

Electronic Supplementary Information

Precursors to Dinitrogen Reduction: Synthesis and Reactivity of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂(η^2 -H₂)H]⁺ and *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂(N₂)H]⁺

Justin L. Crossland, Douglas M. Young, Lev N. Zakharov, David R. Tyler*
Department of Chemistry, University of Oregon, Eugene, Oregon 97403

Table of Contents

- Figure S1.** ¹H NMR spectrum of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂(H₂)H][BPh₄] **S-2**.
Figure S2. ³¹P{¹H} NMR spectrum of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂(H₂)H][BPh₄] **S-2**.
Figure S3. ³¹P NMR spectrum of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂(H₂)H][BPh₄] **S-3**.
Figure S4. ¹H NMR spectrum of [Fe(DMeOPrPE)₂Cl][BPh₄] **S-3**.
Figure S5. ³¹P{¹H} NMR spectrum of [Fe(DMeOPrPE)₂Cl][BPh₄] **S-4**.
Figure S6. ³¹P{¹H} NMR spectrum of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)][BPh₄] **S-4**.
Figure S7. ¹H NMR spectrum of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)][BPh₄] **S-5**.
Figure S8. IR spectrum (KBr pellet) of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)][BPh₄] **S-5**.
Table S1. Atomic coordinates for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂(H₂)H][BPh₄] **S-6**.
Table S2. Bond lengths and angles for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂(H₂)H][BPh₄] **S-9**.
Table S3. Atomic coordinates for [Fe(DMeOPrPE)₂Cl][BPh₄] **S-25**.
Table S4. Bond lengths and angles for [Fe(DMeOPrPE)₂Cl][BPh₄] **S-28**.
Table S5. Atomic coordinates for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)][BPh₄] **S-34**.
Table S6. Bond lengths and angles for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)][BPh₄] **S-37**.

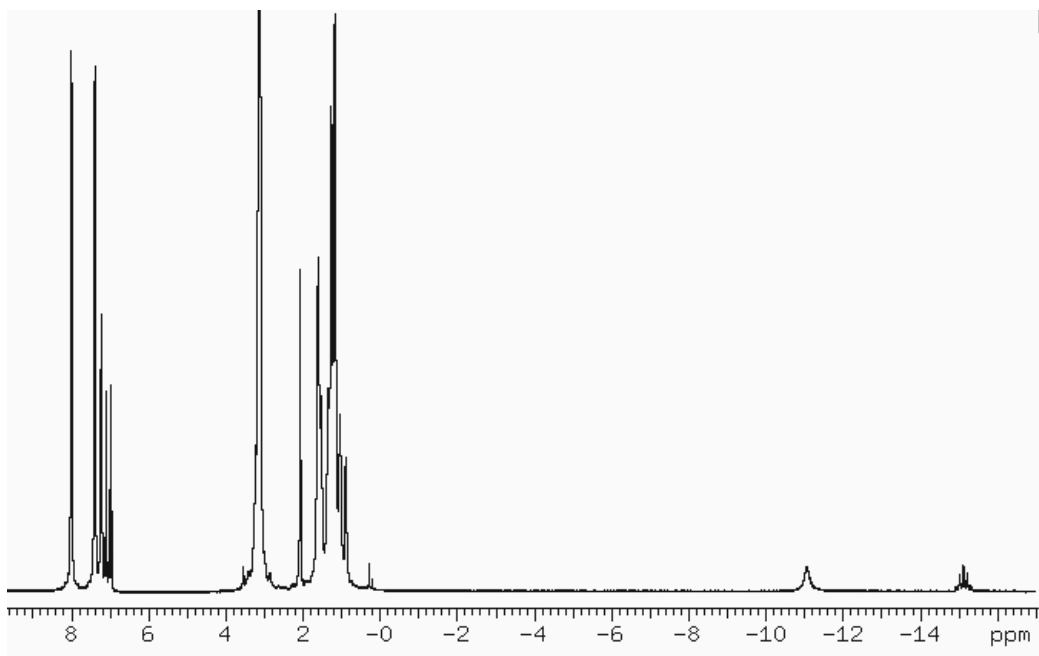


Figure S1. ^1H NMR spectrum (toluene- d_8) at 233K of *trans*- $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2(\text{H}_2)\text{H}][\text{BPh}_4]$.

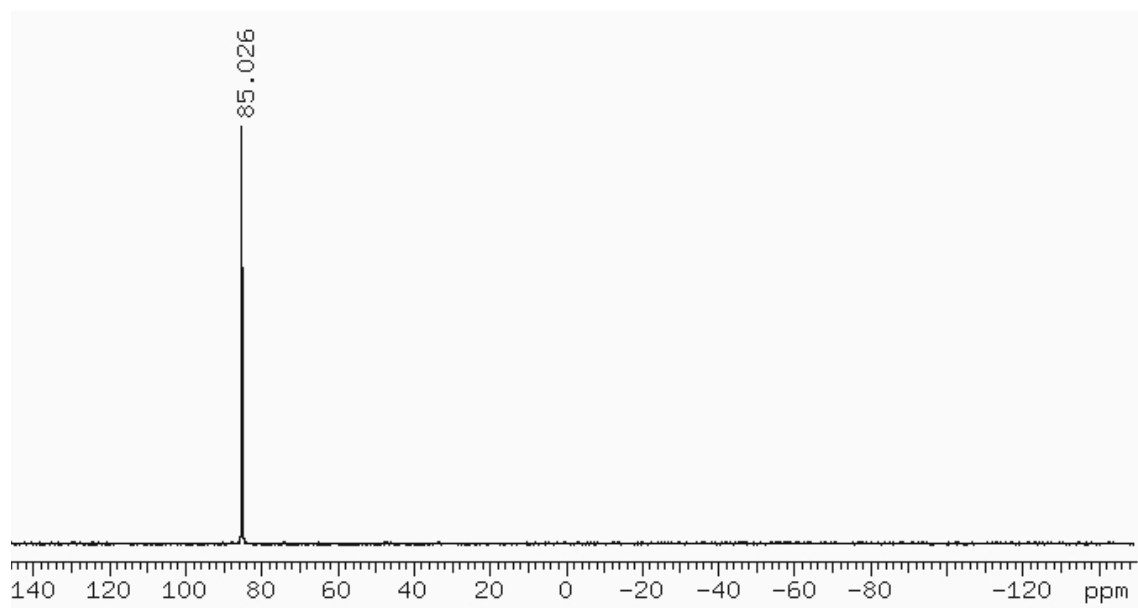


Figure S2. $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR spectrum (toluene- d_8) of *trans*- $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2(\text{H}_2)\text{H}][\text{BPh}_4]$.

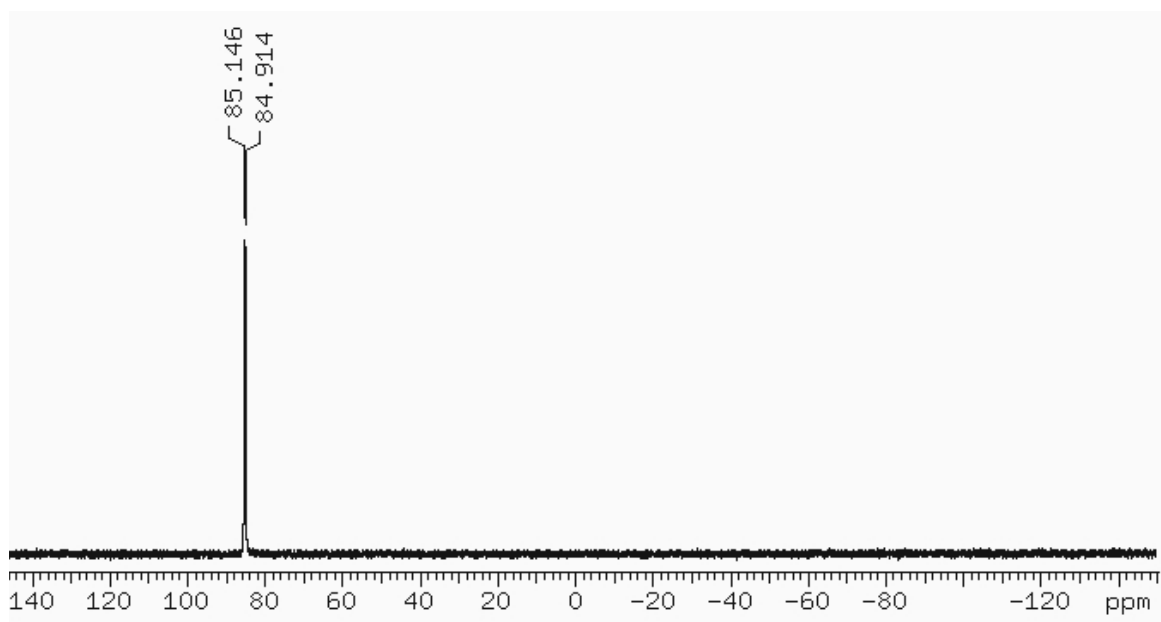


Figure S3. ^{31}P NMR spectrum (toluene- d_8) at 233K of *trans*- $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2(\text{H}_2)\text{H}][\text{BPh}_4]$.

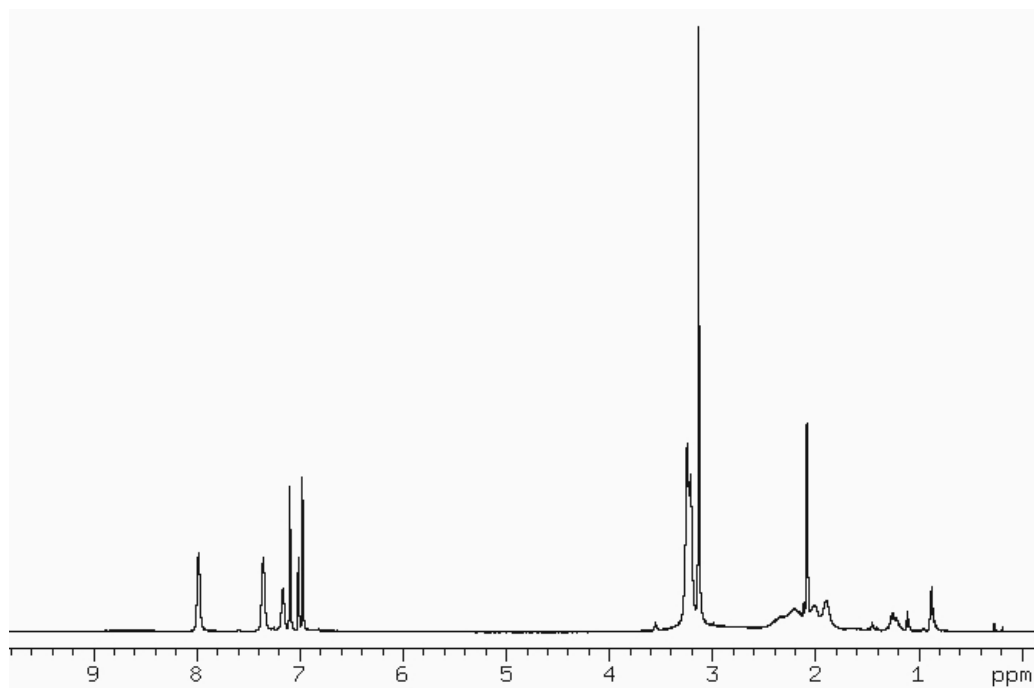


Figure S4. ^1H NMR spectrum (toluene- d_8) of $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2\text{Cl}][\text{BPh}_4]$.

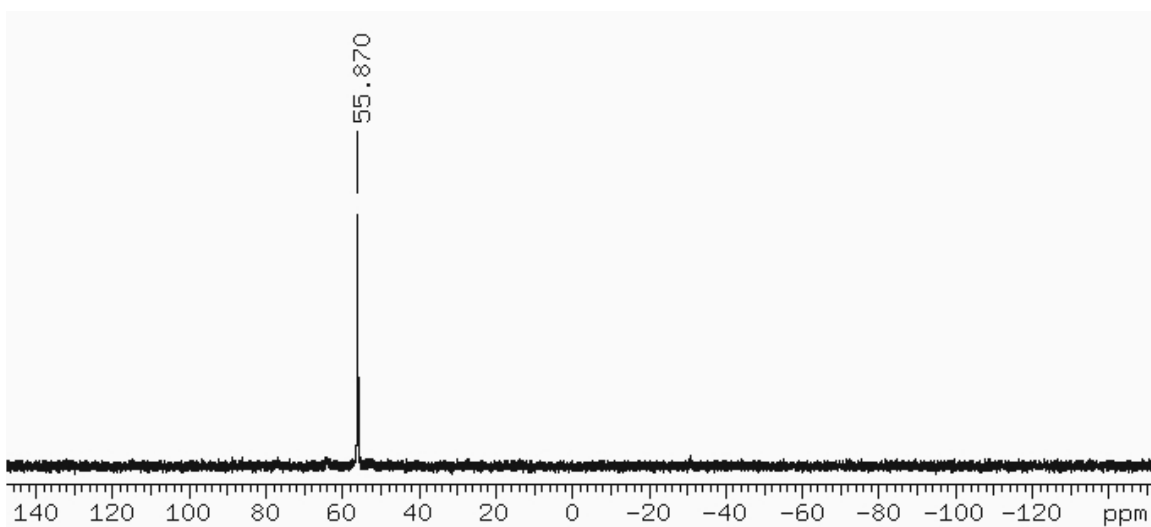


Figure S5. $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR spectrum (toluene- d_8) at 193K of $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2\text{Cl}][\text{BPh}_4]$.

