21 Oct 2004

Experimental

Crystal data

$C_{36}H_{50}FeSi_4$
$M_r = 650.97$
Orthorhombic
Pccn
$a = 30.770$ (18) Å
$b = 9.063$ (5) Å
$c = 13.514$ (10) Å
$V = 3768.7$ (41) Å^3
$Z = 4$
$D_x = 1.147$ Mg m^{-3}
D_m ? measured by ?

Mo $K\alpha$ radiation
$\lambda = 0.71073$ Å
Cell parameters from 17 reflections
$\theta = 2.9$–$10.0°$
$\mu = 0.549$ mm^{-1}
$T = 296$ (2) K
Parellelepiped
Yellow
$0.50 \times 0.36 \times 0.14$ mm
Crystal source: ?

Data collection

Siemens P4 diffractometer
$2\theta/\theta$ scans
Absorption correction:
analytical
$T_{min} = 0.816$, $T_{max} = 0.927$
6639 measured reflections
3320 independent reflections
1891 reflections with
$I > 2\sigma(I)$

$R_{int} = 0.091$
$\theta_{max} = 25.00°$
$h = -36 \rightarrow 36$
$k = -10 \rightarrow 10$
$l = -16 \rightarrow 16$
3 standard reflections
every 97 reflections
intensity decay: variation < 1.5%

Refinement

Refinement on F^2
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.079$
$wR(F^2) = 0.205$
$S = 1.09$
3307 reflections
186 parameters
H-atom parameters constrained

$w=1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0657P)^2 + 0.8353P]$
where $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
$(\Delta/\sigma)_{max} < 0.001$
$\Delta\rho_{max} = 0.74$ e Å^{-3}
$\Delta\rho_{min} = -0.37$ e Å^{-3}
Extinction correction: none
Scattering factors from *International Tables for Crystallography* (Vol. C)

Supplementary data

The tables of data shown below are not normally printed in *Acta Cryst. Section C* but the data will be available electronically *via* the online contents pages at

http://journals.iucr.org/c/journalhomepage.html

Table *S*1. *Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (Å²)*

$$U_{\rm eq} = (1/3)\Sigma_i\Sigma_j U^{ij} a^i a^j \mathbf{a}_i.\mathbf{a}_j.$$

	x	y	z	$U_{\rm eq}$
Fe1	1/4	1/4	0.00111 (9)	0.0391 (3)
Si1	0.35445 (5)	0.1513 (2)	0.07742 (13)	0.0408 (4)
Si2	0.45792 (6)	−0.2267 (2)	0.09405 (14)	0.0542 (5)
C1	0.2994 (2)	0.1033 (6)	0.0313 (4)	0.0392 (14)
C2	0.2612 (2)	0.0706 (6)	0.0891 (5)	0.047 (2)
C3	0.2265 (2)	0.0424 (6)	0.0233 (5)	0.052 (2)
C4	0.2410 (2)	0.0556 (6)	−0.0727 (5)	0.058 (2)
C5	0.2863 (2)	0.0950 (6)	−0.0697 (5)	0.0439 (15)
C6	0.3841 (2)	−0.0243 (6)	0.1126 (4)	0.0387 (14)
C7	0.4210 (2)	−0.0657 (7)	0.0685 (5)	0.047 (2)
C8	0.3842 (2)	0.2490 (7)	−0.0215 (4)	0.060 (2)
C9	0.3502 (2)	0.2602 (8)	0.1928 (4)	0.065 (2)
C10	0.3651 (2)	−0.1097 (6)	0.1958 (5)	0.0402 (14)
C11	0.3291 (2)	−0.1996 (7)	0.1824 (5)	0.053 (2)
C12	0.3115 (2)	−0.2765 (7)	0.2613 (6)	0.070 (2)
C13	0.3290 (3)	−0.2626 (8)	0.3549 (6)	0.071 (2)
C14	0.3634 (3)	−0.1690 (8)	0.3683 (5)	0.067 (2)
C15	0.3815 (2)	−0.0938 (7)	0.2899 (5)	0.052 (2)
C16	0.4293 (2)	−0.3899 (7)	0.1453 (6)	0.080 (2)
C17	0.5019 (3)	−0.1696 (9)	0.1799 (6)	0.088 (3)
C18	0.4828 (2)	−0.2744 (9)	−0.0278 (5)	0.086 (3)

