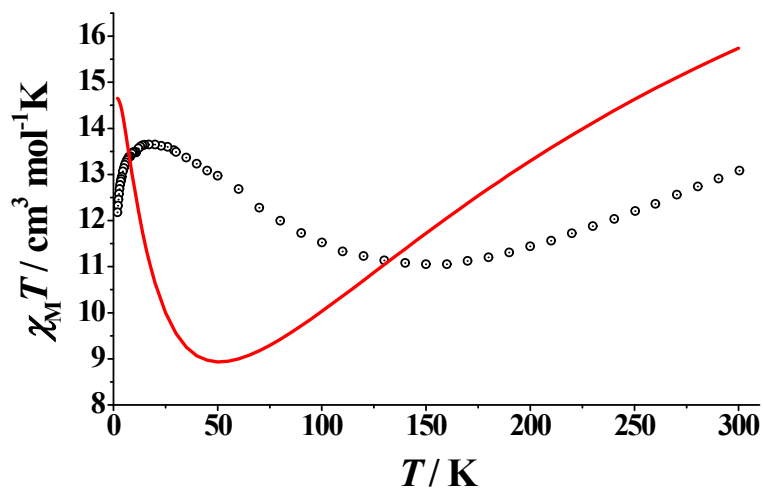


Fig. S4 Simulation of the $\chi_M T$ vs. T product for compound **5** applying the J values calculated with Christou's model.⁵³ The model predicts correctly the $S=5$ ground state and the ferrimagnetic response of the complex. The position of the $\chi_M T$ minimum at a lower temperature with respect to the experimental data (circles) suggests that the interaction mediated by the larger Fe-O-Fe angles is sub-estimated.

Table S1 Selected interatomic distances (Å) and angles (°) for compounds **1**·3MeOH, **3** and **4**·MeOH.

1·3MeOH	Distance/angle	Symmetry code		Distance/angle	Symmetry code
Fe1-Fe2	3.202(3)	x, y, z	Fe1-Fe3	3.078(4)	x, y, z
Fe1-Fe4	3.160(3)	x, y, z	Fe2-Fe4	3.154(4)	x, y, z
Fe2-Fe5	3.069(3)	x, y, z	Fe3-Fe4	3.116(3)	x, y, z
Fe4-Fe5	3.099(3)	x, y, z	Fe4-Fe4'	3.038(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe4-Fe5'	3.022(3)	-x, 1-y, 1-z	Fe5-Fe3'	3.155(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O1B	1.925(2)	x, y, z	Fe3-O12	1.999(2)	x, y, z
Fe1-O3	1.961(2)	x, y, z	Fe3-O2A	2.096(2)	x, y, z
Fe1-O6	1.974 (3)	x, y, z	Fe3-O3	2.118(3)	x, y, z
Fe1-O5	2.020(3)	x, y, z	Fe4-O12	1.942(3)	x, y, z
Fe1-O2B	2.089(2)	x, y, z	Fe4-O11	1.957(2)	x, y, z
Fe1-O8	2.133(2)	x, y, z	Fe4-O4	1.965(2)	-x, 1-y, 1-z
Fe2-O1C	1.912(3)	x, y, z	Fe4-O4	2.087(3)	x, y, z
Fe2-O4	1.966(2)	x, y, z	Fe4-O3	2.098(2)	x, y, z
Fe2-O6	1.978 (2)	x, y, z	Fe4-O8	2.100(2)	x, y, z
Fe2-O7	2.014(2)	x, y, z	Fe5-O3	1.979(2)	-x, 1-y, 1-z
Fe2-O2C	2.053(2)	x, y, z	Fe5-O9	1.985(3)	x, y, z
Fe2-O8	2.132(3)	x, y, z	Fe5-O7	1.993(2)	x, y, z
Fe3-O1A	1.903 (3)	x, y, z	Fe5-O11	2.025(3)	x, y, z
Fe3-O9	1.967(2)	-x, 1-y, 1-z	Fe5-O10	2.032(2)	x, y, z
Fe3-O5	1.975 (2)	x, y, z	Fe5-O4	2.049(2)	x, y, z
Fe1-O1B-O3	101.98(9)	x, y, z	Fe3-O5-O12	93.63(9)	x, y, z
Fe1-O1B-O6	96.38(8)	x, y, z	Fe3-O5-O2A	86.15(7)	x, y, z
Fe1-O1B-O5	96.80(9)	x, y, z	Fe3-O5-O3	79.02(8)	x, y, z
Fe1-O1B-O2B	86.25(7)	x, y, z	Fe3-O12-O2A	174.51(9)	x, y, z
Fe1-O1B-O8	173.07(9)	x, y, z	Fe3-O12-O3	79.17(7)	x, y, z
Fe1-O3-O6	98.20(7)	x, y, z	Fe3-O2A-O3	106.15(7)	x, y, z
Fe1-O3-O5	81.78(8)	x, y, z	Fe4-O12-O11	101.45(8)	x, y, z