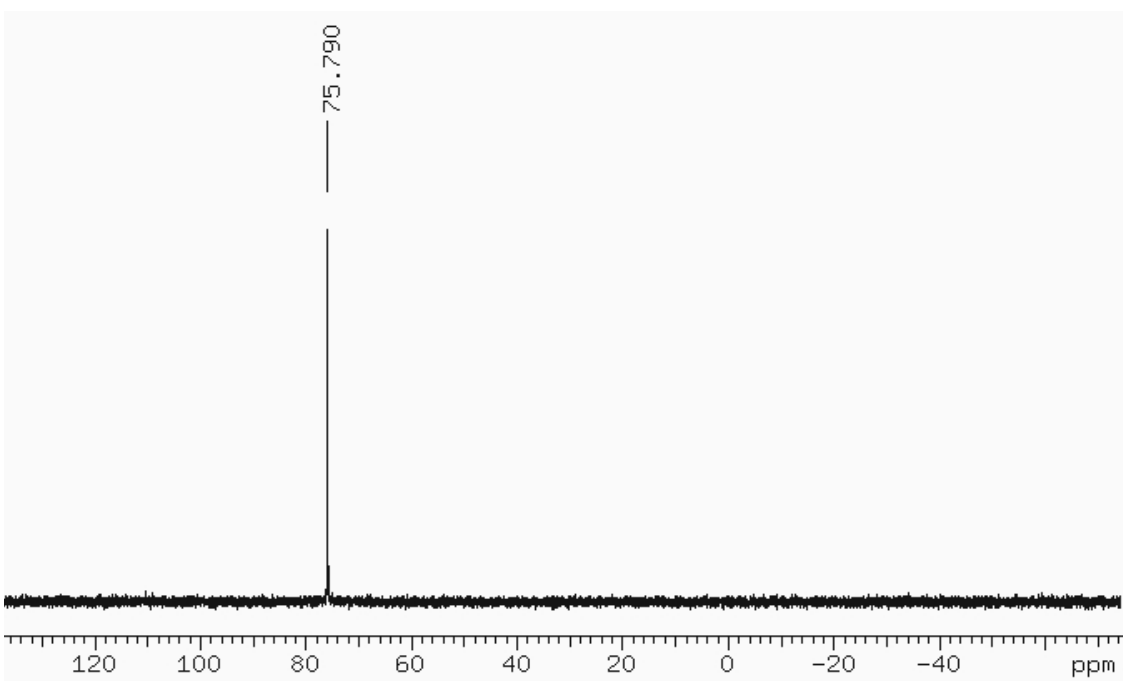


Figure S6. $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR spectrum of *trans*- $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2\text{H}(\text{N}_2)][\text{BPh}_4]$.

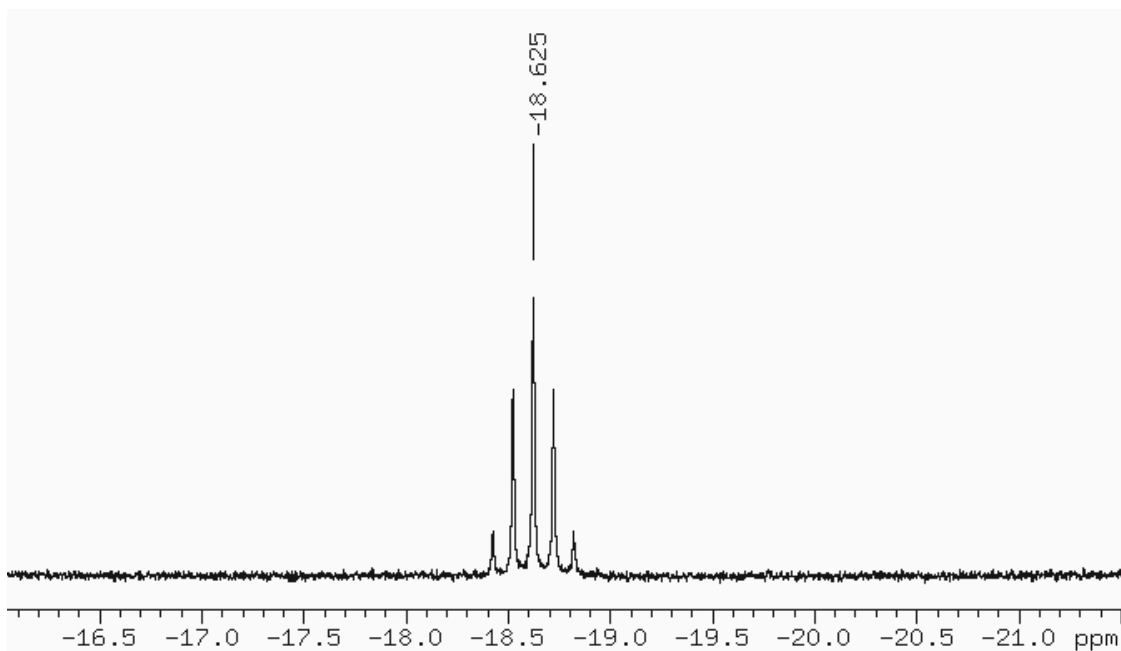


Figure S7. ¹H NMR spectrum of the hydride region of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)] [BPh₄].

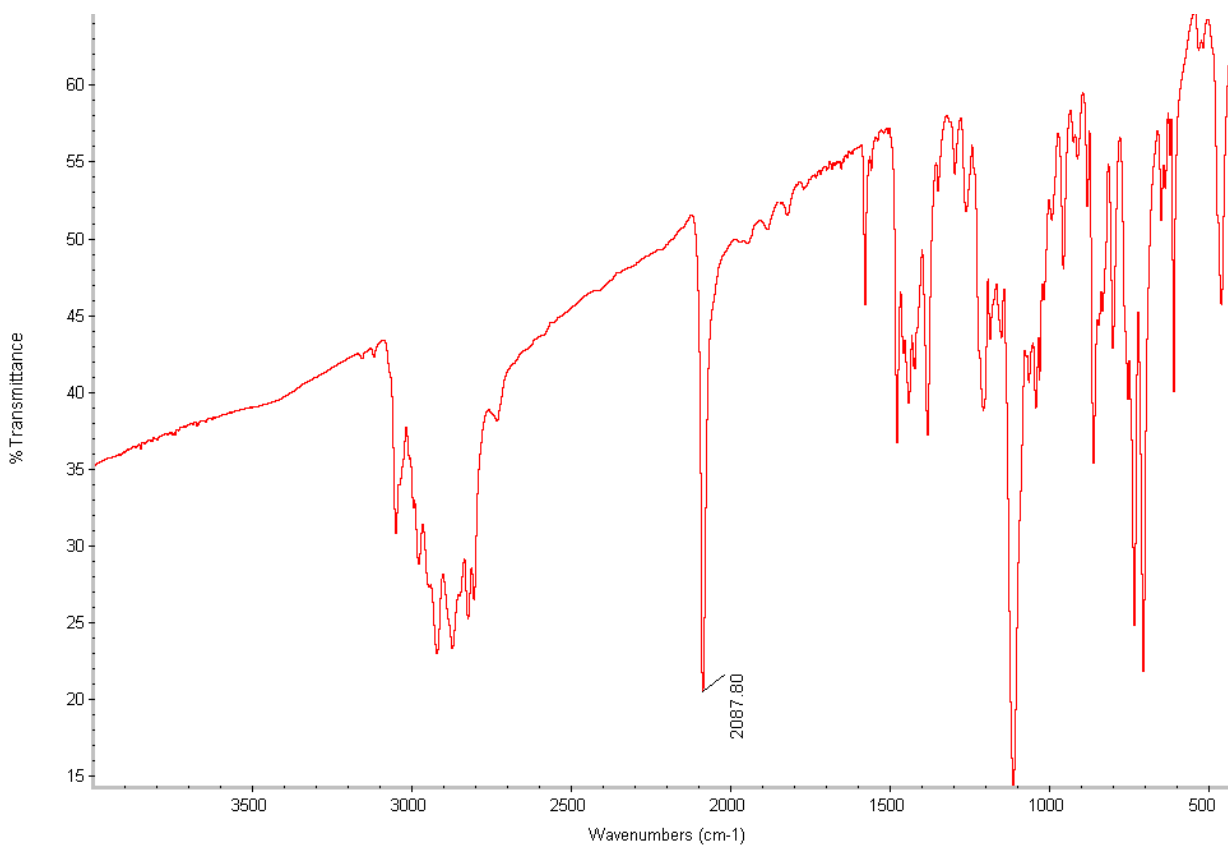


Figure S8. IR spectrum (KBr pellet) of *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)] [BPh₄].

Table S1. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(H₂)] [BPh₄]. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	2596(2)	3014(1)	2786(1)	15(1)
Fe(1A)	2909(8)	3109(3)	2731(2)	15(1)
P(1)	2057(1)	4209(1)	2680(1)	14(1)
P(2)	3667(1)	3465(1)	3993(1)	15(1)
P(3)	3328(1)	1888(1)	2867(1)	15(1)
P(4)	1775(1)	2641(1)	1548(1)	15(1)
O(1)	-1851(1)	4761(1)	2619(1)	26(1)
O(2)	5168(1)	6462(1)	2238(1)	31(1)
O(3)	1232(1)	2592(1)	5711(1)	34(1)
O(4)	8273(1)	4202(1)	5164(1)	24(1)
O(5)	2646(1)	843(1)	5104(1)	31(1)
O(6)	7550(1)	1695(1)	3743(1)	31(1)
O(7)	-2692(1)	2228(1)	1210(1)	24(1)
O(8)	5513(1)	4182(1)	429(1)	27(1)
C(1)	2320(1)	4640(1)	3654(1)	17(1)
C(2)	3663(1)	4546(1)	4125(1)	17(1)
C(3)	2384(1)	1191(1)	2014(1)	19(1)
C(4)	2245(1)	1705(1)	1325(1)	20(1)
C(5)	370(1)	4300(1)	2213(1)	17(1)
C(6)	-718(1)	3746(1)	2500(1)	19(1)
C(7)	-2022(1)	3991(1)	2243(1)	23(1)
C(8)	-3014(2)	5058(1)	2389(1)	34(1)
C(9)	3060(1)	5038(1)	2270(1)	18(1)
C(10)	3093(2)	5913(1)	2504(1)	24(1)
C(11)	3857(1)	6550(1)	2101(1)	26(1)
C(12)	5964(2)	7128(1)	1966(1)	39(1)
C(13)	2859(1)	2974(1)	4699(1)	19(1)
C(14)	3184(2)	3418(1)	5484(1)	31(1)
C(15)	2618(2)	2858(1)	6027(1)	33(1)
C(16)	652(2)	2045(1)	6187(1)	45(1)

C(17)	5408(1)	3470(1)	4449(1)	17(1)
C(18)	6408(1)	3938(1)	4054(1)	21(1)
C(19)	7796(1)	3836(1)	4405(1)	24(1)
C(20)	9553(2)	4092(1)	5540(1)	32(1)
C(21)	3198(1)	1229(1)	3657(1)	18(1)
C(22)	1815(1)	977(1)	3773(1)	22(1)
C(23)	1764(2)	417(1)	4419(1)	28(1)
C(24)	2644(2)	364(1)	5742(1)	45(1)
C(25)	5058(1)	1996(1)	2867(1)	19(1)
C(26)	5508(1)	1217(1)	2788(1)	25(1)
C(27)	7001(2)	1393(1)	2969(1)	26(1)
C(28)	8955(2)	1872(1)	3962(1)	43(1)
C(29)	-26(1)	2354(1)	1116(1)	18(1)
C(30)	-823(1)	1647(1)	1450(1)	21(1)
C(31)	-2295(1)	1512(1)	1061(1)	23(1)
C(32)	-4009(2)	2187(1)	782(1)	33(1)
C(33)	2257(1)	3296(1)	817(1)	19(1)
C(34)	3753(1)	3644(1)	968(1)	22(1)
C(35)	4151(1)	3760(1)	233(1)	25(1)
C(36)	6038(2)	4204(1)	-208(1)	33(1)
B(1)	8836(1)	1680(1)	8229(1)	16(1)
C(37)	7890(1)	1701(1)	7351(1)	17(1)
C(38)	6971(1)	991(1)	6953(1)	22(1)
C(39)	6211(2)	975(1)	6200(1)	28(1)
C(40)	6326(2)	1681(1)	5808(1)	30(1)
C(41)	7213(2)	2394(1)	6178(1)	27(1)
C(42)	7975(1)	2397(1)	6930(1)	20(1)
C(43)	9338(1)	2607(1)	8655(1)	16(1)
C(44)	10352(1)	3206(1)	8483(1)	20(1)
C(45)	10754(1)	4005(1)	8803(1)	21(1)
C(46)	10159(1)	4240(1)	9325(1)	21(1)
C(47)	9175(1)	3665(1)	9519(1)	20(1)
C(48)	8775(1)	2866(1)	9188(1)	17(1)
C(49)	8003(1)	1056(1)	8723(1)	17(1)
C(50)	6640(1)	959(1)	8623(1)	22(1)
C(51)	5937(1)	438(1)	9043(1)	24(1)

C(52)	6577(1)	-12(1)	9592(1)	22(1)
C(53)	7926(1)	81(1)	9722(1)	21(1)
C(54)	8614(1)	601(1)	9294(1)	19(1)
C(55)	10131(1)	1349(1)	8187(1)	17(1)
C(56)	11344(1)	1558(1)	8765(1)	20(1)
C(57)	12428(1)	1255(1)	8746(1)	24(1)
C(58)	12337(1)	726(1)	8146(1)	25(1)
C(59)	11158(1)	499(1)	7568(1)	25(1)
C(60)	10086(1)	809(1)	7592(1)	21(1)

Table S2. Bond lengths [Å] and angles [°] for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(H₂)][BPh₄].

