

Table S1. Selected bond angles [deg] for ligand I and complexes II, III, IV and V.

I	II	III	IVa	IVb	V
C(2)-C(1)-N(1) 120.36(2)	O(20)-Cu-N(14) 92.4(2)	O(10a)-Zn-O(10) 95.36(7)	O(1)-Zn(1)-O(26) 178.1(1)	O(70)-Zn(2)-O(65) 90.0(1)	O(10)-Fe-N(18) 92.9(2)
C(1)-C(2)-C(3) 120.93(2)	O(20)-Cu-N(13) 170.4(2)	O(10a)-Zn-N(20) 155.53(6)	O(1)-Zn(1)-O(31) 90.7(1)	O(70)-Zn(2)-O(66) 93.2(1)	O(10a)-Fe-N(18a) 92.9(2)
C(2)-C(3)-C(4) 117.24(3)	N(14)-Cu-N(13) 85.0(2)	O(10)-Zn-N(20) 95.67(5)	O(26)-Zn(1)-O(31) 89.2(1)	O(65)-Zn(2)-O(66) 90.6(1)	O(10)-Fe-N(18a) 85.5(2)
C(3)-C(4)-C(5) 122.56(2)	O(20)-Cu-N(12) 95.5(2)	O(10a)-Zn-N(20a) 95.67(5)	O(1)-Zn(1)-O(27) 91.1(1)	O(70)-Zn(2)-O(40) 89.6(1)	O(10a)-Fe-N(18) 85.5(2)
C(4)-C(5)-C(6) 124.09(2)	N(14)-Cu-N(12) 170.0(2)	O(10)-Zn-N(20a) 155.53(6)	O(26)-Zn(1)-O(27) 90.8(1)	O(65)-Zn(2)-O(40) 178.6(1)	O(10a)-Fe-O(10) 95.5(2)
C(4)-C(5)-N(1) 118.52(2)	N(13)-Cu-N(12) 88.2(2)	N(20)-Zn-N(20a) 82.96(8)	O(31)-Zn(1)-O(27) 93.3(1)	O(66)-Zn(2)-O(40) 90.8(1)	N(18a)-Fe-N(18) 177.6(2)
C(6)-C(5)-N(1) 117.38(3)	O(20)-Cu-O(10) 97.6(1)	O(10a)-Zn-N(18) 87.04(5)	O(1)-Zn(1)-N(12) 85.1(1)	O(70)-Zn(2)-N(54) 172.2(1)	O(10a)-Fe-N(30) 174.1(2)
C(5)-C(6)-N(2) 112.12(3)	N(14)-Cu-O(10) 88.9(2)	O(10)-Zn-N(18) 79.34(5)	O(26)-Zn(1)-N(12) 94.9(1)	O(65)-Zn(2)-N(54) 84.4(2)	O(10)-Fe-N(30) 89.6(2)
C(5)-C(6)-N(3) 111.18(2)	N(13)-Cu-O(10) 91.6(2)	N(20)-Zn-N(18) 116.47(6)	O(31)-Zn(1)-N(12) 174.0(1)	O(66)-Zn(2)-N(54) 92.3(1)	N(18a)-Fe-N(30) 84.6(2)
N(2)-C(6)-N(3) 104.83(2)	N(12)-Cu-O(10) 83.9(1)	N(20a)-Zn-N(18) 79.48(6)	O(27)-Zn(1)-N(12) 91.1(1)	O(40)-Zn(2)-N(54) 95.8(1)	N(18)-Fe-N(30) 97.2(2)
C(8)-C(7)-N(2) 106.65(2)	O(10)-Cu-O(100) 174.1(1)	O(10a)-Zn-N(18a) 79.34(5)	O(1)-Zn(1)-N(15) 93.7(1)	O(70)-Zn(2)-N(51) 90.8(2)	O(10a)-Fe-N(30a) 89.6(2)
C(7)-C(8)-N(3) 104.98(2)	N(10)-O(10)-Cu 100.9(3)	O(10)-Zn-N(18a) 87.04(5)	O(26)-Zn(1)-N(15) 84.4(1)	O(65)-Zn(2)-N(51) 94.7(1)	O(10)-Fe-N(30a) 174.1(2)
C(1)-N(1)-C(5) 120.37(3)	C(107)-N(12)-Cu 115.5(3)	N(20)-Zn-N(18a) 79.48(6)	O(31)-Zn(1)-N(15) 90.9(1)	O(66)-Zn(2)-N(51) 173.7(2)	N(18a)-Fe-N(30a) 97.2(2)
C(1)-N(1)-O(1) 119.14(2)	C(108)-N(12)-Cu 103.6(3)	N(20a)-Zn-N(18a) 116.47(6)	O(27)-Zn(1)-N(15) 73.6(1)	O(40)-Zn(2)-N(51) 83.9(2)	N(18)-Fe-N(30a) 84.6(2)
C(5)-N(1)-O(1) 120.49(2)	C(105)-N(12)-Cu 115.6(3)	N(18)-Zn-N(18a) 159.77(8)	N(12)-Zn(1)-N(15) 85.1(2)	N(54)-Zn(2)-N(51) 84.9(2)	N(30)-Fe-N(30a) 85.5(3)