Fe1-O3-O2B	169.05(10)	x, y, z	Fe4-O12-O4	101.63(1)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O3-O8	81.76(7)	x, y, z	Fe4-O12-O4	174.63(9)	x, y, z
Fe1-O6-O5	166.52(9)	x, y, z	Fe4-O12-O3	80.97(8)	x, y, z
Fe1-O6-O2B	87.92(8)	x, y, z	Fe4-O12-O8	94.99(7)	x, y, z
Fe1-O6-O8	77.21(7)	x, y, z	Fe4-O11-O4	96.99(8)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O5-O2B	90.15(7)	x, y, z	Fe4-O11-O4	80.69(8)	x, y, z
Fe1-O5-O8	89.48(7)	x, y, z	Fe4-O11-O3	177.54(9)	x, y, z
Fe1-O2B-O8	90.83(8)	x, y, z	Fe4-O11-O8	99.84(9)	x, y, z
Fe2-O1C-O4	102.03(8)	x, y, z	Fe4-O4-O4	82.90(7)	x, y, z
Fe2-O1C-O6	95.03(8)	x, y, z	Fe4-O4-O3	82.90(8)	x, y, z
Fe2-O1C-O7	97.91(9)	x, y, z	Fe4-O4-O8	153.46(9)	x, y, z
Fe2-O1C-O2C	86.93(9)	x, y, z	Fe4-O4-O3	96.86(7)	x, y, z
Fe2-O1C-O8	171.77(9)	x, y, z	Fe4-O4-O8	79.76(8)	x, y, z
Fe2-O4-O6	97.59(9)	x, y, z	Fe4-O3-O8	79.42(7)	x, y, z
Fe2-O4-O7	80.31(7)	x, y, z	Fe5-O3-O9	77.96(7)	x, y, z
Fe2-O4-O2C	166.90(9)	x, y, z	Fe5-O3-O7	158.18(10)	x, y, z
Fe2-O4-O8	81.78(8)	x, y, z	Fe5-O3-O11	96.31(9)	x, y, z
Fe2-O6-O7	167.05(9)	x, y, z	Fe5-O3-O10	105.91(8)	x, y, z
Fe2-O6-O2C	91.04(7)	x, y, z	Fe5-O3-O4	83.83(8)	x, y, z
Fe2-O6-O8	77.15(7)	x, y, z	Fe5-O9-O7	91.83(9)	x, y, z
Fe2-O7-O2C	89.07(8)	x, y, z	Fe5-O9-O11	174.27(9)	x, y, z
Fe2-O7-O8	89.90(7)	x, y, z	Fe5-O9-O10	93.79(9)	x, y, z
Fe2-O2C-O8	90.62(7)	x, y, z	Fe5-O9-O4	99.38(7)	x, y, z
Fe3-O1A-O9	105.57(10)	-x, 1-y, 1-z	Fe5-O7-O11	93.65(7)	x, y, z
Fe3-O1A-O5	103.33(8)	x, y, z	Fe5-O7-O10	93.85(9)	x, y, z
Fe3-O1A-O12	89.78(8)	x, y, z	Fe5-O7-O4	78.83(7)	x, y, z
Fe3-O1A-O2A	84.94(8)	x, y, z	Fe5-O11-O10	87.53(7)	x, y, z
Fe3-O1A-O3	168.85(10)	x, y, z	Fe5-O11-O4	80.06(8)	x, y, z
Fe3-O9-O5	148.38(9)	x, y, z	Fe5-O10-O4	165.07(9)	x, y, z
Fe3-O9-O12	99.03(8)	x, y, z	Fe3-O9-O3	75.13(7)	x, y, z
Fe3-O9-O2A	83.87(8)	x, y, z			

3	Distance/angle	Symmetry code	Distance/angle	Symmetry code	
Fe1-Fe2	3.191(3)	x, y, z	Fe4-Fe4'	3.021(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-Fe3	3.105(3)	x, y, z	Fe4-Fe5'	3.052(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-Fe4	3.160(4)	x, y, z	Fe4-Fe3	3.089(3)	x, y, z
Fe2-Fe4	3.143(3)	x, y, z	Fe4-Fe5	3.134(3)	x, y, z