Fe(1)-P(4)	2.2158(6)
Fe(1)-P(3)	2.2203(5)
Fe(1)-P(2)	2.2239(5)
Fe(1)-P(1)	2.2278(5)
Fe(1)-H(1)	1.559(19)
Fe(1)-H(2)	1.52(3)
Fe(1)-H(3)	1.51(3)
Fe(1A)-P(4)	2.207(4)
Fe(1A)-P(3)	2.217(4)
Fe(1A)-P(2)	2.248(4)
Fe(1A)-P(1)	2.256(4)
Fe(1A)-H(1)	1.183(19)
Fe(1A)-H(2)	1.89(3)
Fe(1A)-H(3)	1.89(3)
P(1)-C(5)	1.8365(13)
P(1)-C(1)	1.8422(13)
P(1)-C(9)	1.8482(13)
P(2)-C(13)	1.8395(14)
P(2)-C(17)	1.8395(13)
P(2)-C(2)	1.8447(13)
P(3)-C(21)	1.8351(13)
P(3)-C(25)	1.8390(14)
P(3)-C(3)	1.8446(13)
P(4)-C(29)	1.8358(13)
P(4)-C(33)	1.8387(14)
P(4)-C(4)	1.8511(13)
O(1)-C(7)	1.4191(17)
O(1)-C(8)	1.4238(18)
O(2)-C(11)	1.4181(17)
O(2)-C(12)	1.4230(18)
O(3)-C(15)	1.411(2)
O(3)-C(16)	1.423(2)
O(4)-C(19)	1.4216(17)
O(4)-C(20)	1.4251(17)

O(5)-C(24)	1.416(2)
O(5)-C(23)	1.4170(19)
O(6)-C(27)	1.4136(19)
O(6)-C(28)	1.4191(19)
O(7)-C(32)	1.4124(17)
O(7)-C(31)	1.4276(16)
O(8)-C(35)	1.4217(17)
O(8)-C(36)	1.4226(18)
C(1)-C(2)	1.5186(18)
C(1)-H(1A)	0.951(16)
C(1)-H(1B)	0.971(17)
C(2)-H(2A)	0.961(16)
C(2)-H(2B)	0.961(17)
C(3)-C(4)	1.5206(19)
C(3)-H(3A)	0.922(19)
C(3)-H(3B)	0.959(17)
C(4)-H(4A)	0.997(18)
C(4)-H(4B)	0.956(18)
C(5)-C(6)	1.5322(18)
C(5)-H(5A)	0.991(17)
C(5)-H(5B)	0.965(17)
C(6)-C(7)	1.5188(18)
C(6)-H(6A)	0.965(16)
C(6)-H(6B)	0.948(17)
C(7)-H(7A)	0.989(17)
C(7)-H(7B)	1.010(17)
C(8)-H(8A)	0.97(2)
C(8)-H(8B)	0.95(2)
C(8)-H(8C)	1.02(2)
C(9)-C(10)	1.5298(18)
C(9)-H(9A)	0.961(16)
C(9)-H(9B)	0.982(17)
C(10)-C(11)	1.5136(19)
C(10)-H(10A)	0.933(19)
C(10)-H(10B)	0.983(19)
C(11)-H(11A)	1.003(18)

C(11)-H(11B)	0.989(19)
C(12)-H(12A)	0.95(2)
C(12)-H(12B)	0.99(2)
C(12)-H(12C)	1.01(2)
C(13)-C(14)	1.5266(19)
C(13)-H(13A)	0.992(17)
C(13)-H(13B)	0.935(17)
C(14)-C(15)	1.518(2)
C(14)-H(14A)	1.03(2)
C(14)-H(14B)	0.97(2)
C(15)-H(15A)	1.01(2)
C(15)-H(15B)	0.977(18)
C(16)-H(16A)	0.99(2)
C(16)-H(16B)	1.03(2)
C(16)-H(16C)	1.02(2)
C(17)-C(18)	1.5275(18)
C(17)-H(17A)	0.955(17)
C(17)-H(17B)	0.942(17)
C(18)-C(19)	1.5162(19)
C(18)-H(18A)	0.937(17)
C(18)-H(18B)	1.004(17)
C(19)-H(19A)	0.982(18)
C(19)-H(19B)	0.998(17)
C(20)-H(20A)	0.971(19)
C(20)-H(20B)	0.966(19)
C(20)-H(20C)	0.98(2)
C(21)-C(22)	1.5294(19)
C(21)-H(21A)	0.969(16)
C(21)-H(21B)	0.975(17)
C(22)-C(23)	1.516(2)
C(22)-H(22A)	0.987(17)
C(22)-H(22B)	0.951(17)
C(23)-H(23A)	1.016(18)
C(23)-H(23B)	0.996(19)
C(24)-H(24A)	0.98(2)
C(24)-H(24B)	1.02(2)

C(24)-H(24C)	1.01(2)
C(25)-C(26)	1.5291(19)
C(25)-H(25A)	1.008(18)
C(25)-H(25B)	0.949(17)
C(26)-C(27)	1.514(2)
C(26)-H(26A)	0.981(19)
C(26)-H(26B)	0.948(19)
C(27)-H(27A)	0.977(19)
C(27)-H(27B)	0.957(18)
C(28)-H(28A)	0.98(2)
C(28)-H(28B)	1.04(3)
C(28)-H(28C)	1.00(2)
C(29)-C(30)	1.5282(19)
C(29)-H(29A)	0.955(16)
C(29)-H(29B)	0.961(17)
C(30)-C(31)	1.5175(18)
C(30)-H(30A)	0.979(16)
C(30)-H(30B)	0.963(18)
C(31)-H(31A)	0.986(16)
C(31)-H(31B)	0.990(17)
C(32)-H(32A)	0.99(2)
C(32)-H(32B)	1.008(19)
C(32)-H(32C)	0.961(19)
C(33)-C(34)	1.5330(19)
C(33)-H(33A)	0.974(17)
C(33)-H(33B)	0.980(17)
C(34)-C(35)	1.515(2)
C(34)-H(34A)	0.985(17)
C(34)-H(34B)	1.011(18)
C(35)-H(35A)	0.990(18)
C(35)-H(35B)	0.990(18)
C(36)-H(36A)	1.01(2)
C(36)-H(36B)	0.996(18)
C(36)-H(36C)	1.01(2)
B(1)-C(43)	1.6475(18)
B(1)-C(55)	1.6504(19)

B(1)-C(49)	1.6512(19)
B(1)-C(37)	1.6527(19)
C(37)-C(42)	1.4027(18)
C(37)-C(38)	1.4107(19)
C(38)-C(39)	1.391(2)
C(38)-H(38)	0.930(17)
C(39)-C(40)	1.388(2)
C(39)-H(39)	0.961(19)
C(40)-C(41)	1.386(2)
C(40)-H(40)	0.95(2)
C(41)-C(42)	1.3926(19)
C(41)-H(41)	0.927(18)
C(42)-H(42)	0.945(17)
C(43)-C(48)	1.3998(18)
C(43)-C(44)	1.4096(18)
C(44)-C(45)	1.3907(19)
C(44)-H(44)	0.965(17)
C(45)-C(46)	1.392(2)
C(45)-H(45)	0.946(17)
C(46)-C(47)	1.385(2)
C(46)-H(46)	0.962(17)
C(47)-C(48)	1.3964(18)
C(47)-H(47)	0.960(16)
C(48)-H(48)	0.939(15)
C(49)-C(50)	1.4070(19)
C(49)-C(54)	1.4079(18)
C(50)-C(51)	1.393(2)
C(50)-H(50)	0.950(17)
C(51)-C(52)	1.391(2)
C(51)-H(51)	0.937(18)
C(52)-C(53)	1.385(2)
C(52)-H(52)	0.917(17)
C(53)-C(54)	1.3933(19)
C(53)-H(53)	0.974(17)
C(54)-H(54)	0.944(16)
C(55)-C(60)	1.4008(19)

C(55)-C(56)	1.4069(18)
C(56)-C(57)	1.3973(19)
C(56)-H(56)	0.918(17)
C(57)-C(58)	1.380(2)
C(57)-H(57)	0.944(17)
C(58)-C(59)	1.385(2)
C(58)-H(58)	0.957(18)
C(59)-C(60)	1.3942(19)
C(59)-H(59)	0.980(17)
C(60)-H(60)	0.961(17)
P(4)-Fe(1)-P(3)	85.37(2)
P(4)-Fe(1)-P(2)	172.49(11)
P(3)-Fe(1)-P(2)	93.986(19)
P(4)-Fe(1)-P(1)	94.43(2)
P(3)-Fe(1)-P(1)	174.09(11)
P(2)-Fe(1)-P(1)	85.440(17)
P(4)-Fe(1)-H(1)	86.7(7)
P(3)-Fe(1)-H(1)	88.8(7)
P(2)-Fe(1)-H(1)	85.8(7)
P(1)-Fe(1)-H(1)	85.3(7)
P(4)-Fe(1)-H(2)	91.3(11)
P(3)-Fe(1)-H(2)	79.9(12)
P(2)-Fe(1)-H(2)	96.0(11)
P(1)-Fe(1)-H(2)	106.0(12)
H(1)-Fe(1)-H(2)	168.7(13)
P(4)-Fe(1)-H(3)	96.5(10)
P(3)-Fe(1)-H(3)	106.2(11)
P(2)-Fe(1)-H(3)	90.8(10)
P(1)-Fe(1)-H(3)	79.7(11)
H(1)-Fe(1)-H(3)	164.8(13)
H(2)-Fe(1)-H(3)	26.5(13)
P(4)-Fe(1A)-P(3)	85.66(12)
P(4)-Fe(1A)-P(2)	168.0(5)
P(3)-Fe(1A)-P(2)	93.41(14)
P(4)-Fe(1A)-P(1)	93.90(14)

P(3)-Fe(1A)-P(1)	166.5(5)
P(2)-Fe(1A)-P(1)	84.22(13)
P(4)-Fe(1A)-H(1)	97.5(10)
P(3)-Fe(1A)-H(1)	99.9(10)
P(2)-Fe(1A)-H(1)	94.5(10)
P(1)-Fe(1A)-H(1)	93.5(10)
P(4)-Fe(1A)-H(2)	82.7(9)
P(3)-Fe(1A)-H(2)	73.2(10)
P(2)-Fe(1A)-H(2)	85.6(9)
P(1)-Fe(1A)-H(2)	93.3(10)
H(1)-Fe(1A)-H(2)	173.1(13)
P(4)-Fe(1A)-H(3)	86.8(8)
P(3)-Fe(1A)-H(3)	94.2(9)
P(2)-Fe(1A)-H(3)	81.4(8)
P(1)-Fe(1A)-H(3)	72.2(9)
H(1)-Fe(1A)-H(3)	165.5(13)
H(2)-Fe(1A)-H(3)	21.2(11)
C(5)-P(1)-C(1)	101.15(6)
C(5)-P(1)-C(9)	101.63(6)
C(1)-P(1)-C(9)	102.81(6)
C(5)-P(1)-Fe(1)	122.81(6)
C(1)-P(1)-Fe(1)	107.35(5)
C(9)-P(1)-Fe(1)	118.23(7)
C(5)-P(1)-Fe(1A)	129.57(17)
C(1)-P(1)-Fe(1A)	109.88(11)
C(9)-P(1)-Fe(1A)	108.7(2)
Fe(1)-P(1)-Fe(1A)	9.64(18)
C(13)-P(2)-C(17)	101.53(6)
C(13)-P(2)-C(2)	102.98(6)
C(17)-P(2)-C(2)	102.63(6)
C(13)-P(2)-Fe(1)	114.47(7)
C(17)-P(2)-Fe(1)	123.81(6)
C(2)-P(2)-Fe(1)	109.02(4)
C(13)-P(2)-Fe(1A)	123.7(2)
C(17)-P(2)-Fe(1A)	116.1(2)
C(2)-P(2)-Fe(1A)	107.37(11)