Table *S*2. *Anisotropic displacement parameters* (Å²)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Fe1	0.0373 (6)	0.0291 (5)	0.0508 (7)	0.0056 (6)	0.000	0.000
Si1	0.0395 (9)	0.0373 (9)	0.0456 (9)	0.0049 (8)	0.0026 (9)	0.0045 (8)
Si2	0.0451 (10)	0.0519 (12)	0.0656 (12)	0.0137 (9)	0.0003 (10)	0.0011 (10)
C1	0.036 (3)	0.035 (3)	0.047 (3)	0.010 (3)	0.006 (3)	0.009 (3)
C2	0.056 (4)	0.032 (3)	0.053 (4)	0.008 (3)	0.013 (3)	0.008 (3)
C3	0.036 (4)	0.029 (3)	0.090 (5)	0.007 (3)	−0.006 (4)	0.002 (3)
C4	0.065 (5)	0.038 (4)	0.069 (4)	0.008 (3)	−0.017 (4)	−0.019 (4)
C5	0.046 (4)	0.034 (3)	0.052 (4)	0.003 (3)	0.002 (3)	−0.005 (3)
C6	0.035 (3)	0.040 (3)	0.041 (3)	0.000 (3)	0.004 (3)	0.001 (3)
C7	0.044 (4)	0.051 (4)	0.047 (4)	0.007 (3)	0.007 (3)	0.010 (3)
C8	0.054 (4)	0.058 (4)	0.068 (4)	0.013 (4)	0.007 (3)	0.025 (4)
C9	0.082 (5)	0.052 (4)	0.063 (4)	0.011 (4)	−0.010 (4)	−0.007 (4)
C10	0.033 (3)	0.035 (3)	0.052 (4)	0.005 (3)	0.005 (3)	0.003 (3)
C11	0.049 (4)	0.045 (4)	0.065 (4)	0.005 (3)	−0.005 (4)	0.004 (3)
C12	0.059 (4)	0.044 (5)	0.109 (6)	−0.011 (3)	0.014 (5)	0.019 (5)
C13	0.090 (6)	0.051 (5)	0.071 (5)	0.004 (5)	0.027 (5)	0.023 (4)
C14	0.080 (6)	0.062 (5)	0.059 (4)	−0.002 (4)	−0.002 (4)	0.011 (4)
C15	0.054 (4)	0.047 (4)	0.055 (4)	−0.010 (3)	−0.007 (4)	0.003 (3)
C16	0.073 (5)	0.047 (4)	0.121 (7)	0.018 (4)	0.004 (5)	0.013 (5)
C17	0.069 (5)	0.113 (7)	0.082 (5)	0.014 (5)	−0.015 (5)	−0.007 (6)
C18	0.064 (5)	0.099 (7)	0.097 (6)	0.015 (5)	0.010 (5)	−0.021 (5)