Fe2-Fe5	3.079(3)	x, y, z	Fe5-Fe3'	3.114(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O3	1.973(2)	x, y, z	Fe3-O12	2.014(2)	x, y, z
Fe1-O5	1.986(2)	x, y, z	Fe3-O2A	2.090(2)	x, y, z
Fe1-O6	1.990(2)	x, y, z	Fe3-O3	2.110(2)	x, y, z
Fe1-O8	2.080(2)	x, y, z	Fe4-O4	1.943(2)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O10	2.084(2)	x, y, z	Fe4-O12	1.944(2)	x, y, z
Fe1-Cl1	2.310(2)	x, y, z	Fe4-O11	1.972(2)	-x, 1-y, 1-z
Fe2-O1B	1.918(2)	x, y, z	Fe4-O3	2.068(2)	x, y, z
Fe2-O4	1.945(2)	x, y, z	Fe4-O4	2.076(2)	x, y, z
Fe2-O6	1.991(2)	x, y, z	Fe4-O8	2.106(2)	x, y, z
Fe2-O7	2.018(2)	-x, 1-y, 1-z	Fe5-O3	1.973(2)	x, y, z
Fe2-O2B	2.052(2)	x, y, z	Fe5-O7	1.992(2)	x, y, z
Fe2-O8	2.129(2)	x, y, z	Fe5-O9	1.999(2)	x, y, z
Fe3-O1A	1.911(2)	x, y, z	Fe5-O11	2.038(2)	x, y, z
Fe3-O9	1.948(2)	x, y, z	Fe5-O4	2.107(2)	-x, 1-y, 1-z
Fe3-O5	1.980(2)	x, y, z	Fe5-Cl2	2.336(3)	x, y, z
Fe1-O3-O5	80.4(7)	x, y, z	Fe3-O5-O12	94.93(7)	x, y, z
Fe1-O3-O6	95.6(8)	x, y, z	Fe3-O5-O2A	83.57(6)	x, y, z
Fe1-O3-O8	80.97(6)	x, y, z	Fe3-O5-O3	77.30(7)	x, y, z
Fe1-O3-O10	85.72(7)	x, y, z	Fe3-O12-O2A	176.41(6)	x, y, z
Fe1-O3-Cl1	171.94(9)	x, y, z	Fe3-O12-O3	79.65(6)	x, y, z
Fe1-O5-O6	168.83(8)	x, y, z	Fe3-O2A-O3	103.14(5)	x, y, z
Fe1-O5-O8	91.02(6)	x, y, z	Fe4-O4-O12	102.29(8)	x, y, z
Fe1-O5-O10	97.65(8)	x, y, z	Fe4-O4-O11	98.87(7)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O5-Cl1	91.82(8)	x, y, z	Fe4-O4-O3	82.98(6)	x, y, z
Fe1-O6-O8	78.02(6)	x, y, z	Fe4-O4-O4	82.57(7)	x, y, z
Fe1-O6-O10	92.41(6)	x, y, z	Fe4-O4-O8	152.23(10)	x, y, z
Fe1-O6-Cl1	92.47(6)	x, y, z	Fe4-O12-O11	99.95(6)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O8-O10	162.70(7)	x, y, z	Fe4-O12-O3	82.30(7)	x, y, z
Fe1-O8-Cl1	101.54(6)	x, y, z	Fe4-O12-O4	174.72(8)	x, y, z
Fe1-O10-Cl1	93.16(7)	x, y, z	Fe4-O12-O8	95.26(8)	x, y, z
Fe2-O1B-O4	104.01(9)	x, y, z	Fe4-O11-O3	176.67(7)	x, y, z
Fe2-O1B-O6	95.72(6)	x, y, z	Fe4-O11-O4	81.16(7)	x, y, z
Fe2-O1B-O7	97.35(8)	-x, 1-y, 1-z	Fe4-O11-O8	99.09(7)	x, y, z
Fe2-O1B-O2B	86.77(7)	x, y, z	Fe4-O3-O4	96.39(5)	x, y, z
Fe2-O1B-O8	171.03(8)	x, y, z	Fe4-O3-O8	78.20(6)	x, y, z
Fe2-O4-O6	94.78(7)	x, y, z	Fe4-O4-O8	79.47(6)	x, y, z
Fe2-O4-O7	81.25(7)	-x, 1-y, 1-z	Fe5-O3-O7	156.09(10)	x, y, z
