

Eisen(II/III)-oximat 2c mit der Struktur [Fe^{III}₂Fe^{II}O(H₂O)₃L₆]

Empirical formula	C ₄₈ H ₁₃₀ Fe ₆ N ₁₂ O ₆₇
Formula weight	2282.74
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, C 2/c
Unit cell dimensions	a = 35.043(5) Å alpha = 90 deg. b = 17.4037(6) Å beta = 134.73(2) deg. c = 25.302(3) Å gamma = 90 deg.
Volume	10963(2) Å ³
Z, Calculated density	4, 1.383 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.875 mm ⁻¹
F(000)	4776
Crystal size	0.48 x 0.28 x 0.24 mm
Theta range for data collection	2.60 to 25.35 deg.
Limiting indices	-39 ≤ h ≤ 42, -20 ≤ k ≤ 13, -30 ≤ l ≤ 23
Reflections collected / unique	20480 / 9926 [R(int) = 0.0271]
Completeness to theta = 25.35	99.0 %
Max. and min. transmission	0.8174 and 0.6787
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	9926 / 74 / 663
Goodness-of-fit on F ²	1.074
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0678, wR2 = 0.1791
R indices (all data)	R1 = 0.1045, wR2 = 0.2097
Largest diff. peak and hole	0.938 and -0.653 e.Å ⁻³

Atom	Wyck	Site	S.O.F.	Atomic parameters			U [Å ²]
				x/a	y/b	z/c	
C1	8f	1		0.2271(2)	-0.0773(3)	0.9187(3)	
C2	8f	1		0.2473(3)	-0.1168(3)	0.9875(3)	
C3	8f	1		0.2087(3)	-0.1618(5)	0.9827(4)	
H3A	8f	1		0.19340	-0.20230	0.94690	0.1380
H3B	8f	1		0.18070	-0.12850	0.96770	0.1380
H3C	8f	1		0.22730	-0.18350	1.03050	0.1380
C4	8f	1		0.3690(3)	-0.1317(7)	1.1692(4)	
H4A	8f	1		0.37680	-0.07770	1.17840	0.1930
H4B	8f	1		0.38820	-0.15420	1.15880	0.1930
H4C	8f	1		0.38000	-0.15590	1.21220	0.1930
C5	8f	1		0.1925(2)	-0.1002(3)	0.7375(3)	
C6	8f	1		0.1981(2)	-0.1497(3)	0.6947(3)	
C7	8f	1		0.2422(3)	-0.1360(4)	0.6995(5)	
H7A	8f	1		0.27610	-0.14180	0.75020	0.1160
H7B	8f	1		0.23930	-0.08490	0.68270	0.1160
H7C	8f	1		0.23970	-0.17250	0.66870	0.1160
C8	8f	1		0.1291(3)	-0.3060(4)	0.5775(4)	
H8A	8f	1		0.09460	-0.28130	0.54220	0.1250
H8B	8f	1		0.13090	-0.33720	0.61050	0.1250
H8C	8f	1		0.13400	-0.33770	0.55160	0.1250
C9	8f	1		0.2171(2)	0.1451(3)	0.7342(3)	
C10	8f	1		0.2293(2)	0.1735(3)	0.6911(3)	
C11	8f	1		0.2754(3)	0.1421(4)	0.7065(4)	
H11A	8f	1		0.29950	0.18310	0.72090	0.1010
H11B	8f	1		0.26290	0.11760	0.66260	0.1010
H11C	8f	1		0.29390	0.10520	0.74610	0.1010
C12	8f	1		0.1675(3)	0.3001(5)	0.5461(4)	
H12A	8f	1		0.16580	0.34320	0.56810	0.1240
H12B	8f	1		0.13350	0.27420	0.51260	0.1240
H12C	8f	1		0.17590	0.31780	0.51930	0.1240
C13	8f	1		0.2460(2)	0.1856(3)	0.9031(3)	
C14	8f	1		0.2803(2)	0.2425(3)	0.9650(3)	
C15	8f	1		0.3346(3)	0.2210(4)	1.0375(4)	
H15A	8f	1		0.35640	0.20450	1.02970	0.1240
H15B	8f	1		0.33140	0.17990	1.05950	0.1240
H15C	8f	1		0.35100	0.26460	1.07020	0.1240
C16	8f	1		0.2707(4)	0.4347(4)	0.9870(5)	
H16A	8f	1		0.23860	0.43130	0.97660	0.1470
H16B	8f	1		0.26180	0.45240	0.94350	0.1470
H16C	8f	1		0.29520	0.47020	1.02710	0.1470
C17	8f	1		0.0460(2)	0.0540(3)	0.6215(3)	
C18	8f	1		-0.0090(2)	0.0617(3)	0.5437(3)	
C19	8f	1		-0.0235(3)	0.1321(4)	0.4987(4)	
H19A	8f	1		-0.05310	0.15760	0.48650	0.0990
H19B	8f	1		-0.03340	0.11760	0.45370	0.0990
H19C	8f	1		0.00680	0.16610	0.52690	0.0990
C20	8f	1		-0.1262(3)	-0.0457(5)	0.4292(4)	
H20C	8f	1		-0.16080	-0.03670	0.37990	0.1220
H20B	8f	1		-0.12980	-0.05020	0.46320	0.1220
H20A	8f	1		-0.11130	-0.09240	0.42960	0.1220
C21	8f	1		0.0915(2)	0.0831(4)	0.8033(3)	
C22	8f	1		0.0705(2)	0.1013(4)	0.8371(3)	
C23	8f	1		0.0655(4)	0.0372(5)	0.8706(6)	
H23A	8f	1		0.02840	0.02930	0.84280	0.1670
H23B	8f	1		0.08500	0.04960	0.92120	0.1670
H23C	8f	1		0.08000	-0.00880	0.86940	0.1670
C24	8f	1		0.0147(3)	0.2559(5)	0.8455(5)	
H24A	8f	1		-0.01350	0.26270	0.79260	0.1260
H24B	8f	1		0.04270	0.29260	0.86630	0.1260