Fe(1)-P(2)-Fe(1A)	9.68(18)
C(21)-P(3)-C(25)	102.02(6)
C(21)-P(3)-C(3)	102.87(6)
C(25)-P(3)-C(3)	102.97(6)
C(21)-P(3)-Fe(1)	120.39(6)
C(25)-P(3)-Fe(1)	117.40(7)
C(3)-P(3)-Fe(1)	109.00(5)
C(21)-P(3)-Fe(1A)	127.43(18)
C(25)-P(3)-Fe(1A)	107.9(2)
C(3)-P(3)-Fe(1A)	110.97(11)
Fe(1)-P(3)-Fe(1A)	9.77(19)
C(29)-P(4)-C(33)	98.96(6)
C(29)-P(4)-C(4)	101.75(6)
C(33)-P(4)-C(4)	100.77(6)
C(29)-P(4)-Fe(1A)	129.0(2)
C(33)-P(4)-Fe(1A)	113.9(2)
C(4)-P(4)-Fe(1A)	108.54(11)
C(29)-P(4)-Fe(1)	119.87(7)
C(33)-P(4)-Fe(1)	122.01(6)
C(4)-P(4)-Fe(1)	110.20(5)
Fe(1A)-P(4)-Fe(1)	9.80(19)
C(7)-O(1)-C(8)	112.09(12)
C(11)-O(2)-C(12)	110.78(12)
C(15)-O(3)-C(16)	110.91(14)
C(19)-O(4)-C(20)	111.58(11)
C(24)-O(5)-C(23)	111.95(14)
C(27)-O(6)-C(28)	111.68(13)
C(32)-O(7)-C(31)	111.51(11)
C(35)-O(8)-C(36)	111.90(12)
C(2)-C(1)-P(1)	106.72(9)
C(2)-C(1)-H(1A)	111.7(9)
P(1)-C(1)-H(1A)	112.1(9)
C(2)-C(1)-H(1B)	110.2(10)
P(1)-C(1)-H(1B)	106.5(9)
H(1A)-C(1)-H(1B)	109.5(13)
C(1)-C(2)-P(2)	107.06(8)

C(1)-C(2)-H(2A)	109.4(9)
P(2)-C(2)-H(2A)	107.6(9)
C(1)-C(2)-H(2B)	112.9(10)
P(2)-C(2)-H(2B)	110.7(10)
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.1(13)
C(4)-C(3)-P(3)	107.44(9)
C(4)-C(3)-H(3A)	113.0(11)
P(3)-C(3)-H(3A)	110.2(11)
C(4)-C(3)-H(3B)	111.8(10)
P(3)-C(3)-H(3B)	107.1(10)
H(3A)-C(3)-H(3B)	107.1(14)
C(3)-C(4)-P(4)	109.58(9)
C(3)-C(4)-H(4A)	110.5(10)
P(4)-C(4)-H(4A)	108.1(10)
C(3)-C(4)-H(4B)	113.0(11)
P(4)-C(4)-H(4B)	108.4(11)
H(4A)-C(4)-H(4B)	107.1(14)
C(6)-C(5)-P(1)	114.95(9)
C(6)-C(5)-H(5A)	109.9(9)
P(1)-C(5)-H(5A)	106.0(9)
C(6)-C(5)-H(5B)	108.5(10)
P(1)-C(5)-H(5B)	109.9(10)
H(5A)-C(5)-H(5B)	107.4(13)
C(7)-C(6)-C(5)	112.31(11)
C(7)-C(6)-H(6A)	107.6(9)
C(5)-C(6)-H(6A)	109.9(9)
C(7)-C(6)-H(6B)	109.7(10)
C(5)-C(6)-H(6B)	109.4(10)
H(6A)-C(6)-H(6B)	107.8(13)
O(1)-C(7)-C(6)	108.04(11)
O(1)-C(7)-H(7A)	110.8(10)
C(6)-C(7)-H(7A)	110.8(9)
O(1)-C(7)-H(7B)	109.4(9)
C(6)-C(7)-H(7B)	111.3(9)
H(7A)-C(7)-H(7B)	106.4(13)
O(1)-C(8)-H(8A)	110.6(11)

O(1)-C(8)-H(8B)	103.3(12)
H(8A)-C(8)-H(8B)	112.1(16)
O(1)-C(8)-H(8C)	111.0(12)
H(8A)-C(8)-H(8C)	107.9(16)
H(8B)-C(8)-H(8C)	111.8(16)
C(10)-C(9)-P(1)	116.79(9)
C(10)-C(9)-H(9A)	110.2(9)
P(1)-C(9)-H(9A)	107.8(9)
C(10)-C(9)-H(9B)	109.6(10)
P(1)-C(9)-H(9B)	106.1(10)
H(9A)-C(9)-H(9B)	105.8(13)
C(11)-C(10)-C(9)	113.29(12)
C(11)-C(10)-H(10A)	106.8(11)
C(9)-C(10)-H(10A)	111.4(11)
C(11)-C(10)-H(10B)	108.6(11)
C(9)-C(10)-H(10B)	108.7(11)
H(10A)-C(10)-H(10B)	107.9(15)
O(2)-C(11)-C(10)	109.78(12)
O(2)-C(11)-H(11A)	110.8(10)
C(10)-C(11)-H(11A)	110.7(10)
O(2)-C(11)-H(11B)	106.7(11)
C(10)-C(11)-H(11B)	111.8(11)
H(11A)-C(11)-H(11B)	107.0(14)
O(2)-C(12)-H(12A)	109.1(14)
O(2)-C(12)-H(12B)	107.1(12)
H(12A)-C(12)-H(12B)	110.2(18)
O(2)-C(12)-H(12C)	109.9(12)
H(12A)-C(12)-H(12C)	104.9(18)
H(12B)-C(12)-H(12C)	115.5(17)
C(14)-C(13)-P(2)	118.92(10)
C(14)-C(13)-H(13A)	107.8(9)
P(2)-C(13)-H(13A)	107.2(10)
C(14)-C(13)-H(13B)	109.0(10)
P(2)-C(13)-H(13B)	107.3(10)
H(13A)-C(13)-H(13B)	105.8(14)
C(15)-C(14)-C(13)	110.89(12)

C(15)-C(14)-H(14A)	109.7(11)
C(13)-C(14)-H(14A)	111.0(11)
C(15)-C(14)-H(14B)	105.8(11)
C(13)-C(14)-H(14B)	110.6(11)
H(14A)-C(14)-H(14B)	108.6(15)
O(3)-C(15)-C(14)	108.51(13)
O(3)-C(15)-H(15A)	109.4(12)
C(14)-C(15)-H(15A)	110.3(12)
O(3)-C(15)-H(15B)	110.6(10)
C(14)-C(15)-H(15B)	110.4(10)
H(15A)-C(15)-H(15B)	107.6(15)
O(3)-C(16)-H(16A)	110.8(14)
O(3)-C(16)-H(16B)	106.4(13)
H(16A)-C(16)-H(16B)	112.6(19)
O(3)-C(16)-H(16C)	109.1(12)
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.7(18)
H(16B)-C(16)-H(16C)	108.1(18)
C(18)-C(17)-P(2)	115.68(9)
C(18)-C(17)-H(17A)	110.6(10)
P(2)-C(17)-H(17A)	106.6(10)
C(18)-C(17)-H(17B)	110.7(10)
P(2)-C(17)-H(17B)	108.3(10)
H(17A)-C(17)-H(17B)	104.2(13)
C(19)-C(18)-C(17)	112.85(11)
C(19)-C(18)-H(18A)	107.7(10)
C(17)-C(18)-H(18A)	109.9(10)
C(19)-C(18)-H(18B)	109.1(9)
C(17)-C(18)-H(18B)	110.0(9)
H(18A)-C(18)-H(18B)	107.1(14)
O(4)-C(19)-C(18)	108.72(11)
O(4)-C(19)-H(19A)	110.1(10)
C(18)-C(19)-H(19A)	111.4(10)
O(4)-C(19)-H(19B)	107.5(9)
C(18)-C(19)-H(19B)	111.8(9)
H(19A)-C(19)-H(19B)	107.3(13)
O(4)-C(20)-H(20A)	110.0(11)

O(4)-C(20)-H(20B)	107.7(11)
H(20A)-C(20)-H(20B)	111.7(15)
O(4)-C(20)-H(20C)	109.8(12)
H(20A)-C(20)-H(20C)	107.0(15)
H(20B)-C(20)-H(20C)	110.7(15)
C(22)-C(21)-P(3)	114.75(9)
C(22)-C(21)-H(21A)	110.5(9)
P(3)-C(21)-H(21A)	105.8(9)
C(22)-C(21)-H(21B)	109.6(10)
P(3)-C(21)-H(21B)	108.5(10)
H(21A)-C(21)-H(21B)	107.4(13)
C(23)-C(22)-C(21)	112.21(12)
C(23)-C(22)-H(22A)	108.3(9)
C(21)-C(22)-H(22A)	110.7(9)
C(23)-C(22)-H(22B)	107.4(10)
C(21)-C(22)-H(22B)	110.8(10)
H(22A)-C(22)-H(22B)	107.2(14)
O(5)-C(23)-C(22)	108.32(12)
O(5)-C(23)-H(23A)	108.4(10)
C(22)-C(23)-H(23A)	111.4(10)
O(5)-C(23)-H(23B)	108.5(10)
C(22)-C(23)-H(23B)	111.3(10)
H(23A)-C(23)-H(23B)	108.7(14)
O(5)-C(24)-H(24A)	106.7(12)
O(5)-C(24)-H(24B)	108.7(13)
H(24A)-C(24)-H(24B)	108.5(17)
O(5)-C(24)-H(24C)	110.6(11)
H(24A)-C(24)-H(24C)	111.0(16)
H(24B)-C(24)-H(24C)	111.2(17)
C(26)-C(25)-P(3)	117.90(10)
C(26)-C(25)-H(25A)	110.7(10)
P(3)-C(25)-H(25A)	106.8(10)
C(26)-C(25)-H(25B)	109.8(10)
P(3)-C(25)-H(25B)	106.0(10)
H(25A)-C(25)-H(25B)	104.7(14)
C(27)-C(26)-C(25)	111.44(12)

C(27)-C(26)-H(26A)	109.6(11)
C(25)-C(26)-H(26A)	110.4(11)
C(27)-C(26)-H(26B)	107.0(11)
C(25)-C(26)-H(26B)	111.1(11)
H(26A)-C(26)-H(26B)	107.2(15)
O(6)-C(27)-C(26)	107.98(12)
O(6)-C(27)-H(27A)	108.5(10)
C(26)-C(27)-H(27A)	111.1(10)
O(6)-C(27)-H(27B)	109.6(10)
C(26)-C(27)-H(27B)	111.6(10)
H(27A)-C(27)-H(27B)	108.0(14)
O(6)-C(28)-H(28A)	106.6(14)
O(6)-C(28)-H(28B)	111.1(14)
H(28A)-C(28)-H(28B)	112.8(19)
O(6)-C(28)-H(28C)	108.7(13)
H(28A)-C(28)-H(28C)	107.7(18)
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.7(18)
C(30)-C(29)-P(4)	116.81(9)
C(30)-C(29)-H(29A)	108.9(10)
P(4)-C(29)-H(29A)	106.7(9)
C(30)-C(29)-H(29B)	110.0(10)
P(4)-C(29)-H(29B)	106.2(10)
H(29A)-C(29)-H(29B)	108.0(13)
C(31)-C(30)-C(29)	110.58(11)
C(31)-C(30)-H(30A)	109.7(9)
C(29)-C(30)-H(30A)	111.2(9)
C(31)-C(30)-H(30B)	107.7(10)
C(29)-C(30)-H(30B)	110.2(10)
H(30A)-C(30)-H(30B)	107.3(13)
O(7)-C(31)-C(30)	108.57(11)
O(7)-C(31)-H(31A)	108.8(9)
C(30)-C(31)-H(31A)	111.5(9)
O(7)-C(31)-H(31B)	108.9(9)
C(30)-C(31)-H(31B)	110.2(9)
H(31A)-C(31)-H(31B)	108.8(13)
O(7)-C(32)-H(32A)	111.9(11)