Table *S*3. *Geometric parameters (Å, °)*

Fe1—C5^{i}	2.034 (6)	C6—C10	1.485 (8)
Fe1—C5	2.034 (6)	C7—H7	0.93
Fe1—C3^{i}	2.037 (6)	C8—H8A	0.96
Fe1—C3	2.037 (6)	C8—H8B	0.96
Fe1—C4	2.043 (6)	C8—H8C	0.96
Fe1—C4^{i}	2.043 (6)	C9—H9A	0.96
Fe1—C2^{i}	2.044 (6)	C9—H9B	0.96
Fe1—C2	2.044 (6)	C9—H9C	0.96
Fe1—C1^{i}	2.061 (5)	C10—C15	1.376 (8)
Fe1—C1	2.061 (5)	C10—C11	1.386 (8)
Si1—C8	1.846 (6)	C11—C12	1.384 (9)
Si1—C9	1.850 (6)	C11—H11	0.93
Si1—C1	1.855 (6)	C12—C13	1.380 (9)
Si1—C6	1.895 (6)	C12—H12	0.93
Si2—C16	1.855 (7)	C13—C14	1.369 (10)
Si2—C17	1.856 (7)	C13—H13	0.93
Si2—C18	1.867 (7)	C14—C15	1.377 (8)
Si2—C7	1.881 (6)	C14—H14	0.93
C1—C5	1.426 (8)	C15—H15	0.93
C1—C2	1.443 (7)	C16—H16A	0.96
C2—C3	1.412 (8)	C16—H16B	0.96
C2—H2	0.98	C16—H16C	0.96
C3—C4	1.377 (9)	C17—H17A	0.96
C3—H3	0.98	C17—H17B	0.96
C4—C5	1.439 (8)	C17—H17C	0.96
C4—H4	0.98	C18—H18A	0.96
C5—H5	0.98	C18—H18B	0.96
C6—C7	1.338 (7)	C18—H18C	0.96
C5^{i}—Fe1—C5	123.8 (4)	C4^{i}—Fe1—C1^{i}	68.9 (2)
C5^{i}—Fe1—C3^{i}	68.0 (3)	C2^{i}—Fe1—C1^{i}	41.1 (2)
C5—Fe1—C3^{i}	120.8 (2)	C2—Fe1—C1^{i}	121.5 (2)
C5^{i}—Fe1—C3	120.8 (2)	C5^{i}—Fe1—C1	160.7 (2)
C5—Fe1—C3	68.0 (3)	C5—Fe1—C1	40.7 (2)
C3^{i}—Fe1—C3	163.1 (4)	C3^{i}—Fe1—C1	107.8 (2)
C5^{i}—Fe1—C4	106.9 (2)	C3—Fe1—C1	68.7 (2)
C5—Fe1—C4	41.3 (2)	C4—Fe1—C1	68.9 (2)
C3^{i}—Fe1—C4	156.3 (3)	C4^{i}—Fe1—C1	123.6 (2)
C3—Fe1—C4	39.4 (2)	C2^{i}—Fe1—C1	121.5 (2)
C5^{i}—Fe1—C4^{i}	41.3 (2)	C2—Fe1—C1	41.1 (2)
C5—Fe1—C4^{i}	106.9 (2)	C1^{i}—Fe1—C1	157.2 (3)
C3^{i}—Fe1—C4^{i}	39.4 (2)	C8—Si1—C9	112.9 (3)
C3—Fe1—C4^{i}	156.3 (3)	C8—Si1—C1	108.7 (3)
C4—Fe1—C4^{i}	121.6 (4)	C9—Si1—C1	110.2 (3)
C5^{i}—Fe1—C2^{i}	68.4 (3)	C8—Si1—C6	110.3 (3)
C5—Fe1—C2^{i}	156.4 (2)	C9—Si1—C6	105.7 (3)
C3^{i}—Fe1—C2^{i}	40.5 (2)	C1—Si1—C6	109.0 (3)
C3—Fe1—C2^{i}	126.1 (3)	C16—Si2—C17	109.6 (4)
C4—Fe1—C2^{i}	161.3 (3)	C16—Si2—C18	109.8 (4)
C4^{i}—Fe1—C2^{i}	67.7 (3)	C17—Si2—C18	108.5 (4)
C5^{i}—Fe1—C2	156.4 (2)	C16—Si2—C7	113.6 (3)
C5—Fe1—C2	68.4 (3)	C17—Si2—C7	109.8 (3)
C3^{i}—Fe1—C2	126.1 (3)	C18—Si2—C7	105.4 (3)
C3—Fe1—C2	40.5 (2)	C5—C1—C2	106.0 (5)
C4—Fe1—C2	67.7 (3)	C5—C1—Si1	126.4 (4)
C4^{i}—Fe1—C2	161.3 (3)	C2—C1—Si1	127.6 (4)
C2^{i}—Fe1—C2	108.9 (3)	C5—C1—Fe1	68.6 (3)
C5^{i}—Fe1—C1^{i}	40.7 (2)	C2—C1—Fe1	68.8 (3)
C5—Fe1—C1^{i}	160.7 (2)	Si1—C1—Fe1	126.1 (3)
C3^{i}—Fe1—C1^{i}	68.7 (2)	C3—C2—C1	108.2 (5)
C3—Fe1—C1^{i}	107.8 (2)	C3—C2—Fe1	69.5 (3)
C4—Fe1—C1^{i}	123.6 (2)	C1—C2—Fe1	70.1 (3)