H24C	8f	1	0.00070	0.26330	0.86680	0.1260
O34	8f	1	0.17047(13)	0.04616(19)	0.78582(18)	
N1	8f	1	0.2966(2)	-0.1062(3)	1.0447(3)	
N2	8f	1	0.1627(2)	-0.2034(3)	0.6570(3)	
N3	8f	1	0.1963(2)	0.2238(3)	0.6426(3)	
N4	8f	1	0.2593(2)	0.3094(3)	0.9475(3)	
N5	8f	1	-0.04062(18)	0.0050(3)	0.5227(2)	
N6	8f	1	0.05592(18)	0.1698(3)	0.8308(3)	
O1	8f	1	0.25809(15)	-0.0337(2)	0.9241(2)	
O2	8f	1	0.17869(16)	-0.0905(2)	0.8600(2)	
O3	8f	1	0.23321(15)	-0.0600(2)	0.7880(2)	
O4	8f	1	0.14945(15)	-0.1024(2)	0.7213(2)	
O5	8f	1	0.24850(14)	0.0954(2)	0.7830(2)	
O6	8f	1	0.17626(15)	0.1714(2)	0.7172(2)	
O7	8f	1	0.26843(14)	0.1228(2)	0.9135(2)	
O8	8f	1	0.19845(15)	0.2032(2)	0.8467(2)	
O9	8f	1	0.07484(15)	0.1130(2)	0.64602(19)	
O10	8f	1	0.05852(14)	-0.0073(2)	0.6560(2)	
O11	8f	1	0.10031(16)	0.1391(2)	0.7808(2)	
O12	8f	1	0.09858(17)	0.0141(2)	0.7998(2)	
O13	8f	1	0.32589(14)	0.0152(2)	0.9139(2)	
H131	8f	1	0.3457(17)	0.004(4)	0.907(3)	0.0590
H132	8f	1	0.3454(17)	0.008(4)	0.960(1)	0.0590
O14	8f	1	0.10548(16)	0.2536(2)	0.7093(2)	
H141	8f	1	0.111(2)	0.2911(18)	0.735(2)	0.0560
H142	8f	1	0.104(2)	0.271(3)	0.677(2)	0.0560
O15	8f	1	0.07896(16)	-0.1316(3)	0.7368(2)	
H151	8f	1	0.0835(19)	-0.142(4)	0.7737(17)	0.0650
H152	8f	1	0.0453(6)	-0.132(4)	0.6985(16)	0.0650
O16	8f	1	0.3130(2)	-0.1425(3)	1.1072(2)	
O17	8f	1	0.17072(19)	-0.2484(3)	0.6199(3)	
O18	8f	1	0.20829(18)	0.2481(3)	0.6033(2)	
O19	8f	1	0.2950(2)	0.3615(3)	1.0074(3)	
O20	8f	1	-0.09129(16)	0.0170(3)	0.4510(2)	
O21	8f	1	0.03611(18)	0.1795(3)	0.8619(3)	
O22	8f	1	-0.0260(2)	-0.1316(3)	0.6072(3)	
H221	8f	1	-0.0580(12)	-0.133(4)	0.587(4)	0.0980
H222	8f	1	-0.021(3)	-0.172(3)	0.594(4)	0.0980
O23	8f	1	0.1033(2)	0.3010(3)	0.6057(3)	
H231	8f	1	0.084(2)	0.262(3)	0.580(4)	0.1010
H232	8f	1	0.1335(14)	0.292(4)	0.620(4)	0.1010
O24	8f	1	0.3785(3)	-0.0221(4)	1.0575(4)	
H241	8f	1	0.369(4)	-0.001(4)	1.077(5)	0.1180
H242	8f	1	0.386(4)	0.013(3)	1.042(5)	0.1180
O25	8f	1	0.0896(2)	-0.2549(4)	0.6729(4)	
H251	8f	1	0.104(3)	-0.240(5)	0.659(4)	0.1150
H252	8f	1	0.108(3)	-0.239(5)	0.717(2)	0.1150
O26	8f	1	0.1473(3)	0.3642(4)	0.8079(3)	
H261	8f	1	0.129(3)	0.397(4)	0.808(4)	0.1300
H262	8f	1	0.175(2)	0.353(5)	0.8530(15)	0.1300
O27	8f	1	0.0701(2)	-0.1840(4)	0.8334(4)	
H271	8f	1	0.054(3)	-0.144(3)	0.831(5)	0.1280
H272	8f	1	0.046(2)	-0.218(3)	0.806(4)	0.1280
O28	8f	1	0.0226(3)	0.2779(5)	0.4458(3)	
H281	8f	1	0.035(3)	0.252(5)	0.484(3)	0.1460
H282	8f	1	-0.0099(14)	0.263(5)	0.410(3)	0.1460
O29	8f	1	0.3773(4)	-0.0361(5)	0.8797(5)	
H291	8f	1	0.38310	-0.08420	0.88450	0.1890
H292	8f	1	0.34500	-0.02080	0.85130	0.1890
O30	8f	1	0.4303(4)	0.0766(5)	1.1889(5)	
H301	8f	1	0.46390	0.07710	1.21880	0.2010
H302	8f	1	0.39720	0.07760	1.14750	0.2010