Fe2-O4-O2B	166.43(10)	x, y, z	Fe5-O3-O9	79.23(7)	x, y, z
Fe2-O4-O8	81.87(7)	x, y, z	Fe5-O3-O11	97.16(7)	x, y, z
Fe2-O6-O7	166.90(7)	-x, 1-y, 1-z	Fe5-O3-O4	81.28(6)	-x, 1-y, 1-z
Fe2-O6-O2B	92.28(7)	x, y, z	Fe5-O3-Cl2	99.67(7)	x, y, z
Fe2-O6-O8	76.86(6)	x, y, z	Fe5-O7-O9	90.12(7)	x, y, z
Fe2-O7-O2B	89.31(7)	x, y, z	Fe5-O7-O11	90.43(7)	x, y, z
Fe2-O7-O8	90.19(5)	x, y, z	Fe5-O7-O4	77.99(6)	-x, 1-y, 1-z
Fe2-O2B-O8	88.49(7)	x, y, z	Fe5-O7-Cl2	102.35(6)	x, y, z
Fe3-O1A-O9	103.22(8)	x, y, z	Fe5-O9-O11	171.72(8)	x, y, z
Fe3-O1A-O5	104.28(9)	x, y, z	Fe5-O9-O4	93.14(5)	-x, 1-y, 1-z
Fe3-O1A-O12	92.61(6)	x, y, z	Fe5-O9-Cl2	93.74(7)	x, y, z
Fe3-O1A-O2A	84.63(7)	x, y, z	Fe5-O11-O4	78.90(6)	-x, 1-y, 1-z

Fe3-O1A-O3	172.22(8)	x, y, z	Fe5-O11-Cl2	94.22(5)	x, y, z
Fe3-O9-O5	149.85(10)	x, y, z	Fe5-O4-Cl2	173.11(6)	x, y, z
Fe3-O9-O12	95.94(7)	x, y, z	Fe3-O9-O2A	86.93(6)	x, y, z
Fe3-O9-O3	77.13(7)	x, y, z			
4-MeOH	Distance/angle	Symmetry code	Distance/angle	Symmetry code	
Fe1-Fe2	3.169(3)	x, y, z	Fe4-Fe4'	2.989(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-Fe3	3.103(3)	x, y, z	Fe4-Fe5'	3.029(5)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-Fe4	3.163(2)	x, y, z	Fe4-Fe3	3.104(3)	x, y, z
Fe2-Fe4	3.123(4)	x, y, z	Fe4-Fe5	3.097(3)	x, y, z
Fe2-Fe5	3.092(2)	x, y, z	Fe5-Fe3'	3.173(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O1B	1.909(2)	x, y, z	Fe3-O12	2.005(2)	1-x, 2-y, 1-z
Fe1-O3	1.938(2)	1-x, 2-y, 1-z	Fe3-O2C	2.118(2)	x, y, z
Fe1-O6	1.979(2)	x, y, z	Fe3-O3	2.143(2)	x, y, z
Fe1-O5	2.004(2)	x, y, z	Fe4-O12	1.937(1)	x, y, z
Fe1-O2B	2.057(3)	x, y, z	Fe4-O4	1.961(3)	1-x, 2-y, 1-z
Fe1-O8	2.149(2)	x, y, z	Fe4-O11	1.966(2)	x, y, z
Fe2-O1A	1.927(3)	x, y, z	Fe4-O4	2.063(2)	x, y, z
Fe2-O4	1.975(2)	x, y, z	Fe4-O3	2.089(2)	1-x, 2-y, 1-z
Fe2-O6	1.985(2)	x, y, z	Fe4-O8	2.117(3)	x, y, z
Fe2-O7	2.010(2)	x, y, z	Fe5-O3	1.954(3)	x, y, z
Fe2-O2A	2.016(2)	x, y, z	Fe5-O7	1.977(2)	x, y, z
Fe2-O8	2.049(2)	x, y, z	Fe5-O9	2.007(2)	x, y, z
Fe3-O1C	1.910(2)	x, y, z	Fe5-O11	2.027(2)	x, y, z
Fe3-O5	1.951(3)	1-x, 2-y, 1-z	Fe5-O4	2.054(2)	x, y, z
Fe3-O9	1.965(3)	x, y, z	Fe5-N	2.116(2)	x, y, z
Fe1-O1B-O3	102.16(8)	1-x, 2-y, 1-z	Fe3-O9-O12	100.37(8)	1-x, 2-y, 1-z
Fe1-O1B-O6	97.21(8)	x, y, z	Fe3-O9-O2C	83.91(8)	x, y, z
Fe1-O1B-O5	97.61(8)	x, y, z	Fe3-O9-O3	74.40(7)	x, y, z
Fe1-O1B-O2B	86.60(8)	x, y, z	Fe3-O12-O2C	170.68(10)	x, y, z
Fe1-O1B-O8	173.35(1)	x, y, z	Fe3-O12-O3	79.44(7)	x, y, z
Fe1-O3-O6	97.86(8)	x, y, z	Fe3-O2C-O3	109.77(8)	x, y, z
Fe1-O3-O5	80.53(7)	x, y, z	Fe4-O12-O4	102.15(9)	1-x, 2-y, 1-z
Fe1-O3-O2B	165.90(9)	x, y, z	Fe4-O12-O11	98.98(9)	x, y, z
Fe1-O3-O8	81.72(7)	x, y, z	Fe4-O12-O4	173.65(9)	x, y, z
Fe1-O6-O5	165.09(9)	x, y, z	Fe4-O12-O3	82.32(7)	1-x, 2-y, 1-z
Fe1-O6-O2B	91.89(8)	x, y, z	Fe4-O12-O8	94.84(7)	x, y, z
Fe1-O6-O8	76.79(7)	x, y, z	Fe4-O4-O11	99.07(8)	x, y, z
Fe1-O5-O2B	87.42(7)	x, y, z	Fe4-O4-O4	84.10(7)	x, y, z
Fe1-O5-O8	88.32(8)	x, y, z	Fe4-O4-O3	82.04(7)	1-x, 2-y, 1-z
Fe1-O2B-O8	90.69(7)	x, y, z	Fe4-O4-O8	152.60(9)	x, y, z
Fe2-O1A-O4	172.55(9)	x, y, z	Fe4-O11-O4	80.94(7)	x, y, z
Fe2-O1A-O6	92.93(8)	x, y, z	Fe4-O11-O3	178.05(10)	1-x, 2-y, 1-z
Fe2-O1A-O7	93.22(8)	x, y, z	Fe4-O11-O8	99.32(8)	x, y, z
Fe2-O1A-O2A	86.88(8)	x, y, z	Fe4-O4-O3	97.61(8)	1-x, 2-y, 1-z
Fe2-O1A-O8	97.94(7)	x, y, z	Fe4-O4-O8	78.94(7)	x, y, z
Fe2-O4-O6	94.47(8)	x, y, z	Fe4-O3-O8	79.09(7)	x, y, z
Fe2-O4-O7	79.33(7)	x, y, z	Fe5-O3-O7	156.59(9)	x, y, z
Fe2-O4-O2A	93.85(7)	x, y, z	Fe5-O3-O9	77.77(7)	x, y, z
Fe2-O4-O8	82.64(7)	x, y, z	Fe5-O3-O11	97.03(8)	x, y, z
Fe2-O6-O7	170.87(10)	x, y, z	Fe5-O3-O4	83.12(8)	x, y, z
Fe2-O6-O2A	91.02(8)	x, y, z	Fe5-O3-N	103.19(8)	x, y, z
Fe2-O6-O8	79.02(7)	x, y, z	Fe5-O7-O9	91.05(8)	x, y, z
Fe2-O7-O2A	96.04(8)	x, y, z	Fe5-O7-O11	93.43(7)	x, y, z
Fe2-O7-O8	93.46(8)	x, y, z	Fe5-O7-O4	78.22(7)	x, y, z
Fe2-O2A-O8	169.10(9)	x, y, z	Fe5-O7-N	97.85(8)	x, y, z

Fe3-O1C-O5	106.50(8)	1-x, 2-y, 1-z	Fe5-O9-O11	174.70(9)	x, y, z
Fe3-O1C-O9	106.49(9)	x, y, z	Fe5-O9-O4	98.46(8)	x, y, z
Fe3-O1C-O12	87.42(8)	1-x, 2-y, 1-z	Fe5-O9-N	93.14(7)	x, y, z
Fe3-O1C-O2C	83.41(7)	x, y, z	Fe5-O11-O4	79.72(7)	x, y, z
Fe3-O1C-O3	166.73(9)	x, y, z	Fe5-O11-N	89.05(8)	x, y, z
Fe3-O5-O9	143.96(9)	x, y, z	Fe5-O4-N	167.79(9)	x, y, z
Fe3-O5-O12	95.20(8)	1-x, 2-y, 1-z	Fe3-O5-O2C	85.83(7)	x, y, z
Fe3-O5-O3	76.84(7)	x, y, z			

Table S2 Selected interatomic distances (Å) and angles (°) for compound **2**·2H₂O.