O(7)-C(32)-H(32B)	106.7(11)
H(32A)-C(32)-H(32B)	109.6(15)
O(7)-C(32)-H(32C)	109.1(11)
H(32A)-C(32)-H(32C)	107.4(15)
H(32B)-C(32)-H(32C)	112.3(15)
C(34)-C(33)-P(4)	114.76(9)
C(34)-C(33)-H(33A)	110.3(10)
P(4)-C(33)-H(33A)	109.2(10)
C(34)-C(33)-H(33B)	109.3(10)
P(4)-C(33)-H(33B)	106.5(10)
H(33A)-C(33)-H(33B)	106.5(13)
C(35)-C(34)-C(33)	112.06(11)
C(35)-C(34)-H(34A)	108.6(10)
C(33)-C(34)-H(34A)	110.4(10)
C(35)-C(34)-H(34B)	109.1(10)
C(33)-C(34)-H(34B)	109.8(10)
H(34A)-C(34)-H(34B)	106.7(14)
O(8)-C(35)-C(34)	107.67(11)
O(8)-C(35)-H(35A)	110.6(10)
C(34)-C(35)-H(35A)	110.9(10)
O(8)-C(35)-H(35B)	111.1(10)
C(34)-C(35)-H(35B)	110.4(10)
H(35A)-C(35)-H(35B)	106.2(14)
O(8)-C(36)-H(36A)	111.9(11)
O(8)-C(36)-H(36B)	108.2(10)
H(36A)-C(36)-H(36B)	109.1(15)
O(8)-C(36)-H(36C)	110.2(11)
H(36A)-C(36)-H(36C)	106.7(15)
H(36B)-C(36)-H(36C)	110.8(15)
C(43)-B(1)-C(55)	109.61(10)
C(43)-B(1)-C(49)	109.57(10)
C(55)-B(1)-C(49)	108.76(10)
C(43)-B(1)-C(37)	109.49(10)
C(55)-B(1)-C(37)	109.08(10)
C(49)-B(1)-C(37)	110.32(10)
C(42)-C(37)-C(38)	114.77(12)

C(42)-C(37)-B(1)	123.77(11)
C(38)-C(37)-B(1)	121.38(11)
C(39)-C(38)-C(37)	122.99(13)
C(39)-C(38)-H(38)	118.1(10)
C(37)-C(38)-H(38)	118.9(10)
C(40)-C(39)-C(38)	120.07(14)
C(40)-C(39)-H(39)	120.5(11)
C(38)-C(39)-H(39)	119.4(11)
C(41)-C(40)-C(39)	118.93(14)
C(41)-C(40)-H(40)	122.3(12)
C(39)-C(40)-H(40)	118.8(12)
C(40)-C(41)-C(42)	120.21(14)
C(40)-C(41)-H(41)	119.6(11)
C(42)-C(41)-H(41)	120.1(11)
C(41)-C(42)-C(37)	123.03(13)
C(41)-C(42)-H(42)	116.5(10)
C(37)-C(42)-H(42)	120.5(10)
C(48)-C(43)-C(44)	115.39(12)
C(48)-C(43)-B(1)	123.27(11)
C(44)-C(43)-B(1)	121.31(11)
C(45)-C(44)-C(43)	122.79(13)
C(45)-C(44)-H(44)	117.2(10)
C(43)-C(44)-H(44)	120.0(10)
C(44)-C(45)-C(46)	120.00(13)
C(44)-C(45)-H(45)	118.8(10)
C(46)-C(45)-H(45)	121.2(10)
C(47)-C(46)-C(45)	118.86(12)
C(47)-C(46)-H(46)	120.2(10)
C(45)-C(46)-H(46)	120.9(10)
C(46)-C(47)-C(48)	120.46(13)
C(46)-C(47)-H(47)	122.1(9)
C(48)-C(47)-H(47)	117.5(9)
C(47)-C(48)-C(43)	122.49(12)
C(47)-C(48)-H(48)	118.0(9)
C(43)-C(48)-H(48)	119.6(9)
C(50)-C(49)-C(54)	114.92(12)

C(50)-C(49)-B(1)	122.59(11)
C(54)-C(49)-B(1)	122.46(11)
C(51)-C(50)-C(49)	122.71(13)
C(51)-C(50)-H(50)	117.0(10)
C(49)-C(50)-H(50)	120.2(10)
C(52)-C(51)-C(50)	120.40(13)
C(52)-C(51)-H(51)	121.7(11)
C(50)-C(51)-H(51)	117.9(11)
C(53)-C(52)-C(51)	118.73(13)
C(53)-C(52)-H(52)	121.8(10)
C(51)-C(52)-H(52)	119.5(11)
C(52)-C(53)-C(54)	120.21(13)
C(52)-C(53)-H(53)	119.3(10)
C(54)-C(53)-H(53)	120.4(10)
C(53)-C(54)-C(49)	123.00(13)
C(53)-C(54)-H(54)	117.8(9)
C(49)-C(54)-H(54)	119.2(9)
C(60)-C(55)-C(56)	114.95(12)
C(60)-C(55)-B(1)	122.46(11)
C(56)-C(55)-B(1)	122.52(11)
C(57)-C(56)-C(55)	122.77(13)
C(57)-C(56)-H(56)	117.4(10)
C(55)-C(56)-H(56)	119.9(10)
C(58)-C(57)-C(56)	120.15(13)
C(58)-C(57)-H(57)	120.4(10)
C(56)-C(57)-H(57)	119.5(10)
C(57)-C(58)-C(59)	119.01(13)
C(57)-C(58)-H(58)	121.1(11)
C(59)-C(58)-H(58)	119.9(11)
C(58)-C(59)-C(60)	120.19(13)
C(58)-C(59)-H(59)	120.1(10)
C(60)-C(59)-H(59)	119.7(10)
C(59)-C(60)-C(55)	122.91(13)
C(59)-C(60)-H(60)	118.4(10)
C(55)-C(60)-H(60)	118.7(10)

Table S3. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2\text{Cl}][\text{BPh}_4]$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Fe(1)	6879(1)	2920(1)	2490(1)	25(1)
Cl(1)	5699(1)	3811(1)	2500(1)	33(1)
P(1)	8280(1)	4086(1)	2955(1)	25(1)
P(2)	6973(1)	2750(1)	3903(1)	28(1)
P(3)	7108(1)	2826(1)	1063(1)	28(1)
P(4)	5648(1)	1617(1)	2027(1)	29(1)
O(1)	12190(2)	4574(2)	3922(2)	49(1)
O(2)	7383(2)	7025(2)	2149(2)	67(1)
O(3)	7371(2)	-140(2)	3501(2)	59(1)
O(5)	10473(2)	2861(2)	1167(2)	46(1)
O(7)	6798(2)	-766(2)	711(2)	43(1)
O(8)	2028(2)	1892(2)	2769(3)	98(2)
B(1)	1546(3)	8037(2)	2643(3)	30(1)
C(1)	8176(3)	4475(2)	4070(2)	30(1)
C(2)	8010(3)	3656(2)	4524(2)	33(1)
C(3)	6174(3)	1829(2)	461(2)	35(1)
C(4)	5224(3)	1658(2)	924(2)	34(1)
C(5)	9472(2)	3723(2)	2988(2)	28(1)
C(6)	10399(2)	4339(2)	3566(2)	29(1)
C(7)	11302(2)	3927(2)	3511(2)	35(1)
C(8)	13078(3)	4264(3)	3775(4)	76(2)
C(9)	8605(2)	5117(2)	2479(2)	31(1)
C(10)	7858(3)	5707(2)	2588(3)	37(1)
C(11)	8078(3)	6473(3)	2068(3)	50(1)
C(12)	6404(4)	6571(4)	1724(4)	95(2)
C(13)	7204(3)	1705(2)	4188(2)	36(1)
C(14)	8105(3)	1451(2)	3795(2)	38(1)
C(15)	8220(3)	524(2)	3932(3)	44(1)
C(16)	7429(4)	-1025(3)	3617(4)	97(2)
C(17)	5845(3)	2907(3)	4392(2)	40(1)

C(18)	5828(4)	2834(3)	5322(3)	64(1)
C(19)	4873(7)	2967(6)	5668(9)	65(3)
O(4)	4803(3)	3818(3)	5515(3)	68(1)
C(20)	4012(7)	4089(7)	5938(6)	115(3)
C(18A)	5828(4)	2834(3)	5322(3)	64(1)
C(19A)	5022(15)	3240(20)	5710(20)	65(3)
O(4A)	4060(9)	2818(8)	5273(8)	68(1)
C(20A)	3267(17)	3147(17)	5625(15)	115(3)
C(21)	8327(3)	2739(2)	701(2)	32(1)
C(22)	8744(3)	2004(2)	1045(2)	34(1)
C(23)	9799(3)	2020(2)	794(2)	39(1)
C(24)	11474(3)	2942(3)	933(3)	66(1)
C(25)	6789(3)	3749(2)	591(2)	34(1)
C(26)	6913(3)	3727(3)	-348(2)	44(1)
C(27)	6373(4)	4294(4)	-778(3)	73(2)
O(6)	6580(3)	5156(3)	-418(3)	59(1)
C(28)	5924(5)	5636(5)	-834(4)	108(2)
C(27A)	6373(4)	4294(4)	-778(3)	73(2)
O(6A)	5751(9)	4752(7)	-469(7)	59(1)
C(28A)	5924(5)	5636(5)	-834(4)	108(2)
C(29)	6148(3)	608(2)	1928(2)	31(1)
C(30)	5484(3)	-258(2)	1379(2)	33(1)
C(31)	6041(3)	-994(2)	1260(2)	35(1)
C(32)	7308(3)	-1461(3)	539(3)	61(1)
C(33)	4472(3)	1242(2)	2509(3)	37(1)
C(34)	3697(3)	1803(3)	2467(3)	48(1)
C(35)	2783(3)	1421(3)	2907(4)	62(1)
C(36)	1076(3)	1462(3)	2912(3)	70(2)
C(37)	792(2)	8004(2)	3402(2)	29(1)
C(38)	450(3)	8754(2)	3756(2)	35(1)
C(39)	-191(3)	8715(3)	4393(2)	41(1)
C(40)	-529(3)	7923(3)	4715(2)	43(1)
C(41)	-194(3)	7178(3)	4399(2)	41(1)
C(42)	450(3)	7226(2)	3767(2)	34(1)
C(43)	1327(3)	7007(2)	2112(2)	30(1)
C(44)	620(3)	6699(2)	1391(2)	33(1)

C(45)	353(3)	5807(2)	990(2)	40(1)
C(46)	796(3)	5176(2)	1282(3)	43(1)
C(47)	1512(3)	5451(2)	1979(3)	43(1)
C(48)	1766(3)	6344(2)	2387(2)	37(1)
C(49)	2743(3)	8438(2)	3054(2)	32(1)
C(50)	3554(3)	8155(3)	2713(2)	40(1)
C(51)	4563(3)	8564(3)	3026(3)	50(1)
C(52)	4806(3)	9277(3)	3686(3)	52(1)
C(53)	4031(3)	9578(3)	4035(3)	49(1)
C(54)	3017(3)	9163(2)	3726(2)	38(1)
C(55)	1324(3)	8711(2)	1972(2)	31(1)
C(56)	2084(3)	9104(2)	1495(2)	35(1)
C(57)	1934(3)	9670(2)	920(2)	39(1)
C(58)	1003(3)	9866(2)	802(2)	43(1)
C(59)	222(3)	9473(2)	1245(2)	39(1)
C(60)	384(3)	8905(2)	1810(2)	35(1)

Table S4. Bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for $[\text{Fe}(\text{DMeOPrPE})_2\text{Cl}][\text{BPh}_4]$.