O31	8f	1	0.5289(4)	-0.1197(7)	1.3632(6)	
H311	8f	1	0.52700	-0.15100	1.38710	0.2810
H312	8f	1	0.55740	-0.09370	1.38680	0.2810
O32	8f	1	0.3620(8)	-0.0096(11)	0.7641(11)	
H321	8f	1	0.34690	-0.01890	0.71670	0.4280
H322	8f	1	0.36830	-0.01910	0.80360	0.4280
O33	4e	2	1/2	-0.1892(8)	1.25000	
H331	8f	1	0.508(5)	-0.2181(13)	1.284(4)	0.2320
Fe1	8f	1	0.24578(3)	0.03161(4)	0.84730(4)	
Fe2	8f	1	0.13963(3)	0.14743(4)	0.75091(4)	
Fe3	8f	1	0.12570(3)	-0.03835(4)	0.76048(4)	

Anisotropic displacement parameters, in Å²

Atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
C1	0.050(3)	0.040(3)	0.044(3)	0.009(3)	0.036(3)	0.006(3)
C2	0.057(4)	0.047(4)	0.046(3)	0.005(3)	0.038(3)	0.009(3)
C3	0.079(5)	0.123(7)	0.071(5)	-0.018(5)	0.052(5)	0.024(5)
C4	0.072(6)	0.210(12)	0.051(5)	0.010(7)	0.025(5)	0.050(6)
C5	0.049(3)	0.034(3)	0.041(3)	0.003(3)	0.034(3)	0.006(2)
C6	0.056(4)	0.036(3)	0.052(3)	0.005(3)	0.040(3)	0.000(3)
C7	0.103(6)	0.076(5)	0.111(6)	-0.019(4)	0.095(6)	-0.025(4)
C8	0.077(5)	0.070(5)	0.073(5)	-0.001(4)	0.042(5)	-0.027(4)
C9	0.036(3)	0.040(3)	0.037(3)	-0.011(2)	0.027(3)	-0.009(2)
C10	0.042(3)	0.047(3)	0.042(3)	-0.010(3)	0.032(3)	-0.007(3)
C11	0.066(4)	0.094(5)	0.078(5)	0.019(4)	0.063(4)	0.017(4)
C12	0.109(6)	0.083(5)	0.099(6)	0.019(5)	0.088(6)	0.037(5)
C13	0.045(3)	0.037(3)	0.040(3)	-0.006(3)	0.031(3)	-0.005(2)
C14	0.040(3)	0.047(4)	0.042(3)	-0.006(3)	0.027(3)	-0.008(3)
C15	0.055(4)	0.080(5)	0.056(4)	-0.001(4)	0.018(4)	-0.025(4)
C16	0.127(8)	0.053(5)	0.102(7)	-0.009(5)	0.077(6)	-0.031(5)
C17	0.036(3)	0.048(3)	0.035(3)	-0.007(3)	0.027(3)	-0.008(3)
C18	0.040(3)	0.046(3)	0.034(3)	-0.004(3)	0.026(3)	-0.008(2)