C(6)-N(2)-C(7)	104.13(2)	C(110)-N(13)-Cu	106.1(4)	N(11)-O(10)-Zn	121.54(9)	N(2)-O(1)-Zn(1)	108.4(2)	N(41)-O(40)-Zn(2)	107.7(2)	N(11)-O(10)-Fe	124.8(3)
C(6)-N(3)-C(8)	104.68(2)	C(109)-N(13)-Cu	105.7(3)	C(17)-N(18)-Zn	124.81(1)	C(11)-N(12)-Zn(1)	117.5(3)	C(50)-N(51)-Zn(2)	116.8(3)	C(17)-N(18)-Fe	124.8(3)
C(6)-N(3)-C(9)	113.84(2)	N(20)-O(20)-Cu	125.3(3)	C(19)-N(18)-Zn	113.15(11)	C(13)-N(12)-Zn(1)	104.0(3)	C(52)-N(51)-Zn(2)	104.1(3)	C(19)-N(18)-Fe	114.5(3)
C(8)-N(3)-C(9)	113.20(3)	O(103)-H(13)-N(13)	159.0	C(21)-N(20)-Zn	105.90(11)	C(8)-N(12)-Zn(1)	114.5(3)	C(47)-N(51)-Zn(2)	115.0(3)	C(20a)-N(30)-Fe	108.2(4)
N(2)-H(2N)-O'(1)	172.84	O(101)-H(11)-N'(11)	165.6(1)	C(22)-N(20)-Zn	109.04(11)	C(16)-N(15)-Zn(1)	118.4(3)	C(55)-N(54)-Zn(2)	118.0(3)	C(31)-N(30)-Fe	110.4(3)
						C(14)-N(15)-Zn(1)	102.9(3)	C(53)-N(54)-Zn(2)	102.3(3)	N(30)-H(30)-O(42)	178.5
						C(19)-N(15)-Zn(1)	114.2(3)	C(58)-N(54)-Zn(2)	115.8(3)	N(30)-H(30)-O(42)	170.5
						N(25)-O(26)-Zn(1)	109.0(3)	N(64)-O(65)-Zn(2)	110.2(3)		
						S(28)-O(27)-Zn(1)	122.6(2)	S(67)-O(66)-Zn(2)	119.6(2)		
						O(27)-S(28)-C(30)	106.1(3)	S(71)-O(70)-Zn(2)	124.3(2)		
						O(27)-S(28)-C(29)	104.2(3)	O(66)-S(67)-C(69)	104.5(3)		
						C(30)-S(28)-C(29)	98.5(3)	O(66)-S(67)-C(68)	105.6(3)		
						S(32)-O(31)-Zn(1)	120.9(2)	C(69)-S(67)-C(68)	98.8(4)		
						O(31)-S(32)-C(34)	103.9(3)	O(70)-S(71)-C(73)	105.8(3)		
						O(31)-S(32)-C(33)	104.6(3)	O(70)-S(71)-C(72)	103.3(3)		
						C(34)-S(32)-C(33)	98.5(4)	C(73)-S(71)-C(72)	98.2(4)		

N(9)-H(9)-O(601)	N(48)-H(48)-O(303)
163.6(1)	155.2278
N(18)-H(18)-O(404)	N(57)-H(57)-O(701)
176.5(1)	175.6(1)

Table S2. Selected IR wavenumbers of the ligand and complexes.