Fe(1)-P(4)	2.2792(9)
Fe(1)-P(1)	2.2803(9)
Fe(1)-P(2)	2.3130(10)
Fe(1)-P(3)	2.3175(10)
Fe(1)-Cl(1)	2.3505(9)
P(1)-C(1)	1.829(3)
P(1)-C(9)	1.831(3)
P(1)-C(5)	1.839(3)
P(2)-C(17)	1.821(4)
P(2)-C(13)	1.828(3)
P(2)-C(2)	1.845(3)
P(3)-C(21)	1.823(3)
P(3)-C(25)	1.827(3)
P(3)-C(3)	1.841(3)
P(4)-C(33)	1.828(4)
P(4)-C(4)	1.833(3)
P(4)-C(29)	1.836(3)
O(1)-C(7)	1.419(4)
O(1)-C(8)	1.425(5)
O(2)-C(11)	1.418(5)
O(2)-C(12)	1.420(6)
O(3)-C(15)	1.408(4)
O(3)-C(16)	1.424(5)
O(5)-C(24)	1.418(4)
O(5)-C(23)	1.421(4)
O(7)-C(31)	1.413(4)
O(7)-C(32)	1.418(4)
O(8)-C(36)	1.357(5)
O(8)-C(35)	1.415(5)
B(1)-C(37)	1.643(5)
B(1)-C(43)	1.644(5)
B(1)-C(49)	1.648(5)
B(1)-C(55)	1.656(5)
C(1)-C(2)	1.523(4)

C(3)-C(4)	1.520(5)
C(5)-C(6)	1.538(4)
C(6)-C(7)	1.514(4)
C(9)-C(10)	1.523(5)
C(10)-C(11)	1.522(5)
C(13)-C(14)	1.523(5)
C(14)-C(15)	1.519(5)
C(17)-C(18)	1.511(5)
C(18)-C(19)	1.494(9)
C(19)-O(4)	1.393(11)
O(4)-C(20)	1.425(7)
C(19A)-O(4A)	1.402(19)
O(4A)-C(20A)	1.417(14)
C(21)-C(22)	1.534(4)
C(22)-C(23)	1.512(5)
C(25)-C(26)	1.523(5)
C(26)-C(27)	1.478(5)
C(27)-O(6)	1.329(6)
O(6)-C(28)	1.468(6)
C(29)-C(30)	1.536(4)
C(30)-C(31)	1.507(5)
C(33)-C(34)	1.520(5)
C(34)-C(35)	1.509(5)
C(37)-C(42)	1.401(5)
C(37)-C(38)	1.412(4)
C(38)-C(39)	1.386(5)
C(39)-C(40)	1.382(5)
C(40)-C(41)	1.381(5)
C(41)-C(42)	1.384(5)
C(43)-C(44)	1.399(5)
C(43)-C(48)	1.406(5)
C(44)-C(45)	1.387(5)
C(45)-C(46)	1.378(5)
C(46)-C(47)	1.375(5)
C(47)-C(48)	1.393(5)
C(49)-C(50)	1.399(5)

C(49)-C(54)	1.400(5)
C(50)-C(51)	1.389(5)
C(51)-C(52)	1.375(6)
C(52)-C(53)	1.374(6)
C(53)-C(54)	1.395(5)
C(55)-C(60)	1.397(5)
C(55)-C(56)	1.399(5)
C(56)-C(57)	1.391(5)
C(57)-C(58)	1.378(5)
C(58)-C(59)	1.383(5)
C(59)-C(60)	1.386(5)

P(4)-Fe(1)-P(1)	171.25(4)
P(4)-Fe(1)-P(2)	95.81(4)
P(1)-Fe(1)-P(2)	82.64(3)
P(4)-Fe(1)-P(3)	82.86(3)
P(1)-Fe(1)-P(3)	96.16(3)
P(2)-Fe(1)-P(3)	163.47(4)
P(4)-Fe(1)-Cl(1)	92.69(3)
P(1)-Fe(1)-Cl(1)	96.06(3)
P(2)-Fe(1)-Cl(1)	98.93(4)
P(3)-Fe(1)-Cl(1)	97.58(3)
C(1)-P(1)-C(9)	105.06(16)
C(1)-P(1)-C(5)	103.65(15)
C(9)-P(1)-C(5)	103.08(15)
C(1)-P(1)-Fe(1)	106.61(11)
C(9)-P(1)-Fe(1)	123.78(11)
C(5)-P(1)-Fe(1)	112.78(10)
C(17)-P(2)-C(13)	106.41(17)
C(17)-P(2)-C(2)	103.21(17)
C(13)-P(2)-C(2)	104.62(16)
C(17)-P(2)-Fe(1)	112.31(12)
C(13)-P(2)-Fe(1)	118.74(13)
C(2)-P(2)-Fe(1)	110.19(11)
C(21)-P(3)-C(25)	105.36(16)
C(21)-P(3)-C(3)	104.62(16)

C(25)-P(3)-C(3)	102.12(16)
C(21)-P(3)-Fe(1)	120.67(12)
C(25)-P(3)-Fe(1)	112.88(12)
C(3)-P(3)-Fe(1)	109.35(12)
C(33)-P(4)-C(4)	104.76(17)
C(33)-P(4)-C(29)	102.26(16)
C(4)-P(4)-C(29)	102.70(16)
C(33)-P(4)-Fe(1)	125.55(12)
C(4)-P(4)-Fe(1)	106.28(11)
C(29)-P(4)-Fe(1)	112.90(11)
C(7)-O(1)-C(8)	110.7(3)
C(11)-O(2)-C(12)	111.6(4)
C(15)-O(3)-C(16)	111.6(3)
C(24)-O(5)-C(23)	112.1(3)
C(31)-O(7)-C(32)	111.4(3)
C(36)-O(8)-C(35)	115.0(4)
C(37)-B(1)-C(43)	107.7(3)
C(37)-B(1)-C(49)	109.8(3)
C(43)-B(1)-C(49)	112.4(3)
C(37)-B(1)-C(55)	112.3(3)
C(43)-B(1)-C(55)	108.1(3)
C(49)-B(1)-C(55)	106.6(3)
C(2)-C(1)-P(1)	107.7(2)
C(1)-C(2)-P(2)	108.3(2)
C(4)-C(3)-P(3)	108.2(2)
C(3)-C(4)-P(4)	106.7(2)
C(6)-C(5)-P(1)	117.7(2)
C(7)-C(6)-C(5)	109.9(3)
O(1)-C(7)-C(6)	109.0(3)
C(10)-C(9)-P(1)	114.5(2)
C(11)-C(10)-C(9)	111.9(3)
O(2)-C(11)-C(10)	113.0(3)
C(14)-C(13)-P(2)	113.2(3)
C(15)-C(14)-C(13)	113.6(3)
O(3)-C(15)-C(14)	109.0(3)
C(18)-C(17)-P(2)	117.2(3)

C(19)-C(18)-C(17)	113.5(6)
O(4)-C(19)-C(18)	105.7(7)
C(19)-O(4)-C(20)	111.1(7)
C(19A)-O(4A)-C(20A)	112.8(16)
C(22)-C(21)-P(3)	113.6(2)
C(23)-C(22)-C(21)	111.4(3)
O(5)-C(23)-C(22)	108.7(3)
C(26)-C(25)-P(3)	115.8(2)
C(27)-C(26)-C(25)	115.0(3)
O(6)-C(27)-C(26)	115.2(4)
C(27)-O(6)-C(28)	111.0(5)
C(30)-C(29)-P(4)	117.5(2)
C(31)-C(30)-C(29)	111.9(3)
O(7)-C(31)-C(30)	109.0(3)
C(34)-C(33)-P(4)	117.1(3)
C(35)-C(34)-C(33)	110.8(3)
O(8)-C(35)-C(34)	109.2(4)
C(42)-C(37)-C(38)	114.2(3)
C(42)-C(37)-B(1)	122.4(3)
C(38)-C(37)-B(1)	123.4(3)
C(39)-C(38)-C(37)	122.8(3)
C(40)-C(39)-C(38)	120.7(4)
C(39)-C(40)-C(41)	118.4(4)
C(40)-C(41)-C(42)	120.5(4)
C(41)-C(42)-C(37)	123.4(3)
C(44)-C(43)-C(48)	114.7(3)
C(44)-C(43)-B(1)	122.3(3)
C(48)-C(43)-B(1)	122.7(3)
C(45)-C(44)-C(43)	122.8(3)
C(46)-C(45)-C(44)	120.8(4)
C(47)-C(46)-C(45)	118.6(3)
C(46)-C(47)-C(48)	120.3(4)
C(47)-C(48)-C(43)	122.8(4)
C(50)-C(49)-C(54)	115.5(3)
C(50)-C(49)-B(1)	123.4(3)
C(54)-C(49)-B(1)	120.8(3)

C(51)-C(50)-C(49)	122.0(4)
C(52)-C(51)-C(50)	121.0(4)
C(53)-C(52)-C(51)	118.7(4)
C(52)-C(53)-C(54)	120.3(4)
C(53)-C(54)-C(49)	122.4(4)
C(60)-C(55)-C(56)	114.9(3)
C(60)-C(55)-B(1)	124.2(3)
C(56)-C(55)-B(1)	120.9(3)
C(57)-C(56)-C(55)	123.1(3)
C(58)-C(57)-C(56)	119.9(4)
C(57)-C(58)-C(59)	118.9(3)
C(58)-C(59)-C(60)	120.3(4)
C(59)-C(60)-C(55)	122.8(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table S5. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)] [BPh₄]. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	6865(1)	7810(1)	7499(1)	20(1)
P(1)	7137(1)	7812(1)	6159(1)	23(1)
P(2)	5670(1)	6518(1)	7019(1)	22(1)
P(3)	6815(1)	7638(1)	8841(1)	24(1)
P(4)	8257(1)	8949(1)	7973(1)	23(1)
N(1)	5946(1)	8509(1)	7482(1)	25(1)
N(2)	5377(2)	8921(1)	7466(1)	36(1)
O(1)	10571(1)	7874(1)	6219(1)	43(1)
O(2)	5458(2)	8931(2)	4266(2)	91(1)
O(3)	6752(1)	4133(1)	5707(1)	41(1)
O(4)	2033(2)	6859(1)	7708(2)	64(1)
O(5)	7562(2)	4857(1)	8370(1)	46(1)
O(6)	4726(2)	8915(2)	10401(2)	63(1)
O(7)	12233(1)	9558(1)	8910(1)	54(1)
O(8)	7419(2)	11909(1)	7096(1)	58(1)
B(1)	1579(2)	2981(2)	7609(2)	26(1)
C(1)	6238(2)	6822(2)	5503(1)	30(1)
C(2)	5254(2)	6589(2)	5929(1)	28(1)
C(3)	7883(2)	8494(2)	9495(1)	33(1)
C(4)	8131(2)	9335(2)	9072(1)	29(1)
C(5)	8393(2)	7782(2)	5813(1)	28(1)
C(6)	8818(2)	7014(2)	6070(1)	29(1)
C(7)	9881(2)	7062(2)	5803(2)	34(1)
C(8)	11585(2)	7972(2)	5993(3)	59(1)
C(9)	6805(2)	8730(2)	5673(1)	31(1)
C(10)	7064(2)	8805(2)	4782(2)	48(1)
C(11)	6497(2)	9387(2)	4359(2)	56(1)
C(12)	4866(5)	9389(5)	3803(4)	146(3)
C(13)	6149(2)	5499(1)	6905(1)	26(1)
C(14)	5447(2)	4647(2)	6384(2)	31(1)

C(15)	5983(2)	3894(2)	6246(2)	32(1)
C(16)	7219(3)	3419(2)	5494(2)	56(1)
C(17)	4451(2)	6131(2)	7466(2)	28(1)
C(18)	3693(2)	6707(2)	7404(2)	39(1)
C(19)	2740(2)	6339(2)	7819(2)	39(1)
C(20)	1044(2)	6447(2)	7906(2)	60(1)
C(21)	6920(2)	6562(2)	9164(2)	33(1)
C(22)	7966(2)	6387(2)	9119(2)	49(1)
C(23)	7989(3)	5411(2)	9129(2)	43(1)
C(24)	8363(3)	4989(3)	7781(2)	63(1)
C(25)	5675(2)	7844(2)	9306(2)	34(1)
C(26)	5650(4)	7824(3)	10234(2)	87(2)
C(27)	4698(3)	8051(2)	10544(2)	72(1)
C(28)	3953(4)	9254(3)	10773(3)	99(2)
C(29)	9482(2)	8623(2)	8042(1)	27(1)
C(30)	10405(2)	9265(2)	8599(1)	29(1)
C(31)	11340(2)	8891(2)	8539(2)	35(1)
C(32)	13143(2)	9298(3)	8697(3)	87(1)
C(33)	8601(2)	9994(2)	7510(2)	29(1)
C(34)	7845(2)	10583(2)	7588(2)	34(1)
C(35)	8126(2)	11360(2)	7081(2)	43(1)
C(36)	7573(3)	12518(2)	7823(3)	72(1)
C(37)	1329(2)	1951(2)	7095(1)	29(1)
C(38)	626(2)	1668(2)	6376(2)	32(1)
C(39)	335(2)	777(2)	5975(2)	43(1)
C(40)	755(3)	135(2)	6276(2)	52(1)
C(41)	1453(3)	386(2)	6977(2)	49(1)
C(42)	1733(2)	1275(2)	7381(2)	40(1)
C(43)	2793(2)	3358(2)	8013(2)	35(1)
C(44)	3594(2)	3029(2)	7697(2)	47(1)
C(45)	4626(2)	3406(3)	8008(2)	64(1)
C(46)	4893(3)	4133(3)	8644(2)	73(1)
C(47)	4135(3)	4478(2)	8962(2)	60(1)
C(48)	3105(2)	4092(2)	8658(2)	43(1)
C(49)	822(2)	2967(1)	8369(1)	26(1)
C(50)	443(2)	2185(2)	8729(1)	30(1)

C(51)	-213(2)	2148(2)	9358(2)	37(1)
C(52)	-516(2)	2904(2)	9660(2)	41(1)
C(53)	-151(2)	3696(2)	9343(2)	40(1)
C(54)	508(2)	3723(2)	8714(2)	34(1)
C(55)	1376(2)	3664(1)	6948(1)	26(1)
C(56)	426(2)	3868(2)	6787(1)	31(1)
C(57)	273(2)	4436(2)	6218(2)	37(1)
C(58)	1061(2)	4820(2)	5772(2)	38(1)
C(59)	1995(2)	4612(2)	5887(1)	36(1)
C(60)	2139(2)	4047(2)	6464(1)	31(1)

Table S6. Bond lengths [Å] and angles [°] for *trans*-[Fe(DMeOPrPE)₂H(N₂)] [BPh₄].