C19	0.047(4)	0.066(4)	0.051(4)	-0.002(3)	0.022(3)	0.010(3)
C20	0.054(4)	0.102(6)	0.058(4)	-0.036(4)	0.028(4)	-0.029(4)
C21	0.034(3)	0.052(4)	0.046(3)	-0.003(3)	0.030(3)	-0.001(3)
C22	0.045(3)	0.069(4)	0.046(3)	-0.004(3)	0.037(3)	0.000(3)
C23	0.181(10)	0.094(7)	0.172(10)	0.033(6)	0.165(9)	0.043(6)
C24	0.068(5)	0.094(6)	0.100(6)	0.002(4)	0.063(5)	-0.025(5)
O34	0.0344(18)	0.038(2)	0.0337(18)	-0.0039(15)	0.0253(17)	0.0000(15)
N1	0.057(3)	0.056(3)	0.047(3)	0.011(3)	0.038(3)	0.014(2)
N2	0.063(3)	0.043(3)	0.054(3)	0.007(3)	0.044(3)	-0.006(2)
N3	0.059(3)	0.050(3)	0.057(3)	-0.008(3)	0.048(3)	-0.001(2)
N4	0.058(3)	0.048(3)	0.050(3)	-0.011(3)	0.037(3)	-0.018(2)
N5	0.040(3)	0.058(3)	0.034(2)	-0.006(2)	0.024(2)	-0.011(2)
N6	0.040(3)	0.064(3)	0.046(3)	0.003(2)	0.033(2)	-0.005(2)
O1	0.044(2)	0.050(2)	0.045(2)	-0.0003(18)	0.030(2)	0.0099(18)
O2	0.050(2)	0.052(3)	0.043(2)	-0.010(2)	0.028(2)	0.0060(19)
O3	0.047(2)	0.050(2)	0.061(3)	-0.004(2)	0.040(2)	-0.016(2)
O4	0.046(2)	0.048(2)	0.055(2)	-0.0089(19)	0.038(2)	-0.0142(19)
O5	0.039(2)	0.058(3)	0.050(2)	0.0041(19)	0.033(2)	0.011(2)
O6	0.051(2)	0.045(2)	0.061(2)	-0.0007(18)	0.046(2)	0.0041(19)
O7	0.039(2)	0.044(2)	0.043(2)	-0.0004(18)	0.0240(19)	-0.0069(18)
O8	0.040(2)	0.047(2)	0.040(2)	0.0019(18)	0.020(2)	-0.0069(18)
O9	0.044(2)	0.048(2)	0.037(2)	-0.0081(19)	0.0233(19)	0.0005(18)
O10	0.038(2)	0.044(2)	0.041(2)	-0.0047(18)	0.0211(19)	0.0060(18)
O11	0.058(2)	0.052(2)	0.064(3)	0.010(2)	0.051(2)	0.010(2)
O12	0.072(3)	0.050(3)	0.081(3)	-0.009(2)	0.067(3)	-0.006(2)
O13	0.036(2)	0.056(3)	0.051(2)	0.0048(19)	0.029(2)	0.006(2)

O14	0.053(2)	0.039(2)	0.056(3)	0.0094(19)	0.042(2)	0.0100(19)
O15	0.051(2)	0.059(3)	0.053(2)	-0.014(2)	0.037(2)	-0.002(2)
O16	0.071(3)	0.120(4)	0.049(3)	0.010(3)	0.041(3)	0.030(3)
O17	0.082(3)	0.065(3)	0.081(3)	-0.008(3)	0.062(3)	-0.031(3)
O18	0.079(3)	0.074(3)	0.073(3)	0.007(3)	0.066(3)	0.017(2)
O19	0.079(3)	0.057(3)	0.070(3)	-0.009(3)	0.042(3)	-0.030(2)
O20	0.039(2)	0.077(3)	0.040(2)	-0.014(2)	0.014(2)	-0.009(2)
O21	0.072(3)	0.099(4)	0.075(3)	0.007(3)	0.063(3)	-0.007(3)
O22	0.068(3)	0.082(4)	0.086(4)	-0.009(3)	0.051(3)	-0.004(3)
O23	0.094(4)	0.087(4)	0.100(4)	0.018(3)	0.079(4)	0.022(3)
O24	0.075(4)	0.133(5)	0.077(4)	-0.010(4)	0.049(3)	-0.001(4)
O25	0.096(3)	0.088(3)	0.113(4)	-0.009(3)	0.078(3)	-0.001(3)
O26	0.119(5)	0.078(4)	0.082(4)	0.028(4)	0.054(4)	-0.009(3)
O27	0.107(3)	0.114(4)	0.115(4)	-0.004(3)	0.083(3)	-0.003(3)
O28	0.088(4)	0.155(7)	0.082(4)	-0.048(5)	0.045(4)	-0.015(4)
O29	0.160(5)	0.151(5)	0.186(5)	0.016(3)	0.130(4)	-0.009(4)
O30	0.170(5)	0.166(5)	0.167(5)	-0.001(4)	0.119(4)	-0.020(4)
O31	0.222(6)	0.241(7)	0.234(6)	-0.068(4)	0.158(5)	0.025(4)
O32	0.359(10)	0.352(10)	0.358(10)	0.005(5)	0.252(7)	0.001(5)
O33	0.184(7)	0.183(7)	0.203(7)	0.00000	0.132(5)	0.00000
Fe1	0.0341(4)	0.0348(4)	0.0374(4)	-0.0019(3)	0.0252(4)	-0.0007(3)
Fe2	0.0325(4)	0.0355(4)	0.0360(4)	-0.0024(3)	0.0254(4)	-0.0008(3)
Fe3	0.0369(4)	0.0362(4)	0.0397(4)	-0.0038(3)	0.0283(4)	-0.0015(3)

Selected geometric informations			
Atoms 1,2	d 1,2 [Å]	Atoms 1,2	d 1,2 [Å]
C1—O1	1.253(6)	C22—N6	1.261(8)
C1—O2	1.260(7)	C22—C23	1.483(9)
C1—C2	1.505(7)	C23—H23A	0.9600
C2—N1	1.262(7)	C23—H23B	0.9600
C2—C3	1.493(9)	C23—H23C	0.9600
C3—H3A	0.9600	C24—O21	1.436(9)
C3—H3B	0.9600	C24—H24A	0.9600
C3—H3C	0.9600	C24—H24B	0.9600
C4—O16	1.419(9)	C24—H24C	0.9600
C4—H4A	0.9600	O34—Fe3	1.902(3)
C4—H4B	0.9600	O34—Fe1	1.916(3)
C4—H4C	0.9600	O34—Fe2	1.926(3)
C5—O4	1.255(6)	N1—O16	1.395(6)
C5—O3	1.261(6)	N2—O17	1.396(6)
C5—C6	1.502(8)	N3—O18	1.390(6)
C6—N2	1.287(7)	N4—O19	1.419(6)
C6—C7	1.480(8)	N5—O20	1.398(6)
C7—H7A	0.9600	N6—O21	1.379(6)
C7—H7B	0.9600	O1—Fe1	2.018(4)
C7—H7C	0.9600	O2—Fe3	2.008(4)
C8—O17	1.443(8)	O3—Fe1	2.013(4)
C8—H8A	0.9600	O4—Fe3	2.020(4)
C8—H8B	0.9600	O5—Fe1	2.026(4)
C8—H8C	0.9600	O6—Fe2	2.023(4)
C9—O5	1.254(6)	O7—Fe1	2.020(4)
C9—O6	1.255(6)	O8—Fe2	2.009(4)
C9—C10	1.508(7)	O9—Fe2	2.019(4)
C10—N3	1.271(7)	O10—Fe3	2.016(4)
C10—C11	1.474(8)	O11—Fe2	1.990(4)
C11—H11A	0.9600	O12—Fe3	2.015(4)
C11—H11B	0.9600	O13—Fe1	2.035(4)
C11—H11C	0.9600	O13—H131	0.858(10)
C12—O18	1.429(8)	O13—H132	0.849(10)
C12—H12A	0.9600	O14—Fe2	2.044(4)

C12—H12B	0.9600	O14—H141	0.845(10)
C12—H12C	0.9600	O14—H142	0.844(10)
C13—O8	1.249(6)	O15—Fe3	2.072(4)
C13—O7	1.262(6)	O15—H151	0.849(10)
C13—C14	1.492(7)	O15—H152	0.85(1)
C14—N4	1.278(7)	O22—H221	0.848(10)
C14—C15	1.488(8)	O22—H222	0.849(10)
C15—H15A	0.9600	O23—H231	0.852(10)
C15—H15B	0.9600	O23—H232	0.854(10)
C15—H15C	0.9600	O24—H241	0.849(10)
C16—O19	1.413(9)	O24—H242	0.846(11)
C16—H16A	0.9600	O25—H251	0.846(10)
C16—H16B	0.9600	O25—H252	0.847(10)
C16—H16C	0.9600	O26—H261	0.85(1)
C17—O10	1.246(6)	O26—H262	0.848(11)
C17—O9	1.256(6)	O27—H271	0.852(10)
C17—C18	1.506(7)	O27—H272	0.852(10)
C18—N5	1.287(7)	O28—H281	0.851(10)
C18—C19	1.497(8)	O28—H282	0.853(10)
C19—H19A	0.9600	O29—H291	0.8489
C19—H19B	0.9600	O29—H292	0.8495
C19—H19C	0.9600	O30—H301	0.8392
C20—O20	1.428(8)	O30—H302	0.8572
C20—H20C	0.9600	O31—H311	0.8513
C20—H20B	0.9600	O31—H312	0.8490
C20—H20A	0.9600	O32—H321	0.9223
C21—O12	1.240(7)	O32—H322	0.8745
C21—O11	1.270(7)	O33—H331	0.849(10)
C21—C22	1.505(7)		

Atoms 1,2,3	Angle 1,2,3 [°]	Atoms 1,2,3	Angle 1,2,3 [°]
O1—C1—O2	125.7(5)	H23A—C23—H23C	109.500
O1—C1—C2	119.0(5)	H23B—C23—H23C	109.500
O2—C1—C2	115.3(5)	O21—C24—H24A	109.500
N1—C2—C3	126.8(6)	O21—C24—H24B	109.500
N1—C2—C1	114.3(5)	H24A—C24—H24B	109.500
C3—C2—C1	118.9(6)	O21—C24—H24C	109.500
C2—C3—H3A	109.500	H24A—C24—H24C	109.500
C2—C3—H3B	109.500	H24B—C24—H24C	109.500
H3A—C3—H3B	109.500	Fe3—O34—Fe1	120.63(17)
C2—C3—H3C	109.500	Fe3—O34—Fe2	119.30(17)
H3A—C3—H3C	109.500	Fe1—O34—Fe2	120.05(17)
H3B—C3—H3C	109.500	C2—N1—O16	112.0(5)
O16—C4—H4A	109.500	C6—N2—O17	111.0(5)
O16—C4—H4B	109.500	C10—N3—O18	111.9(5)
H4A—C4—H4B	109.500	C14—N4—O19	110.6(5)
O16—C4—H4C	109.500	C18—N5—O20	111.1(5)
H4A—C4—H4C	109.500	C22—N6—O21	111.4(5)
H4B—C4—H4C	109.500	C1—O1—Fe1	131.0(4)
O4—C5—O3	126.2(5)	C1—O2—Fe3	133.2(4)
O4—C5—C6	118.9(5)	C5—O3—Fe1	133.8(4)
O3—C5—C6	114.9(5)	C5—O4—Fe3	129.7(4)
N2—C6—C7	125.8(5)	C9—O5—Fe1	131.6(3)
N2—C6—C5	113.7(5)	C9—O6—Fe2	133.6(4)
C7—C6—C5	120.4(5)	C13—O7—Fe1	133.2(3)
C6—C7—H7A	109.500	C13—O8—Fe2	132.2(4)
C6—C7—H7B	109.500	C17—O9—Fe2	131.4(3)
H7A—C7—H7B	109.500	C17—O10—Fe3	131.2(3)
C6—C7—H7C	109.500	C21—O11—Fe2	132.5(4)
H7A—C7—H7C	109.500	C21—O12—Fe3	131.3(4)
H7B—C7—H7C	109.500	Fe1—O13—H131	135.(3)

O17—C8—H8A	109.500	Fe1—O13—H132	118.(3)
O17—C8—H8B	109.500	H131—O13—H132	105.9(17)
H8A—C8—H8B	109.500	Fe2—O14—H141	125.(4)
O17—C8—H8C	109.500	Fe2—O14—H142	115.(4)
H8A—C8—H8C	109.500	H141—O14—H142	108.0(18)
H8B—C8—H8C	109.500	Fe3—O15—H151	111.(4)
O5—C9—O6	126.0(5)	Fe3—O15—H152	121.(4)
O5—C9—C10	116.0(5)	H151—O15—H152	106.7(17)
O6—C9—C10	117.9(5)	N1—O16—C4	109.8(5)
N3—C10—C11	126.5(5)	N2—O17—C8	108.2(5)
N3—C10—C9	113.3(5)	N3—O18—C12	109.0(5)
C11—C10—C9	120.3(5)	C16—O19—N4	109.6(5)
C10—C11—H11A	109.500	N5—O20—C20	110.3(5)
C10—C11—H11B	109.500	N6—O21—C24	108.6(5)
H11A—C11—H11B	109.500	H221—O22—H222	106.9(18)
C10—C11—H11C	109.500	H231—O23—H232	105.(3)
H11A—C11—H11C	109.500	H241—O24—H242	107.6(18)
H11B—C11—H11C	109.500	H251—O25—H252	109.(3)
O18—C12—H12A	109.500	H261—O26—H262	107.0(18)
O18—C12—H12B	109.500	H271—O27—H272	106.3(18)
H12A—C12—H12B	109.500	H281—O28—H282	106.5(18)
O18—C12—H12C	109.500	H291—O29—H292	118.300
H12A—C12—H12C	109.500	H301—O30—H302	159.200
H12B—C12—H12C	109.500	H311—O31—H312	119.000
O8—C13—O7	125.8(5)	H321—O32—H322	154.700
O8—C13—C14	118.5(5)	O34—Fe1—O3	92.62(15)
O7—C13—C14	115.7(5)	O34—Fe1—O1	95.46(15)
N4—C14—C15	125.5(5)	O3—Fe1—O1	93.32(17)
N4—C14—C13	113.5(5)	O34—Fe1—O7	94.72(15)
C15—C14—C13	120.9(5)	O3—Fe1—O7	172.56(15)
C14—C15—H15A	109.500	O1—Fe1—O7	87.20(16)
C14—C15—H15B	109.500	O34—Fe1—O5	95.28(14)
H15A—C15—H15B	109.500	O3—Fe1—O5	86.84(17)
C14—C15—H15C	109.500	O1—Fe1—O5	169.24(15)
H15A—C15—H15C	109.500	O7—Fe1—O5	91.27(16)
H15B—C15—H15C	109.500	O34—Fe1—O13	179.00(16)
O19—C16—H16A	109.500	O3—Fe1—O13	87.55(17)
O19—C16—H16B	109.500	O1—Fe1—O13	83.55(16)
H16A—C16—H16B	109.500	O7—Fe1—O13	85.13(17)
O19—C16—H16C	109.500	O5—Fe1—O13	85.71(16)
H16A—C16—H16C	109.500	O34—Fe2—O11	94.26(15)
H16B—C16—H16C	109.500	O34—Fe2—O8	96.94(15)
O10—C17—O9	126.1(5)	O11—Fe2—O8	88.47(17)
O10—C17—C18	119.2(5)	O34—Fe2—O9	94.58(15)
O9—C17—C18	114.7(5)	O11—Fe2—O9	92.25(16)
N5—C18—C19	125.5(5)	O8—Fe2—O9	168.37(16)
N5—C18—C17	114.2(5)	O34—Fe2—O6	93.69(14)
C19—C18—C17	120.3(5)	O11—Fe2—O6	171.99(16)
C18—C19—H19A	109.500	O8—Fe2—O6	89.57(16)
C18—C19—H19B	109.500	O9—Fe2—O6	88.12(16)
H19A—C19—H19B	109.500	O34—Fe2—O14	177.47(15)
C18—C19—H19C	109.500	O11—Fe2—O14	87.14(16)
H19A—C19—H19C	109.500	O8—Fe2—O14	85.20(16)
H19B—C19—H19C	109.500	O9—Fe2—O14	83.25(16)
O20—C20—H20C	109.500	O6—Fe2—O14	84.95(16)
O20—C20—H20B	109.500	O34—Fe3—O2	96.39(15)
H20C—C20—H20B	109.500	O34—Fe3—O12	92.68(15)
O20—C20—H20A	109.500	O2—Fe3—O12	85.76(18)
H20C—C20—H20A	109.500	O34—Fe3—O10	99.19(15)
H20B—C20—H20A	109.500	O2—Fe3—O10	164.09(16)
O12—C21—O11	126.0(5)	O12—Fe3—O10	90.28(18)
O12—C21—C22	116.5(5)	O34—Fe3—O4	93.72(15)

O11—C21—C22	117.5(5)	O2—Fe3—O4	91.74(17)
N6—C22—C23	125.7(6)	O12—Fe3—O4	173.35(16)
N6—C22—C21	116.4(5)	O10—Fe3—O4	90.47(16)
C23—C22—C21	117.8(6)	O34—Fe3—O15	177.98(17)
C22—C23—H23A	109.500	O2—Fe3—O15	81.61(16)
C22—C23—H23B	109.500	O12—Fe3—O15	86.92(17)
H23A—C23—H23B	109.500	O10—Fe3—O15	82.80(16)
C22—C23—H23C	109.500	O4—Fe3—O15	86.62(17)

Selected hydrogen bonds				
Atoms D,H,A	Dist. D,H [Å]	Dist. H,A [Å]	Dist. D,A [Å]	Angle D,H,A [°]
O13—H131—O29	0.858(10)	1.800(18)	2.644(9)	167.(6)
O13—H132—O24	0.849(10)	1.917(17)	2.755(8)	169.(6)
O14—H141—O26	0.845(10)	1.83(2)	2.633(7)	159.(6)
O14—H142—O23	0.844(10)	1.857(12)	2.699(7)	176.(5)
O15—H151—O27	0.849(10)	2.01(2)	2.824(8)	161.(5)
O15—H152—O22	0.85(1)	1.857(13)	2.702(7)	172.(5)
O22—H221—O27 ⁱ	0.848(10)	2.49(8)	2.957(9)	116.(7)
O22—H222—O28 ⁱⁱ	0.849(10)	2.08(2)	2.919(10)	169.(6)
O23—H231—O28	0.852(10)	2.44(8)	2.902(9)	115.(7)
O23—H232—N3	0.854(10)	2.20(3)	3.002(7)	157.(6)
O24—H241—O30	0.849(10)	2.43(8)	2.968(10)	122.(7)
O24—H242—O13	0.846(11)	2.32(9)	2.755(8)	113.(8)
O25—H251—N2	0.846(10)	2.17(3)	2.995(8)	164.(7)
O25—H252—O15	0.847(10)	2.34(8)	2.865(8)	120.(8)
O26—H261—O30 ⁱⁱⁱ	0.85(1)	2.20(5)	2.962(11)	150.(10)
O26—H262—N4	0.848(11)	2.26(3)	3.045(8)	155.(7)
O27—H271—O22 ⁱ	0.852(10)	2.39(8)	2.957(9)	124.(8)
O28—H281—O23	0.851(10)	2.36(8)	2.902(9)	122.(8)
O28—H282—O25 ⁱⁱ	0.853(10)	2.00(3)	2.832(9)	167.(10)
O29—H291—O23 ^{iv}	0.8500	2.0300	2.877(10)	179.000
O29—H292—O13	0.8500	2.2000	2.644(9)	112.300
O30—H301—O30 ^v	0.8400	2.6500	3.488(19)	178.800
O30—H302—O24	0.8600	2.5500	2.968(10)	110.700
O31—H311—O28 ^{vi}	0.8500	2.0200	2.871(12)	178.100
O31—H312—O24 ^v	0.8500	2.0300	2.878(12)	174.000
O32—H321—O26 ^{iv}	0.9200	2.1800	2.72(2)	116.900
O32—H322—O29	0.8700	1.7400	2.62(2)	176.900
O33—H331—O27 ^{vii}	0.849(10)	2.32(10)	2.841(13)	120.(9)

(i) -x, y, 1.5-z; (ii) -x, -y, 1-z; (iii) 0.5-x, 0.5-y, 2-z; (iv) 0.5-x, -0.5+y, 1.5-z;

(v) 1-x, y, 2.5-z; (vi) 0.5+x, -0.5+y, 1+z; (vii) 0.5+x, -0.5-y, 0.5+z.

(i) 2-x, 1-y, -z; (ii) -1+x, -1+y, z.