C3—C2—H2	125.9 (4)	H9B—C9—H9C	109.5
C1—C2—H2	125.9 (3)	C15—C10—C11	118.4 (6)
Fe1—C2—H2	125.9 (2)	C15—C10—C6	120.0 (5)
C4—C3—C2	109.4 (6)	C11—C10—C6	121.5 (6)
C4—C3—Fe1	70.5 (4)	C12—C11—C10	120.6 (6)
C2—C3—Fe1	70.0 (3)	C12—C11—H11	119.7 (4)
C4—C3—H3	125.3 (4)	C10—C11—H11	119.7 (4)
C2—C3—H3	125.3 (4)	C13—C12—C11	120.4 (7)
Fe1—C3—H3	125.3 (2)	C13—C12—H12	119.8 (4)
C3—C4—C5	108.0 (6)	C11—C12—H12	119.8 (4)
C3—C4—Fe1	70.1 (4)	C14—C13—C12	118.7 (7)
C5—C4—Fe1	69.0 (3)	C14—C13—H13	120.7 (4)
C3—C4—H4	126.0 (4)	C12—C13—H13	120.7 (4)
C5—C4—H4	126.0 (4)	C13—C14—C15	121.2 (7)
Fe1—C4—H4	126.0 (2)	C13—C14—H14	119.4 (5)
C1—C5—C4	108.3 (6)	C15—C14—H14	119.4 (4)
C1—C5—Fe1	70.7 (3)	C10—C15—C14	120.7 (6)
C4—C5—Fe1	69.7 (3)	C10—C15—H15	119.7 (4)
C1—C5—H5	125.8 (3)	C14—C15—H15	119.7 (4)
C4—C5—H5	125.8 (4)	Si2—C16—H16A	109.5 (3)
Fe1—C5—H5	125.8 (2)	Si2—C16—H16B	109.5 (3)
C7—C6—C10	121.7 (5)	H16A—C16—H16B	109.5
C7—C6—Si1	122.2 (4)	Si2—C16—H16C	109.5 (2)
C10—C6—Si1	116.0 (4)	H16A—C16—H16C	109.5
C6—C7—Si2	130.5 (5)	H16B—C16—H16C	109.5
C6—C7—H7	114.8 (4)	Si2—C17—H17A	109.5 (3)
Si2—C7—H7	114.8 (2)	Si2—C17—H17B	109.5 (3)
Si1—C8—H8A	109.5 (2)	H17A—C17—H17B	109.5
Si1—C8—H8B	109.5 (2)	Si2—C17—H17C	109.5 (3)
H8A—C8—H8B	109.5	H17A—C17—H17C	109.5
Si1—C8—H8C	109.5 (2)	H17B—C17—H17C	109.5
H8A—C8—H8C	109.5	Si2—C18—H18A	109.5 (3)
H8B—C8—H8C	109.5	Si2—C18—H18B	109.5 (2)
Si1—C9—H9A	109.5 (2)	H18A—C18—H18B	109.5
Si1—C9—H9B	109.5 (2)	Si2—C18—H18C	109.5 (2)
H9A—C9—H9B	109.5	H18A—C18—H18C	109.5
Si1—C9—H9C	109.5 (2)	H18B—C18—H18C	109.5
H9A—C9—H9C	109.5		

C8—Si1—C1—C5	19.8 (6)	C2^{i}—Fe1—C1—C2	82.8 (5)
C9—Si1—C1—C5	143.9 (5)	C2—Fe1—C1—C2	0.0
C6—Si1—C1—C5	−100.5 (5)	C1^{i}—Fe1—C1—C2	47.9 (3)
C8—Si1—C1—C2	−158.6 (5)	C5^{i}—Fe1—C1—Si1	77.4 (9)
C9—Si1—C1—C2	−34.4 (6)	C5—Fe1—C1—Si1	120.2 (5)
C6—Si1—C1—C2	81.1 (5)	C3^{i}—Fe1—C1—Si1	3.3 (4)
C8—Si1—C1—Fe1	−68.9 (4)	C3—Fe1—C1—Si1	−159.2 (5)
C9—Si1—C1—Fe1	55.3 (4)	C4—Fe1—C1—Si1	158.4 (5)
C6—Si1—C1—Fe1	170.9 (3)	C4^{i}—Fe1—C1—Si1	43.7 (5)
C5^{i}—Fe1—C1—C5	−42.8 (10)	C2^{i}—Fe1—C1—Si1	−39.0 (5)
C5—Fe1—C1—C5	0.0	C2—Fe1—C1—Si1	−121.8 (5)
C3^{i}—Fe1—C1—C5	−116.9 (4)	C1^{i}—Fe1—C1—Si1	−73.9 (3)
C3—Fe1—C1—C5	80.7 (4)	C5—C1—C2—C3	0.5 (6)
C4—Fe1—C1—C5	38.2 (4)	Si1—C1—C2—C3	179.1 (4)
C4^{i}—Fe1—C1—C5	−76.4 (4)	Fe1—C1—C2—C3	59.3 (4)
C2^{i}—Fe1—C1—C5	−159.1 (3)	C5—C1—C2—Fe1	−58.8 (4)
C2—Fe1—C1—C5	118.1 (5)	Si1—C1—C2—Fe1	119.9 (5)
C1^{i}—Fe1—C1—C5	165.9 (3)	Fe1—C1—C2—Fe1	0.0
C5^{i}—Fe1—C1—C2	−160.8 (7)	C5^{i}—Fe1—C2—C3	44.9 (7)
C5—Fe1—C1—C2	−118.1 (5)	C5—Fe1—C2—C3	−81.1 (4)
C3^{i}—Fe1—C1—C2	125.0 (4)	C3^{i}—Fe1—C2—C3	165.8 (3)
C3—Fe1—C1—C2	−37.4 (3)	C3—Fe1—C2—C3	0.0
C4—Fe1—C1—C2	−79.8 (4)	C4—Fe1—C2—C3	−36.4 (4)
C4^{i}—Fe1—C1—C2	165.5 (4)	C4^{i}—Fe1—C2—C3	−159.9 (8)

C2^{i}—Fe1—C2—C3	124.0 (4)	C1^{i}—Fe1—C4—C5	163.9 (4)
C1^{i}—Fe1—C2—C3	80.3 (4)	C1—Fe1—C4—C5	−37.7 (4)
C1—Fe1—C2—C3	−119.4 (5)	C2—C1—C5—C4	−0.9 (6)
C5^{i}—Fe1—C2—C1	164.3 (6)	Si1—C1—C5—C4	−179.5 (4)
C5—Fe1—C2—C1	38.3 (3)	Fe1—C1—C5—C4	−59.7 (4)
C3^{i}—Fe1—C2—C1	−74.9 (5)	C2—C1—C5—Fe1	58.9 (4)
C3—Fe1—C2—C1	119.4 (5)	Si1—C1—C5—Fe1	−119.8 (4)
C4—Fe1—C2—C1	83.0 (4)	Fe1—C1—C5—Fe1	0.0
C4^{i}—Fe1—C2—C1	−40.6 (10)	C3—C4—C5—C1	0.9 (7)
C2^{i}—Fe1—C2—C1	−116.7 (4)	Fe1—C4—C5—C1	60.3 (4)
C1^{i}—Fe1—C2—C1	−160.3 (3)	C3—C4—C5—Fe1	−59.4 (4)
C1—Fe1—C2—C1	0.0	Fe1—C4—C5—Fe1	0.0
C1—C2—C3—C4	0.1 (7)	C5^{i}—Fe1—C5—C1	164.3 (4)
Fe1—C2—C3—C4	59.7 (4)	C3^{i}—Fe1—C5—C1	81.4 (4)
C1—C2—C3—Fe1	−59.6 (4)	C3—Fe1—C5—C1	−82.4 (4)
Fe1—C2—C3—Fe1	0.0	C4—Fe1—C5—C1	−119.0 (6)
C5^{i}—Fe1—C3—C4	79.0 (4)	C4^{i}—Fe1—C5—C1	122.1 (4)
C5—Fe1—C3—C4	−38.3 (4)	C2^{i}—Fe1—C5—C1	49.2 (7)
C3^{i}—Fe1—C3—C4	−163.3 (4)	C2—Fe1—C5—C1	−38.7 (3)
C4—Fe1—C3—C4	0.0	C1^{i}—Fe1—C5—C1	−163.4 (5)
C4^{i}—Fe1—C3—C4	43.8 (10)	C1—Fe1—C5—C1	0.0
C2^{i}—Fe1—C3—C4	163.5 (4)	C5^{i}—Fe1—C5—C4	−76.6 (4)
C2—Fe1—C3—C4	−120.3 (5)	C3^{i}—Fe1—C5—C4	−159.5 (5)
C1^{i}—Fe1—C3—C4	121.6 (4)	C3—Fe1—C5—C4	36.6 (4)
C1—Fe1—C3—C4	−82.3 (4)	C4—Fe1—C5—C4	0.0
C5^{i}—Fe1—C3—C2	−160.7 (3)	C4^{i}—Fe1—C5—C4	−118.8 (5)
C5—Fe1—C3—C2	82.0 (4)	C2^{i}—Fe1—C5—C4	168.2 (6)
C3^{i}—Fe1—C3—C2	−43.0 (3)	C2—Fe1—C5—C4	80.4 (4)
C4—Fe1—C3—C2	120.3 (5)	C1^{i}—Fe1—C5—C4	−44.4 (10)
C4^{i}—Fe1—C3—C2	164.1 (6)	C1—Fe1—C5—C4	119.0 (6)
C2^{i}—Fe1—C3—C2	−76.3 (5)	C8—Si1—C6—C7	−0.5 (6)
C2—Fe1—C3—C2	0.0	C9—Si1—C6—C7	−122.8 (5)
C1^{i}—Fe1—C3—C2	−118.1 (4)	C1—Si1—C6—C7	118.8 (5)
C1—Fe1—C3—C2	38.0 (3)	C8—Si1—C6—C10	176.5 (4)
C2—C3—C4—C5	−0.6 (7)	C9—Si1—C6—C10	54.2 (5)
Fe1—C3—C4—C5	58.7 (4)	C1—Si1—C6—C10	−64.2 (5)
C2—C3—C4—Fe1	−59.4 (4)	C10—C6—C7—Si2	−0.7 (9)
Fe1—C3—C4—Fe1	0.0	Si1—C6—C7—Si2	176.1 (3)
C5^{i}—Fe1—C4—C3	−118.2 (4)	C16—Si2—C7—C6	29.7 (7)
C5—Fe1—C4—C3	119.4 (6)	C17—Si2—C7—C6	−93.4 (7)
C3^{i}—Fe1—C4—C3	168.0 (4)	C18—Si2—C7—C6	149.9 (6)
C3—Fe1—C4—C3	0.0	C7—C6—C10—C15	79.6 (8)
C4^{i}—Fe1—C4—C3	−161.0 (4)	Si1—C6—C10—C15	−97.4 (6)
C2^{i}—Fe1—C4—C3	−45.8 (9)	C7—C6—C10—C11	−104.5 (7)
C2—Fe1—C4—C3	37.3 (4)	Si1—C6—C10—C11	78.5 (7)
C1^{i}—Fe1—C4—C3	−76.7 (4)	C15—C10—C11—C12	−3.0 (9)
C1—Fe1—C4—C3	81.7 (4)	C6—C10—C11—C12	−179.0 (6)
C5^{i}—Fe1—C4—C5	122.3 (5)	C10—C11—C12—C13	1.2 (10)
C5—Fe1—C4—C5	0.0	C11—C12—C13—C14	1.5 (11)
C3^{i}—Fe1—C4—C5	48.5 (9)	C12—C13—C14—C15	−2.4 (12)
C3—Fe1—C4—C5	−119.4 (6)	C11—C10—C15—C14	2.0 (10)
C4^{i}—Fe1—C4—C5	79.6 (4)	C6—C10—C15—C14	178.1 (6)
C2^{i}—Fe1—C4—C5	−165.2 (7)	C13—C14—C15—C10	0.7 (11)
C2—Fe1—C4—C5	−82.1 (4)		

Symmetry codes: (i) $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z$.