Fe(1)-N(1)	1.8337(18)
Fe(1)-P(3)	2.2302(7)
Fe(1)-P(1)	2.2308(7)
Fe(1)-P(4)	2.2373(6)
Fe(1)-P(2)	2.2379(6)
Fe(1)-H(1)	1.39(3)
P(1)-C(5)	1.830(2)
P(1)-C(9)	1.838(2)
P(1)-C(1)	1.848(2)
P(2)-C(17)	1.835(2)
P(2)-C(13)	1.836(2)
P(2)-C(2)	1.840(2)
P(3)-C(25)	1.837(2)
P(3)-C(21)	1.839(2)
P(3)-C(3)	1.849(2)
P(4)-C(33)	1.835(2)
P(4)-C(29)	1.840(2)
P(4)-C(4)	1.840(2)
N(1)-N(2)	1.112(3)
O(1)-C(7)	1.417(3)
O(1)-C(8)	1.417(3)
O(2)-C(11)	1.389(4)
O(2)-C(12)	1.424(5)
O(3)-C(15)	1.413(3)
O(3)-C(16)	1.417(3)
O(4)-C(19)	1.405(3)
O(4)-C(20)	1.405(3)
O(5)-C(23)	1.402(3)
O(5)-C(24)	1.485(4)
O(6)-C(27)	1.375(4)
O(6)-C(28)	1.416(4)
O(7)-C(31)	1.411(3)
O(7)-C(32)	1.433(4)
O(8)-C(36)	1.380(4)

O(8)-C(35)	1.424(3)
B(1)-C(37)	1.641(3)
B(1)-C(43)	1.647(3)
B(1)-C(55)	1.650(3)
B(1)-C(49)	1.655(3)
C(1)-C(2)	1.523(3)
C(1)-H(1A)	0.95(3)
C(1)-H(1B)	0.91(3)
C(2)-H(2A)	0.95(3)
C(2)-H(2B)	0.95(3)
C(3)-C(4)	1.521(3)
C(3)-H(3A)	0.94(3)
C(3)-H(3B)	0.92(3)
C(4)-H(4A)	1.00(3)
C(4)-H(4B)	1.02(3)
C(5)-C(6)	1.529(3)
C(5)-H(5)	0.98(3)
C(5)-H(5B)	0.95(3)
C(6)-C(7)	1.513(3)
C(6)-H(6B)	0.93(2)
C(6)-H(6B)	1.00(3)
C(7)-H(7A)	0.98(3)
C(7)-H(7B)	0.99(3)
C(8)-H(8A)	1.00(4)
C(8)-H(8B)	1.00(4)
C(8)-H(8C)	0.94(4)
C(9)-C(10)	1.522(3)
C(9)-H(9A)	0.97(3)
C(9)-H(9B)	0.97(3)
C(10)-C(11)	1.512(4)
C(10)-H(10A)	0.9900
C(10)-H(10B)	0.9900
C(11)-H(11A)	0.9900
C(11)-H(11B)	0.9900
C(12)-H(12A)	0.9800
C(12)-H(12B)	0.9800

C(12)-H(12C)	0.9800
C(13)-C(14)	1.524(3)
C(13)-H(13B)	0.92(3)
C(13)-H(13B)	0.98(2)
C(14)-C(15)	1.516(3)
C(14)-H(14A)	0.95(3)
C(14)-H(14B)	0.90(3)
C(15)-H(15A)	0.96(3)
C(15)-H(15B)	0.94(3)
C(16)-H(16A)	0.87(4)
C(16)-H(16B)	0.94(4)
C(16)-H(16C)	0.93(4)
C(17)-C(18)	1.518(3)
C(17)-H(17A)	0.88(3)
C(17)-H(17B)	0.90(3)
C(18)-C(19)	1.510(3)
C(18)-H(18A)	0.98(3)
C(18)-H(18B)	0.88(3)
C(19)-H(19A)	0.9900
C(19)-H(19B)	0.9900
C(20)-H(20A)	0.9800
C(20)-H(20B)	0.9800
C(20)-H(20C)	0.9800
C(21)-C(22)	1.503(4)
C(21)-H(21A)	0.95(3)
C(21)-H(21B)	0.93(3)
C(22)-C(23)	1.518(4)
C(22)-H(22B)	0.86(3)
C(22)-H(22A)	1.02(5)
C(23)-H(23B)	1.03(4)
C(23)-H(23A)	0.86(4)
C(24)-H(24A)	0.9800
C(24)-H(24B)	0.9800
C(24)-H(24C)	0.9800
C(25)-C(26)	1.512(4)
C(25)-H(25A)	0.97(3)

C(25)-H(25B)	0.94(3)
C(26)-C(27)	1.514(4)
C(26)-H(26A)	0.9900
C(26)-H(26B)	0.9900
C(27)-H(27A)	0.9900
C(27)-H(27B)	0.9900
C(28)-H(28A)	0.9800
C(28)-H(28B)	0.9800
C(28)-H(28C)	0.9800
C(29)-C(30)	1.529(3)
C(29)-H(29A)	1.00(2)
C(29)-H(29B)	0.96(3)
C(30)-C(31)	1.514(3)
C(30)-H(30A)	0.88(3)
C(30)-H(30B)	1.02(3)
C(31)-H(31A)	1.01(3)
C(31)-H(31B)	0.90(3)
C(32)-H(32A)	0.9800
C(32)-H(32B)	0.9800
C(32)-H(32C)	0.9800
C(33)-C(34)	1.526(3)
C(33)-H(33A)	0.99(2)
C(33)-H(33B)	0.89(3)
C(34)-C(35)	1.526(3)
C(34)-H(34A)	0.96(3)
C(34)-H(34B)	0.94(3)
C(35)-H(35A)	1.03(3)
C(35)-H(35B)	1.10(2)
C(36)-H(36A)	0.9800
C(36)-H(36B)	0.9800
C(36)-H(36C)	0.9800
C(37)-C(38)	1.397(3)
C(37)-C(42)	1.403(3)
C(38)-C(39)	1.393(3)
C(38)-H(38)	0.98(2)
C(39)-C(40)	1.379(4)

C(39)-H(39)	0.90(3)
C(40)-C(41)	1.371(5)
C(40)-H(40)	0.84(4)
C(41)-C(42)	1.392(4)
C(41)-H(41)	0.87(3)
C(42)-H(42)	0.92(3)
C(43)-C(48)	1.399(4)
C(43)-C(44)	1.404(4)
C(44)-C(45)	1.395(4)
C(44)-H(44)	0.92(3)
C(45)-C(46)	1.380(6)
C(45)-H(45)	0.98(4)
C(46)-C(47)	1.368(6)
C(46)-H(46)	0.88(4)
C(47)-C(48)	1.393(4)
C(47)-H(47)	0.90(4)
C(48)-H(48)	0.93(3)
C(49)-C(54)	1.403(3)
C(49)-C(50)	1.406(3)
C(50)-C(51)	1.395(3)
C(50)-H(50)	0.93(3)
C(51)-C(52)	1.375(4)
C(51)-H(51)	1.02(3)
C(52)-C(53)	1.378(4)
C(52)-H(52)	0.84(3)
C(53)-C(54)	1.397(4)
C(53)-H(53)	0.99(3)
C(54)-H(54)	0.92(3)
C(55)-C(60)	1.399(3)
C(55)-C(56)	1.405(3)
C(56)-C(57)	1.390(3)
C(56)-H(56)	0.94(3)
C(57)-C(58)	1.382(4)
C(57)-H(57)	0.89(3)
C(58)-C(59)	1.379(4)
C(58)-H(58)	0.95(3)

C(59)-C(60)	1.391(3)
C(59)-H(59)	0.93(3)
C(60)-H(60)	0.94(2)
N(1)-Fe(1)-P(3)	96.04(6)
N(1)-Fe(1)-P(1)	95.39(6)
P(3)-Fe(1)-P(1)	168.57(2)
N(1)-Fe(1)-P(4)	96.01(6)
P(3)-Fe(1)-P(4)	84.48(2)
P(1)-Fe(1)-P(4)	94.37(2)
N(1)-Fe(1)-P(2)	94.16(6)
P(3)-Fe(1)-P(2)	94.87(2)
P(1)-Fe(1)-P(2)	84.26(2)
P(4)-Fe(1)-P(2)	169.83(2)
N(1)-Fe(1)-H(1)	178.0(11)
P(3)-Fe(1)-H(1)	84.8(11)
P(1)-Fe(1)-H(1)	83.8(11)
P(4)-Fe(1)-H(1)	85.9(11)
P(2)-Fe(1)-H(1)	84.0(11)
C(5)-P(1)-C(9)	103.90(10)
C(5)-P(1)-C(1)	103.39(11)
C(9)-P(1)-C(1)	100.09(11)
C(5)-P(1)-Fe(1)	121.14(7)
C(9)-P(1)-Fe(1)	115.53(8)
C(1)-P(1)-Fe(1)	110.18(7)
C(17)-P(2)-C(13)	102.41(10)
C(17)-P(2)-C(2)	103.61(11)
C(13)-P(2)-C(2)	102.31(10)
C(17)-P(2)-Fe(1)	124.54(8)
C(13)-P(2)-Fe(1)	115.16(7)
C(2)-P(2)-Fe(1)	106.21(8)
C(25)-P(3)-C(21)	103.88(11)
C(25)-P(3)-C(3)	102.35(12)
C(21)-P(3)-C(3)	103.97(12)
C(25)-P(3)-Fe(1)	115.26(8)
C(21)-P(3)-Fe(1)	119.31(8)

C(3)-P(3)-Fe(1)	110.21(8)
C(33)-P(4)-C(29)	102.34(10)
C(33)-P(4)-C(4)	104.23(11)
C(29)-P(4)-C(4)	102.83(11)
C(33)-P(4)-Fe(1)	123.42(8)
C(29)-P(4)-Fe(1)	114.74(7)
C(4)-P(4)-Fe(1)	107.07(8)
N(2)-N(1)-Fe(1)	178.85(19)
C(7)-O(1)-C(8)	112.0(2)
C(11)-O(2)-C(12)	110.6(4)
C(15)-O(3)-C(16)	111.5(2)
C(19)-O(4)-C(20)	113.0(2)
C(23)-O(5)-C(24)	107.4(2)
C(27)-O(6)-C(28)	112.8(3)
C(31)-O(7)-C(32)	110.6(2)
C(36)-O(8)-C(35)	112.8(2)
C(37)-B(1)-C(43)	112.11(19)
C(37)-B(1)-C(55)	108.51(17)
C(43)-B(1)-C(55)	106.96(17)
C(37)-B(1)-C(49)	108.04(17)
C(43)-B(1)-C(49)	109.29(18)
C(55)-B(1)-C(49)	111.96(18)
C(2)-C(1)-P(1)	107.55(15)
C(2)-C(1)-H(1A)	112.1(17)
P(1)-C(1)-H(1A)	108.0(17)
C(2)-C(1)-H(1B)	112.7(18)
P(1)-C(1)-H(1B)	107.5(18)
H(1A)-C(1)-H(1B)	109(2)
C(1)-C(2)-P(2)	105.85(15)
C(1)-C(2)-H(2A)	116.9(15)
P(2)-C(2)-H(2A)	110.5(15)
C(1)-C(2)-H(2B)	111.5(15)
P(2)-C(2)-H(2B)	106.5(14)
H(2A)-C(2)-H(2B)	105(2)
C(4)-C(3)-P(3)	108.29(16)
C(4)-C(3)-H(3A)	113.4(18)

P(3)-C(3)-H(3A)	104.4(18)
C(4)-C(3)-H(3B)	113.2(18)
P(3)-C(3)-H(3B)	108.1(18)
H(3A)-C(3)-H(3B)	109(2)
C(3)-C(4)-P(4)	106.44(15)
C(3)-C(4)-H(4A)	111.7(15)
P(4)-C(4)-H(4A)	113.0(15)
C(3)-C(4)-H(4B)	114.4(15)
P(4)-C(4)-H(4B)	104.5(14)
H(4A)-C(4)-H(4B)	107(2)
C(6)-C(5)-P(1)	115.07(16)
C(6)-C(5)-H(5)	111.1(14)
P(1)-C(5)-H(5)	104.0(15)
C(6)-C(5)-H(5B)	110.2(15)
P(1)-C(5)-H(5B)	108.0(15)
H(5)-C(5)-H(5B)	108(2)
C(7)-C(6)-C(5)	112.00(19)
C(7)-C(6)-H(6B)	108.4(14)
C(5)-C(6)-H(6B)	110.2(14)
C(7)-C(6)-H(6B)	107.7(15)
C(5)-C(6)-H(6B)	112.1(15)
H(6B)-C(6)-H(6B)	106(2)
O(1)-C(7)-C(6)	108.76(17)
O(1)-C(7)-H(7A)	109.1(16)
C(6)-C(7)-H(7A)	113.1(16)
O(1)-C(7)-H(7B)	108.0(16)
C(6)-C(7)-H(7B)	109.5(16)
H(7A)-C(7)-H(7B)	108(2)
O(1)-C(8)-H(8A)	107(2)
O(1)-C(8)-H(8B)	107(2)
H(8A)-C(8)-H(8B)	104(3)
O(1)-C(8)-H(8C)	107(2)
H(8A)-C(8)-H(8C)	121(3)
H(8B)-C(8)-H(8C)	110(3)
C(10)-C(9)-P(1)	117.21(17)
C(10)-C(9)-H(9A)	112.2(16)