	Distance/angle	Symmetry code		Distance/angle	Symmetry code
Fe1-Fe2	3.217(2)	x, y, z	Fe3-Fe4	3.075(2)	x, y, z
Fe1-Fe3	3.086(2)	x, y, z	Fe3-Fe6	3.117(2)	x, y, z
Fe1-Fe4	3.085(1)	x, y, z	Fe4-Fe6	3.120(2)	x, y, z
Fe2-Fe5	3.121(1)	x, y, z	Fe4-Fe6'	3.116(1)	-x, 1-y, 1-z
Fe2-Fe4	3.108(2)	x, y, z	Fe5-Fe6'	3.127(2)	-x, 1-y, 1-z
Fe6-Fe6'	3.345(2)	-x, 1-y, 1-z			
Fe1-O1B	1.903(1)	x, y, z	Fe4-O9	1.944(1)	x, y, z
Fe1-O6	1.986(1)	x, y, z	Fe4-O11	1.945(1)	x, y, z
Fe1-O3	1.988(1)	x, y, z	Fe4-O7	2.024(1)	x, y, z
Fe1-O5	1.996(1)	x, y, z	Fe4-O10	2.049(1)	x, y, z
Fe1-O2B	2.058(1)	x, y, z	Fe4-O3	2.078(1)	x, y, z
Fe1-O7	2.108(1)	x, y, z	Fe4-O4	2.082(1)	x, y, z
Fe2-O1C	1.912(1)	x, y, z	Fe5-O1D	1.923(1)	x, y, z
Fe2-O4	1.978(1)	x, y, z	Fe5-O8	1.967(1)	x, y, z
Fe2-O6	1.988(1)	x, y, z	Fe5-O13	1.990(1)	1-x, 1-y, 1-z
Fe2-O8	1.994(1)	x, y, z	Fe5-O9	1.993(1)	x, y, z
Fe2-O2C	2.067(1)	x, y, z	Fe5-O2D	2.075(1)	x, y, z
Fe2-O7	2.126(1)	x, y, z	Fe5-O4	2.149(1)	x, y, z
Fe3-O1A	1.907(1)	x, y, z	Fe5-O12	1.966(1)	x, y, z
Fe3-O5	1.963(1)	x, y, z	Fe6-O13	1.970(1)	x, y, z
Fe3-O12	1.976(1)	x, y, z	Fe6-O4	1.992(1)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O11	1.994(1)	x, y, z	Fe6-O3	1.992(1)	x, y, z
Fe3-O2A	2.083(1)	x, y, z	Fe6-O10	2.105(1)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O3	2.142(1)	x, y, z	Fe6-O10	2.133(1)	x, y, z
Fe1-O1B-O6	96.08(5)	x, y, z	Fe4-O9-O10	98.87(6)	x, y, z
Fe1-O1B-O3	106.21(5)	x, y, z	Fe4-O9-O3	178.67(6)	x, y, z
Fe1-O1B-O5	96.96(5)	x, y, z	Fe4-O9-O4	82.79(5)	x, y, z
Fe1-O1B-O2B	86.76(5)	x, y, z	Fe4-O11-O7	99.29(5)	x, y, z
Fe1-O1B-O7	169.51(6)	x, y, z	Fe4-O11-O10	98.75(5)	x, y, z
Fe1-O6-O3	96.40(5)	x, y, z	Fe4-O11-O3	83.25(5)	x, y, z
Fe1-O6-O5	166.85(6)	x, y, z	Fe4-O11-O4	178.17(6)	x, y, z
Fe1-O6-O2B	90.06(5)	x, y, z	Fe4-O7-O10	154.21(6)	x, y, z
Fe1-O6-O7	76.69(4)	x, y, z	Fe4-O7-O3	82.29(5)	x, y, z
Fe1-O3-O5	81.64(5)	x, y, z	Fe4-O7-O4	81.52(5)	x, y, z
Fe1-O3-O2B	164.72(6)	x, y, z	Fe4-O10-O3	81.70(5)	x, y, z
Fe1-O3-O7	82.40(5)	x, y, z	Fe4-O10-O4	81.00(5)	x, y, z
Fe1-O5-O2B	88.92(5)	x, y, z	Fe4-O3-O4	98.50(4)	x, y, z
Fe1-O5-O7	90.15(4)	x, y, z	Fe5-O1D-O8	99.51(5)	x, y, z
Fe1-O2B-O7	85.66(4)	x, y, z	Fe5-O1D-O13	108.97(6)	1-x, 1-y, 1-z
Fe2-O1C-O4	104.34(5)	x, y, z	Fe5-O1D-O9	88.95(5)	x, y, z
Fe2-O1C-O6	97.06(5)	x, y, z	Fe5-O1D-O2D	84.94(5)	x, y, z
Fe2-O1C-O8	98.34(5)	x, y, z	Fe5-O1D-O4	167.85(6)	x, y, z

Fe2-O1C-O2C	86.12(5)	x, y, z	Fe5-O8-O13	150.51(6)	1-x, 1-y, 1-z
Fe2-O1C-O7	171.92(6)	x, y, z	Fe5-O8-O9	96.45(5)	x, y, z
Fe2-O4-O6	100.18(5)	x, y, z	Fe5-O8-O2D	88.45(5)	x, y, z
Fe2-O4-O8	80.53(5)	x, y, z	Fe5-O8-O4	77.02(5)	x, y, z
Fe2-O4-O2C	165.31(6)	x, y, z	Fe5-O13-O9	91.66(5)	x, y, z
Fe2-O4-O7	81.52(5)	x, y, z	Fe5-O13-O2D	86.62(5)	x, y, z
Fe2-O6-O8	163.90(6)	x, y, z	Fe5-O13-O4	76.57(4)	x, y, z
Fe2-O6-O2C	88.52(5)	x, y, z	Fe5-O9-O2D	172.73(5)	x, y, z
Fe2-O6-O7	76.23(4)	x, y, z	Fe5-O9-O4	79.97(4)	x, y, z
Fe2-O8-O2C	87.84(5)	x, y, z	Fe5-O2D-O4	106.44(5)	x, y, z
Fe2-O8-O7	88.04(4)	x, y, z	Fe6-O12-O13	98.99(5)	x, y, z
Fe2-O2C-O7	89.19(4)	x, y, z	Fe6-O12-O4	101.63(6)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O1A-O5	103.84(5)	x, y, z	Fe6-O12-O3	80.61(5)	x, y, z
Fe3-O1A-O12	101.84(6)	x, y, z	Fe6-O12-O10	167.59(6)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O1A-O11	92.42(5)	x, y, z	Fe6-O12-O10	92.06(4)	x, y, z
Fe3-O1A-O2A	85.37(5)	x, y, z	Fe6-O13-O4	80.82(5)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O1A-O3	172.64(6)	x, y, z	Fe6-O13-O3	104.28(6)	x, y, z
Fe3-O5-O12	153.28(6)	x, y, z	Fe6-O13-O10	93.33(5)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O5-O11	92.09(5)	x, y, z	Fe6-O13-O10	168.14(6)	x, y, z
Fe3-O5-O2A	86.53(5)	x, y, z	Fe6-O4-O3	174.14(7)	x, y, z
Fe3-O5-O3	78.63(5)	x, y, z	Fe6-O4-O10	81.78(5)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O12-O11	94.11(5)	x, y, z	Fe6-O4-O10	92.80(5)	x, y, z
Fe3-O12-O2A	88.30(5)	x, y, z	Fe6-O3-O10	94.91(5)	1-x, 1-y, 1-z
Fe3-O12-O3	76.80(4)	x, y, z	Fe6-O3-O10	81.66(5)	x, y, z
Fe3-O11-O2A	177.02(6)	x, y, z	Fe6-O10-O10	75.78(4)	x, y, z
Fe3-O11-O3	80.52(4)	x, y, z	Fe4-O9-O11	95.46(5)	x, y, z
Fe3-O2A-O3	101.77(4)	x, y, z	Fe4-O9-O7	97.59(5)	x, y, z

Table S3 Selected interatomic distances (Å) and angles (°) for compound **5**.