Complex	$\nu(\text{O-H})$ $\delta(\text{H}_2\text{O})$	$\nu(\text{C-N})$	$\nu(\text{N-H})$	$\nu(\text{C=N})$ $\nu(\text{C-N}_{\text{py}})$	$\nu(\text{N-O})$	$\delta(\text{N-O})$	$\delta(\text{N-H})$	$\nu(\text{M-O})$ $\nu(\text{M-N})$
I	-	1173m	3231s	-	1239-	839s	-	-
L¹				1609w	1234s			
II	-	1165w	3359s	1671s	1235w	845w	1564w	478w
[CuL²(ClO₄)₂](ClO₄)			3235s	1609m	1219s			434w
					1210w			368w
					1195s			
III	-	1167s	3306s	1655s	1237s	-	1572s	446s
[ZnL³](ClO₄)₂				1603s	1200s			338m
								280s
								244s
								216s
								527s
V	3623w	1167s	3194m	1655s	1227w	814sh	-	
[FeL³](ClO₄)₂·0.5CH₃OH	3522w			1611s	1186s	802s		
	3467sh							
VI	3548m	1162w	3346s	1656s	1197s	854m	1566sh	590s
CoL¹(ClO₄)₂(H₂O)			3211m	1606m				508w
VII	3578w	1165s	3279s	-	1225w	-	1595s	602w
FeL¹(ClO₄)₂(EtOH)_{0.5}(H₂O)_{0.5}				1611s	1206s			586w
					1595s			475s
								448s

s - strong, m - medium, w - weak, sh - shoulder, b - broad

Table S3. Predicted ^{13}C -NMR shifts (ppm) for L^1 , L^2 and L^3 isomers as compared with experimental data for solutions of **I** and **III**.

No	Type	Predicted			Found	
		L^1	L^2	L^3	I (solv) ^a	III (DMSO)
1	CH	139.0 ± 0.2	139.2 ± 0.7	139.2 ± 0.7	139.8	140.9
1'			138.9 ± 0.6			
2	CH	123.8 ± 0.6	123.8 ± 0.6	123.8 ± 0.6	124.3	126.3
2'			123.8 ± 0.6			
3	CH	125.1 ± 0.7	124.7 ± 0.4	124.7 ± 0.5	124.6	126.7
3'			125.1 ± 0.6			
4	CH	125.2 ± 1.2	125.6 ± 1.7	125.6 ± 1.7	126.1	133.3
4'			125.2 ± 1.8			
5	C	148.1 ± 2.3	150.6 ± 0.9	150.6 ± 0.9	152.5	148.7
5'			148.1 ± 2.3			
6	CH	74.9 ± 6.6	74.9 ± 6.5	—	76.2, 75.9	75.9
6'	-C=	—	158.5 ± 3.6	158.5 ± 3.6		
7	CH ₂	41.4 ± 0.6	41.4 ± 0.6		44.4	43.1
7'			58.4 ± 5.1	58.4 ± 5.1		
8	CH ₂	49.6 ± 2.1	49.6 ± 0.1	49.6 ± 0.1	44.5	51.8
8'			49.6 ± 1.2			
9	CH ₂	54.9 ± 0.2	49.0 ± 3.2	47.7 ± 2.1	54.7	52.1
			50.5 ± 0.9			

^a Solvents: CDCl_3 , $[\text{D}_6]\text{DMSO}$, D_2O .