P(1)-C(9)-H(9A)	100.3(16)
C(10)-C(9)-H(9B)	113.1(18)
P(1)-C(9)-H(9B)	111.2(17)
H(9A)-C(9)-H(9B)	101(2)
C(11)-C(10)-C(9)	112.6(2)
C(11)-C(10)-H(10A)	109.1
C(9)-C(10)-H(10A)	109.1
C(11)-C(10)-H(10B)	109.1
C(9)-C(10)-H(10B)	109.1
H(10A)-C(10)-H(10B)	107.8
O(2)-C(11)-C(10)	106.4(3)
O(2)-C(11)-H(11A)	110.4
C(10)-C(11)-H(11A)	110.4
O(2)-C(11)-H(11B)	110.4
C(10)-C(11)-H(11B)	110.4
H(11A)-C(11)-H(11B)	108.6
O(2)-C(12)-H(12A)	109.5
O(2)-C(12)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
O(2)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
C(14)-C(13)-P(2)	117.33(15)
C(14)-C(13)-H(13B)	108.8(17)
P(2)-C(13)-H(13B)	106.8(17)
C(14)-C(13)-H(13B)	107.5(14)
P(2)-C(13)-H(13B)	108.5(14)
H(13B)-C(13)-H(13B)	108(2)
C(15)-C(14)-C(13)	112.08(19)
C(15)-C(14)-H(14A)	108.9(16)
C(13)-C(14)-H(14A)	110.2(16)
C(15)-C(14)-H(14B)	110.7(17)
C(13)-C(14)-H(14B)	108.9(18)
H(14A)-C(14)-H(14B)	106(2)
O(3)-C(15)-C(14)	108.87(19)
O(3)-C(15)-H(15A)	107.1(15)

C(14)-C(15)-H(15A)	111.6(15)
O(3)-C(15)-H(15B)	108.2(16)
C(14)-C(15)-H(15B)	111.9(16)
H(15A)-C(15)-H(15B)	109(2)
O(3)-C(16)-H(16A)	113(3)
O(3)-C(16)-H(16B)	106(2)
H(16A)-C(16)-H(16B)	114(3)
O(3)-C(16)-H(16C)	106(2)
H(16A)-C(16)-H(16C)	100(3)
H(16B)-C(16)-H(16C)	117(3)
C(18)-C(17)-P(2)	116.32(16)
C(18)-C(17)-H(17A)	109(2)
P(2)-C(17)-H(17A)	104.1(19)
C(18)-C(17)-H(17B)	109.4(17)
P(2)-C(17)-H(17B)	106.8(17)
H(17A)-C(17)-H(17B)	111(3)
C(19)-C(18)-C(17)	111.4(2)
C(19)-C(18)-H(18A)	108.2(19)
C(17)-C(18)-H(18A)	108.6(19)
C(19)-C(18)-H(18B)	110(2)
C(17)-C(18)-H(18B)	111(2)
H(18A)-C(18)-H(18B)	109(3)
O(4)-C(19)-C(18)	109.7(2)
O(4)-C(19)-H(19A)	109.7
C(18)-C(19)-H(19A)	109.7
O(4)-C(19)-H(19B)	109.7
C(18)-C(19)-H(19B)	109.7
H(19A)-C(19)-H(19B)	108.2
O(4)-C(20)-H(20A)	109.5
O(4)-C(20)-H(20B)	109.5
H(20A)-C(20)-H(20B)	109.5
O(4)-C(20)-H(20C)	109.5
H(20A)-C(20)-H(20C)	109.5
H(20B)-C(20)-H(20C)	109.5
C(22)-C(21)-P(3)	114.61(19)
C(22)-C(21)-H(21A)	111.7(16)

P(3)-C(21)-H(21A)	108.2(16)
C(22)-C(21)-H(21B)	111.4(17)
P(3)-C(21)-H(21B)	109.8(17)
H(21A)-C(21)-H(21B)	100(2)
C(21)-C(22)-C(23)	115.0(3)
C(21)-C(22)-H(22B)	112.0(19)
C(23)-C(22)-H(22B)	105.2(19)
C(21)-C(22)-H(22A)	105(3)
C(23)-C(22)-H(22A)	106(3)
H(22B)-C(22)-H(22A)	113(3)
O(5)-C(23)-C(22)	112.4(2)
O(5)-C(23)-H(23B)	95(2)
C(22)-C(23)-H(23B)	116.1(19)
O(5)-C(23)-H(23A)	107(2)
C(22)-C(23)-H(23A)	112(2)
H(23B)-C(23)-H(23A)	113(3)
O(5)-C(24)-H(24A)	109.5
O(5)-C(24)-H(24B)	109.5
H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5
O(5)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5
H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5
C(26)-C(25)-P(3)	117.4(2)
C(26)-C(25)-H(25A)	107.2(19)
P(3)-C(25)-H(25A)	109.4(19)
C(26)-C(25)-H(25B)	105.5(17)
P(3)-C(25)-H(25B)	108.9(17)
H(25A)-C(25)-H(25B)	108(3)
C(25)-C(26)-C(27)	112.0(3)
C(25)-C(26)-H(26A)	109.2
C(27)-C(26)-H(26A)	109.2
C(25)-C(26)-H(26B)	109.2
C(27)-C(26)-H(26B)	109.2
H(26A)-C(26)-H(26B)	107.9
O(6)-C(27)-C(26)	107.6(3)
O(6)-C(27)-H(27A)	110.2

C(26)-C(27)-H(27A)	110.2
O(6)-C(27)-H(27B)	110.2
C(26)-C(27)-H(27B)	110.2
H(27A)-C(27)-H(27B)	108.5
O(6)-C(28)-H(28A)	109.5
O(6)-C(28)-H(28B)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28B)	109.5
O(6)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28A)-C(28)-H(28C)	109.5
H(28B)-C(28)-H(28C)	109.5
C(30)-C(29)-P(4)	118.14(15)
C(30)-C(29)-H(29A)	110.8(15)
P(4)-C(29)-H(29A)	104.9(14)
C(30)-C(29)-H(29B)	110.5(16)
P(4)-C(29)-H(29B)	104.2(16)
H(29A)-C(29)-H(29B)	108(2)
C(31)-C(30)-C(29)	109.64(18)
C(31)-C(30)-H(30A)	106.8(17)
C(29)-C(30)-H(30A)	110.5(18)
C(31)-C(30)-H(30B)	110.7(15)
C(29)-C(30)-H(30B)	109.4(15)
H(30A)-C(30)-H(30B)	110(2)
O(7)-C(31)-C(30)	109.8(2)
O(7)-C(31)-H(31A)	109.0(16)
C(30)-C(31)-H(31A)	109.3(15)
O(7)-C(31)-H(31B)	109.3(17)
C(30)-C(31)-H(31B)	110.2(17)
H(31A)-C(31)-H(31B)	109(2)
O(7)-C(32)-H(32A)	109.5
O(7)-C(32)-H(32B)	109.5
H(32A)-C(32)-H(32B)	109.5
O(7)-C(32)-H(32C)	109.5
H(32A)-C(32)-H(32C)	109.5
H(32B)-C(32)-H(32C)	109.5
C(34)-C(33)-P(4)	115.50(16)
C(34)-C(33)-H(33A)	112.9(14)

P(4)-C(33)-H(33A)	104.5(14)
C(34)-C(33)-H(33B)	111.5(17)
P(4)-C(33)-H(33B)	108.1(18)
H(33A)-C(33)-H(33B)	103(2)
C(35)-C(34)-C(33)	110.9(2)
C(35)-C(34)-H(34A)	111.9(15)
C(33)-C(34)-H(34A)	108.8(15)
C(35)-C(34)-H(34B)	109.9(16)
C(33)-C(34)-H(34B)	109.8(16)
H(34A)-C(34)-H(34B)	105(2)
O(8)-C(35)-C(34)	113.6(2)
O(8)-C(35)-H(35A)	109.3(15)
C(34)-C(35)-H(35A)	108.4(16)
O(8)-C(35)-H(35B)	101.2(11)
C(34)-C(35)-H(35B)	103.3(11)
H(35A)-C(35)-H(35B)	121.0(19)
O(8)-C(36)-H(36A)	109.5
O(8)-C(36)-H(36B)	109.5
H(36A)-C(36)-H(36B)	109.5
O(8)-C(36)-H(36C)	109.5
H(36A)-C(36)-H(36C)	109.5
H(36B)-C(36)-H(36C)	109.5
C(38)-C(37)-C(42)	115.2(2)
C(38)-C(37)-B(1)	121.81(19)
C(42)-C(37)-B(1)	122.8(2)
C(39)-C(38)-C(37)	122.6(2)
C(39)-C(38)-H(38)	118.0(15)
C(37)-C(38)-H(38)	119.4(14)
C(40)-C(39)-C(38)	120.2(3)
C(40)-C(39)-H(39)	118.2(19)
C(38)-C(39)-H(39)	121.5(19)
C(41)-C(40)-C(39)	119.1(3)
C(41)-C(40)-H(40)	117(2)
C(39)-C(40)-H(40)	124(2)
C(40)-C(41)-C(42)	120.5(3)
C(40)-C(41)-H(41)	122(2)

C(42)-C(41)-H(41)	118(2)
C(41)-C(42)-C(37)	122.4(3)
C(41)-C(42)-H(42)	119.1(17)
C(37)-C(42)-H(42)	118.5(17)
C(48)-C(43)-C(44)	115.2(2)
C(48)-C(43)-B(1)	121.2(2)
C(44)-C(43)-B(1)	123.4(2)
C(45)-C(44)-C(43)	122.3(3)
C(45)-C(44)-H(44)	117.6(19)
C(43)-C(44)-H(44)	120.0(19)
C(46)-C(45)-C(44)	120.2(4)
C(46)-C(45)-H(45)	128(2)
C(44)-C(45)-H(45)	112(2)
C(47)-C(46)-C(45)	119.2(3)
C(47)-C(46)-H(46)	116(3)
C(45)-C(46)-H(46)	125(3)
C(46)-C(47)-C(48)	120.4(4)
C(46)-C(47)-H(47)	123(2)
C(48)-C(47)-H(47)	117(2)
C(47)-C(48)-C(43)	122.7(3)
C(47)-C(48)-H(48)	115.7(17)
C(43)-C(48)-H(48)	121.6(17)
C(54)-C(49)-C(50)	114.2(2)
C(54)-C(49)-B(1)	123.73(19)
C(50)-C(49)-B(1)	122.11(19)
C(51)-C(50)-C(49)	123.4(2)
C(51)-C(50)-H(50)	117.1(15)
C(49)-C(50)-H(50)	119.5(15)
C(52)-C(51)-C(50)	119.9(2)
C(52)-C(51)-H(51)	119.0(16)
C(50)-C(51)-H(51)	121.0(16)
C(51)-C(52)-C(53)	119.2(2)
C(51)-C(52)-H(52)	122(2)
C(53)-C(52)-H(52)	119(2)
C(52)-C(53)-C(54)	120.1(2)
C(52)-C(53)-H(53)	119.0(16)

C(54)-C(53)-H(53)	120.9(16)
C(53)-C(54)-C(49)	123.1(2)
C(53)-C(54)-H(54)	117.8(16)
C(49)-C(54)-H(54)	119.1(16)
C(60)-C(55)-C(56)	114.6(2)
C(60)-C(55)-B(1)	121.47(19)
C(56)-C(55)-B(1)	123.84(19)
C(57)-C(56)-C(55)	122.6(2)
C(57)-C(56)-H(56)	116.4(15)
C(55)-C(56)-H(56)	121.0(15)
C(58)-C(57)-C(56)	120.6(2)
C(58)-C(57)-H(57)	120.7(18)
C(56)-C(57)-H(57)	118.7(18)
C(59)-C(58)-C(57)	118.7(2)
C(59)-C(58)-H(58)	123.1(16)
C(57)-C(58)-H(58)	118.1(16)
C(58)-C(59)-C(60)	119.9(2)
C(58)-C(59)-H(59)	118.1(17)
C(60)-C(59)-H(59)	121.7(18)
C(59)-C(60)-C(55)	123.4(2)
C(59)-C(60)-H(60)	116.8(15)
C(55)-C(60)-H(60)	119.8(15)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: