

Supplementary Information S1

Complex 1

Selected Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

Fe1 – O15	1.977(2)
Fe2 – O15	1.963(2)
Fe1 – O94	1.969(2)
Fe1 – N82	2.121(2)
Fe2 – O92	1.979(2)
Fe2 – N84	2.124(2)
Fe1 – O15 - Fe2	108.43(7)

BVS

	FeII	FeIII	Assignment
Fe1	3.003	3.058	Fe ^{III}
Fe2	2.950	3.008	Fe ^{III}

Complex 2

Selected Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

Fe1 - O1	1.886(2)
Fe2 - O1	1.924(2)
Fe3 - O1	1.887(2)
Fe1 - O1 - Fe2	122.65(7)
Fe1 - O1 - Fe3	120.65(7)
Fe2 - O1 - Fe3	116.44(7)

BVS

atom	FeII	FeIII	Assignment
Fe1	2.871	2.989	Fe ^{III}
Fe2	2.900	3.102	Fe ^{III}
Fe3	2.969	3.177	Fe ^{III}

Complex 3

Selected Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

Fe1 - O1	1.931(4)	Fe3 - O21	2.041(4)
Fe1 - N9	2.149(5)	Fe3 - O43	2.051(3)
Fe1 - O12	1.910(3)	Fe3 - O67	1.914(4)
Fe1 - N20	2.107(4)	Fe3 - N75	2.151(5)
Fe1 - O54	2.066(3)	Fe3 - O78	1.908(3)
Fe1 - O87	2.034(4)	Fe3 - N86	2.116(4)
Fe2 - O43	2.035(3)	Fe4 - O21	2.044(3)
Fe2 - O45	1.922(3)	Fe4 - O23	1.927(4)
Fe2 - N53	2.110(4)	Fe4 - N31	2.161(5)
Fe2 - O56	1.925(4)	Fe4 - O34	1.905(4)
Fe2 - N64	2.153(4)	Fe4 - N42	2.120(4)
Fe2 - O87	2.054(3)	Fe4 - O54	2.047(3)
O1-Fe1-N9	82.78(16)	O43-Fe3-O67	96.19(15)
O1-Fe1-O12	98.79(15)	O21-Fe3-N75	166.20(15)
N9-Fe1-O12	89.31(16)	O43-Fe3-N75	85.86(15)
O1-Fe1-N20	178.93(17)	O67-Fe3-N75	83.63(17)
N9-Fe1-N20	96.17(17)	O21-Fe3-O78	101.59(15)
O12-Fe1-N20	81.41(15)	O43-Fe3-O78	163.57(15)
O1-Fe1-O54	96.61(14)	O67-Fe3-O78	99.19(16)
N9-Fe1-O54	87.76(15)	N75-Fe3-O78	90.13(16)
O12-Fe1-O54	163.84(15)	O21-Fe3-N86	93.30(15)
N20-Fe1-O54	83.11(14)	O43-Fe3-N86	81.72(14)
O1-Fe1-O87	87.75(14)	O67-Fe3-N86	177.77(17)
N9-Fe1-O87	167.61(15)	N75-Fe3-N86	95.40(17)
O12-Fe1-O87	100.05(15)	O78-Fe3-N86	82.80(15)
N20-Fe1-O87	93.26(15)	O21-Fe4-O23	97.89(15)
O54-Fe1-O87	85.41(13)	O21-Fe4-N31	87.64(16)
O43-Fe2-O45	95.43(15)	O23-Fe4-N31	82.36(17)
O43-Fe2-N53	94.77(15)	O21-Fe4-O34	164.00(15)
O45-Fe2-N53	82.66(15)	O23-Fe4-O34	92.25(16)
O43-Fe2-O56	91.39(15)	N31-Fe4-O34	89.28(17)
O45-Fe2-O56	99.86(16)	O21-Fe4-N42	82.23(15)
N53-Fe2-O56	173.10(16)	O23-Fe4-N42	178.92(16)
O43-Fe2-N64	172.67(15)	N31-Fe4-N42	96.57(17)
O45-Fe2-N64	89.77(16)	O34-Fe4-N42	82.53(16)
N53-Fe2-N64	91.00(17)	O21-Fe4-O54	86.78(13)
O56-Fe2-N64	82.61(16)	O23-Fe4-O54	86.60(15)
O43-Fe2-O87	85.11(13)	N31-Fe4-O54	166.83(16)
O45-Fe2-O87	166.12(15)	O34-Fe4-O54	99.26(15)
N53-Fe2-O87	83.47(14)	N42-Fe4-O54	94.47(15)
O56-Fe2-O87	93.99(15)	Fe3-O43-Fe2	121.76(15)
N64-Fe2-O87	91.08(15)	Fe1-O54-Fe4	119.26(16)

O21-Fe3-O43	84.82(14)	Fe2-O87-Fe1	121.08(16)
O21-Fe3-O67	87.29(15)		

BVS

atom	FeII	FeIII	Assignment
Fe1	2.919	2.963	Fe ^{III}
Fe2	2.914	2.959	Fe ^{III}
Fe3	2.947	2.995	Fe ^{III}
Fe4	2.919	2.967	Fe ^{III}

Complex 4

Selected Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

Fe1-O13'	1.947(2)	Fe2-O32	2.098(2)
Fe1-O24'	1.993(2)	Fe2-O36	2.074(2)
Fe1-O26	2.040(2)	Fe2-N23	2.069(2)
Fe1-O32	2.048(2)	Fe3-O4	1.883(2)
Fe1-O32'	1.989(2)	Fe3-O30	1.998(2)
Fe1-O33	2.105(2)	Fe3-O32	1.965(2)
Fe2-O15	1.899(2)	Fe3-O37	2.058(2)
Fe2-O26	1.978(2)	Fe3-N12	2.123(2)
Fe2-O30	2.043(2)		
Fe1-O32'-Fe1'	97.75(7)	Fe1-O32-Fe3	134.16(8)
Fe1-O32'-Fe3'	114.65(8)	Fe2-O30-Fe3	98.24(8)
Fe1-O32'-Fe2'	112.67(8)	Fe2-O32-Fe1'	120.37(10)
Fe1-O33-S34	126.11(10)	Fe2-O32-Fe3	112.67(8)
Fe1-O26-Fe2	103.11(8)	Fe3-O32-Fe1'	97.49(7)
Fe1-O32-Fe1'	97.75(7)	Fe3-O32-Fe1'	114.65(8)
Fe1-O32-Fe2	98.81(7)	Fe3-O37-S34	124.22(10)

BVS

atom	FeII	FeIII	Assignment
Fe1	2.7956	2.9910	Fe ^{III}
Fe2	2.8674	2.9738	Fe ^{III}
Fe3	2.9018	3.0233	Fe ^{III}

Complex 5

Selected Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

Fe1-O4	1.931(2)	Fe4-O18	2.027(2)
Fe1-O1	1.967(2)	Fe4-O10	2.081(2)
Fe1-O19	1.977(2)	Fe4-N3	2.257(3)
Fe1-O14	1.995(2)		
Fe1-O7	2.045(3)	Fe1-O1-Fe3	135.34(12)
Fe1-N4	2.160(3)	Fe1-O1-Fe4	111.29(13)
Fe2-O13	1.938(2)	Fe1-O1-Fe2	98.27(10)
Fe2-O3	2.143(2)	Fe1-O14-Fe2	104.50(11)
Fe3-O16	1.933(2)	Fe1-O19-Fe4	127.41(13)
Fe3-O1	2.077(2)	Fe2-O1-Fe3	85.52(8)
Fe4-O22	1.925(3)	Fe2-O1-Fe4	132.32(12)
Fe4-O1	1.936(2)	Fe3-O1-Fe4	97.34(10)
Fe4-O21	2.005(2)	Fe3-O18-Fe4	99.16(11)

BVS

atom	Fe ^{II}	Fe ^{III}	Assignment
Fe1	2.957	3.091	Fe ^{III}
Fe2	2.722	2.912	Fe ^{III}
Fe3	2.940	3.146	Fe ^{III}
Fe4	2.808	2.948	Fe ^{III}

Complex 6

Selected Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

Fe1-O4	1.936(5)	Fe4-O18	2.028(5)
Fe1-O1	1.966(5)	Fe4-O10	2.083(5)
Fe1-O19	1.984(5)	Fe4-N3	2.250(6)
Fe1-O14	2.000(5)		
Fe1-O7	2.034(5)	Fe1-O1-Fe3	134.99(23)
Fe1-N4	2.188(6)	Fe1-O1-Fe4	111.62(25)
Fe2-O13	1.951(5)	Fe1-O1-Fe2	98.01(18)
Fe2-O3	2.140(5)	Fe1-O14-Fe2	103.39(19)
Fe3-O16	1.931(5)	Fe1-O19-Fe4	127.38(23)
Fe3-O1	2.087(5)	Fe2-O1-Fe3	85.03(17)
Fe4-O22	1.930(5)	Fe2-O1-Fe4	132.70(23)
Fe4-O1	1.936(5)	Fe3-O1-Fe4	97.58(19)
Fe4-O21	2.007(5)	Fe3-O18-Fe4	99.56(19)

BVS

atom	Fe ^{II}	Fe ^{III}	Assignment
Fe1	2.919	3.055	Fe ^{III}
Fe2	2.670	2.857	Fe ^{III}
Fe3	2.912	3.116	Fe ^{III}
Fe4	2.799	2.937	Fe ^{III}

Complex 7

Selected Bond Lengths (Å) and Angles (deg)

Fe1-O1	2.119(5)	Fe7-O9	1.962(5)
Fe1-O2	2.148(6)	Fe7-O18	1.988(6)
Fe1-O3	2.144(5)	Fe7-O22	2.012(6)
Fe1-O16	1.930(6)	Fe7-N3	2.279(5)
Fe1-O20	1.938(5)	Fe8-O3	1.985(5)
Fe1-O24	1.931(5)	Fe8-O4	1.926(5)
Fe2-O1	2.074(5)	Fe8-O14	2.063(5)
Fe2-O2	2.074(5)	Fe8-O21	1.963(5)
Fe2-O3	2.098(5)	Fe8-N5	2.172(6)
Fe2-O17	1.924(5)		
Fe2-O22	1.936(5)	Fe1-O1-Fe2	85.48(14)
Fe2-O23	1.949(5)	Fe1-O1-Fe3	129.75(19)
Fe3-O1	1.937(5)	Fe1-O1-Fe4	97.90(15)
Fe3-O8	2.037(6)	Fe1-O2-Fe2	84.72(15)
Fe3-O10	1.944(5)	Fe1-O2-Fe5	131.3(18)
Fe3-O21	2.038(6)	Fe1-O2-Fe6	97.56(17)
Fe3-N2	2.265(5)	Fe1-O3-Fe2	84.26(13)
Fe4-O1	1.981(5)	Fe1-O3-Fe7	132.34(18)
Fe4-O5	1.923(5)	Fe1-O3-Fe8	97.74(15)
Fe4-O7	2.072(5)	Fe1-O16-Fe8	105.23(20)
Fe4-O19	1.998(5)	Fe1-O20-Fe4	103.60(19)
Fe4-O20	1.998(5)	Fe1-O24-Fe6	104.15(18)
Fe4-N6	2.164(5)	Fe2-O1-Fe3	98.45(16)
Fe5-O2	1.942(6)	Fe2-O1-Fe4	135.20(18)
Fe5-O11	1.946(5)	Fe2-O2-Fe5	98.35(19)
Fe5-O15	2.060(6)	Fe2-O2-Fe6	136.07(26)
Fe5-O19	1.991(5)	Fe2-O3-Fe7	97.88(15)
Fe5-O23	2.022(5)	Fe2-O3-Fe8	136.31(18)
Fe5-N4	2.289(5)	Fe2-O17-Fe3	100.12(22)
Fe6-O2	1.974(5)	Fe2-O22-Fe7	100.26(16)
Fe6-O6	1.930(5)	Fe2-O23-Fe5	99.93(19)
Fe6-O13	2.058(5)	Fe3-O1-Fe4	112.22(18)
Fe6-O18	1.985(5)	Fe3-O21-Fe8	128.29(21)
Fe6-O24	2.002(6)	Fe4-O19-Fe5	128.43(24)
Fe6-N7	2.175(5)	Fe5-O2-Fe6	111.62(18)
Fe7-O3	1.919(5)	Fe6-O18-Fe7	126.79(25)
Fe7-O12	2.044(6)	Fe7-O3-Fe8	111.44(17)

BVS

atom	Fe ^{II}	Fe ^{III}	Assignment
Fe1	2.762	2.955	Fe ^{III}
Fe2	2.909	3.112	Fe ^{III}
Fe3	2.816	2.957	Fe ^{III}
Fe4	2.915	3.046	Fe ^{III}
Fe5	2.784	2.927	Fe ^{III}
Fe6	2.898	3.030	Fe ^{III}
Fe7	2.840	2.985	Fe ^{III}
Fe8	2.939	3.074	Fe ^{III}