	Distance/angle	Symmetry code		Distance/angle	Symmetry code
Fe1-Fe2	2.929(2)	x, y, z	Fe2-Fe3	3.069(2)	x, y, z
Fe1-Fe3	3.327(2)	x, y, z	Fe2-Fe3'	3.905(3)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-Fe3'	3.036(2)	-x, 1-y, 1-z	Fe3-Fe3'	3.079(2)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O1A	1.899(1)	x, y, z	Fe2-O1B-O4	176.18(6)	x, y, z
Fe1-O7	1.953(2)	x, y, z	Fe2-O1B-O8	95.38(5)	x, y, z
Fe1-O9	1.994(2)	x, y, z	Fe2-O1B-O9	96.55(4)	x, y, z
Fe1-O5	2.024(1)	x, y, z	Fe2-O1B-O6	92.51(5)	x, y, z
Fe1-O4	2.032(1)	x, y, z	Fe2-O1B-O2B	85.86(5)	x, y, z
Fe1-O2A	2.161(1)	x, y, z	Fe2-O4-O8	80.90(4)	x, y, z
Fe2-O1B	1.930(2)	x, y, z	Fe2-O4-O9	84.35(5)	x, y, z
Fe2-O4	1.989(2)	x, y, z	Fe2-O4-O6	91.24(5)	x, y, z
Fe2-O8	1.997(1)	x, y, z	Fe2-O4-O2B	93.51(4)	x, y, z
Fe2-O9	1.999(1)	x, y, z	Fe2-O8-O9	89.44(4)	x, y, z
Fe2-O6	2.052(1)	x, y, z	Fe2-O8-O6	171.85(6)	x, y, z
Fe2-O2B	2.069(1)	x, y, z	Fe2-O8-O2B	94.24(4)	x, y, z
Fe3-O3A	1.900(1)	x, y, z	Fe2-O9-O6	87.62(4)	x, y, z
Fe3-O7	1.965(1)	-x, 1-y, 1-z	Fe2-O9-O2B	175.40(5)	x, y, z
Fe3-O8	1.992(2)	x, y, z	Fe2-O6-O2B	88.36(4)	x, y, z
Fe3-O4	2.009(2)	-x, 1-y, 1-z	Fe3-O3A-O7	98.23(4)	-x, 1-y, 1-z
Fe3-O4	2.053(1)	x, y, z	Fe3-O3A-O8	98.74(5)	x, y, z
Fe3-O2A	2.188(1)	x, y, z	Fe3-O3A-O4	104.15(5)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O1A-O7	97.27(5)	x, y, z	Fe3-O3A-O4	157.51(5)	x, y, z
Fe1-O1A-O9	98.83(4)	x, y, z	Fe3-O3A-O2A	82.87(4)	x, y, z
Fe1-O1A-O5	102.73(4)	x, y, z	Fe3-O7-O8	91.02(5)	x, y, z
Fe1-O1A-O4	159.98(5)	x, y, z	Fe3-O7-O4	80.47(4)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-O1A-O2A	84.33(4)	x, y, z	Fe3-O7-O4	104.21(5)	x, y, z

Fe1-07-09	163.45(6)	x, y, z	Fe3-07-O2A	175.49(5)	x, y, z
Fe1-07-05	93.50(5)	x, y, z	Fe3-08-04	156.47(6)	-x, 1-y, 1-z
Fe1-07-04	80.19(4)	x, y, z	Fe3-08-04	79.45(4)	x, y, z
Fe1-07-O2A	91.18(5)	x, y, z	Fe3-08-O2A	93.14(4)	x, y, z
Fe1-09-05	86.71(5)	x, y, z	Fe3-04-04	81.44(5)	x, y, z
Fe1-09-04	83.36(5)	x, y, z	Fe3-04-O2A	95.02(5)	x, y, z
Fe1-09-O2A	86.60(4)	x, y, z	Fe3-04-O2A	74.90(4)	x, y, z
Fe1-05-04	97.25(5)	x, y, z	Fe1-04- O2A	75.92(4)	x, y, z
Fe1-05-O2A	170.95(5)	x, y, z			