Table S4. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **I**. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(3)	2154(9)	1516(6)	660(3)	44(1)
C(4)	3126(9)	3137(7)	712(4)	49(1)
C(5)	5026(9)	3158(6)	1430(3)	48(1)
C(6)	5832(9)	1533(6)	2078(3)	41(1)
C(7)	4840(8)	-93(5)	2050(3)	33(1)
C(8)	5642(8)	-1879(5)	2763(3)	36(1)
C(10)	9091(12)	-4566(7)	3205(4)	55(1)
C(11)	8169(11)	-3288(6)	4197(4)	51(1)
C(13)	4452(9)	-397(7)	4538(3)	42(1)
N(2)	2996(6)	-74(5)	1321(2)	36(1)
N(9)	7869(8)	-3373(5)	2281(3)	41(1)
N(12)	6583(6)	-1400(4)	3776(2)	37(1)
O(1)	2052(6)	-1618(4)	1240(2)	48(1)
H(3)	954(93)	1366(61)	145(38)	55(13)
H(4)	2653(97)	4220(65)	179(42)	66(14)
H(5)	5757(87)	4292(66)	1477(35)	55(13)
H(6)	7036(81)	1463(52)	2544(34)	38(11)
H(8)	4090(82)	-2430(54)	2936(30)	38(10)
H(10A)	8354(119)	-5771(86)	3247(49)	96(19)
H(10B)	10879(139)	-5037(86)	2948(55)	100(22)
H(11A)	7116(95)	-3843(64)	4755(41)	62(14)
H(11B)	9775(128)	-3040(83)	4537(50)	99(20)
H(13A)	3377(80)	727(55)	4090(32)	39(10)
H(13B)	3523(96)	-1338(68)	4792(37)	59(14)
H(9N)	9092(86)	-2716(56)	2011(33)	40(11)

Table S5. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **II**. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	$U(\text{eq})$
Cu	13860(5)	16864(4)	16517(4)	367(2)
Cl10	11005(12)	32624(11)	36361(9)	504(4)
O10	1368(3)	397(3)	563(2)	463(9)
N10	1699(3)	908(3)	-115(3)	384(10)
N11	-645(4)	2580(4)	-771(3)	506(12)
N12	133(3)	2264(3)	767(3)	368(9)
N13	312(4)	949(4)	2265(3)	441(11)
N14	2456(4)	908(3)	2456(3)	459(11)
Cl20	-24085(15)	-273(12)	37968(12)	655(5)
O20	2478(3)	2534(3)	1242(2)	454(9)
N20	3526(3)	2287(3)	1290(3)	415(10)
O100	1371(7)	3307(4)	2763(4)	130(3)
C100	2644(4)	637(4)	-387(4)	481(13)
H100	3044(4)	95(4)	-106(4)	58
O101	1915(5)	2912(7)	4284(5)	136(3)
C101	3011(5)	1160(5)	-1073(4)	57(2)
H101	3658(5)	969(5)	-1264(4)	68
O102	749(4)	4207(4)	3914(4)	95(2)
C102	2441(5)	1955(5)	-1477(4)	63(2)
H102	2704(5)	2330(5)	-1929(4)	75
O103	210(5)	2550(4)	3627(4)	99(2)
C103	1458(4)	2205(5)	-1208(4)	504(14)
H103	1044(4)	2731(5)	-1502(4)	60
C104	1089(4)	1680(4)	-510(3)	371(11)
C105	10(4)	1840(4)	-200(3)	371(11)
H105	-377(4)	1187(4)	-222(3)	44
C106	-533(5)	3561(5)	-313(4)	61(2)
H10A	-1237(5)	3819(5)	-220(4)	73
H10B	-201(5)	4054(5)	-673(4)	73
C107	178(5)	3387(4)	597(4)	466(13)
H10C	915(5)	3602(4)	570(4)	56
H10D	-095(5)	3766(4)	1076(4)	56
C108	-847(4)	1975(5)	1186(4)	490(14)
H10E	-1484(4)	1984(5)	726(4)	59
H10F	-953(4)	2466(5)	1655(4)	59
C109	-689(4)	917(5)	1598(4)	524(15)
H10G	-1302(4)	733(5)	1896(4)	63
H10H	-624(4)	416(5)	1128(4)	63
C110	814(6)	-32(4)	2562(4)	61(2)
H11A	848(6)	-473(4)	2042(4)	74
H11B	395(6)	-375(4)	2973(4)	74
C111	1956(5)	204(5)	3050(4)	57(2)
H11C	1922(5)	520(5)	3636(4)	68
H11D	2376(5)	-420(5)	3149(4)	68
C112	3459(5)	884(4)	2407(4)	495(14)

H112	3875(5)	410(4)	2772(4)	59
C113	4023(4)	1533(4)	1828(3)	442(13)
C114	5120(5)	1379(5)	1817(4)	63(2)
H114	5479(5)	864(5)	2173(4)	76
C115	5677(5)	1971(7)	1294(6)	78(2)
H115	6412(5)	1862(7)	1294(6)	94
C116	5153(5)	2725(6)	767(5)	66(2)
H116	5530(5)	3137(6)	413(5)	80
C117	4071(5)	2870(5)	764(4)	497(14)
H117	3707(5)	3374(5)	397(4)	60
O200	-3108(15)	287(10)	3181(9)	360(13)
O201	-1576(16)	428(10)	3584(12)	354(12)
O202	-2615(9)	339(6)	4595(5)	174(4)
O203	-2414(6)	-1076(5)	3749(6)	148(3)
H11	-1333(43)	2362(37)	-840(31)	35(14)
H13	212(46)	1254(43)	2689(39)	44(17)

Table S6. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **III**. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	U(eq)
Zn	5000	8339(1)	2500	30(1)
O(10)	4342(1)	9543(1)	1428(1)	39(1)
N(11)	4688(1)	10525(1)	1285(1)	31(1)
C(12)	4192(1)	11460(2)	1247(1)	39(1)
C(13)	4489(1)	12513(2)	1064(2)	49(1)
C(14)	5296(2)	12630(2)	899(2)	55(1)
C(15)	5792(1)	11671(2)	935(2)	45(1)
C(16)	5498(1)	10607(1)	1149(1)	33(1)
C(17)	6065(1)	9622(2)	1236(1)	37(1)
N(18)	5927(1)	8661(1)	1594(1)	36(1)
C(19)	6571(1)	7772(2)	1700(2)	46(1)
N(20)	4124(1)	6975(1)	1980(1)	38(1)
C(21)	4535(1)	5942(2)	2519(2)	49(1)
C(22)	3295(1)	7254(2)	2221(2)	43(1)
Cl(30)	1932(1)	9888(1)	354(1)	38(1)
O(31)	2298(1)	10784(2)	-114(2)	92(1)
O(32)	2188(2)	8824(2)	30(2)	90(1)
O(33)	2218(2)	9980(2)	1450(2)	82(1)
O(34)	1024(1)	10002(2)	42(2)	66(1)
H(12)	3644(1)	11386(2)	1347(1)	47
H(13)	4146(1)	13148(2)	1050(2)	58
H(14)	5500(2)	13338(2)	767(2)	66
H(15)	6333(1)	11736(2)	814(2)	55
H(17)	6564(1)	9708(2)	1010(1)	45
H(19A)	7100(1)	8091(2)	1606(2)	55
H(19B)	6384(1)	7193(2)	1174(2)	55
H(21A)	4255(1)	5269(2)	2179(2)	58
H(21B)	4487(1)	5940(2)	3237(2)	58
H(22A)	2956(1)	6570(2)	2185(2)	52
H(22B)	2987(1)	7785(2)	1708(2)	52

Table S7. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **IV**. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	$U(\text{eq})$
Zn(1)	7624(1)	5291(1)	5607(1)	40(1)
O(1)	8871(2)	5349(2)	5412(2)	50(1)
Zn(2)	12372(1)	9734(1)	9440(1)	44(1)
N(2)	8707(3)	5141(3)	4656(2)	50(1)
C(3)	9011(4)	4415(4)	4485(4)	59(1)
C(4)	8847(4)	4165(4)	3726(4)	71(2)
C(5)	8358(5)	4657(4)	3124(4)	80(2)
C(6)	8052(4)	5408(4)	3306(3)	66(2)
C(7)	8221(4)	5656(3)	4080(3)	50(1)
C(8)	7946(4)	6471(3)	4347(3)	51(1)
N(9)	7484(4)	6956(3)	3668(3)	69(1)
Cl(10)	9704(1)	2098(1)	5247(1)	77(1)
C(10)	6496(5)	6794(4)	3492(4)	79(2)
C(11)	6394(4)	6204(3)	4123(3)	60(1)
N(12)	7284(3)	6301(2)	4783(2)	44(1)
C(13)	7318(4)	7061(3)	5291(3)	51(1)
C(14)	8118(4)	7069(3)	6060(3)	53(1)
N(15)	8071(3)	6302(2)	6520(2)	44(1)
C(16)	8952(4)	6237(4)	7187(3)	60(1)
C(17)	8913(5)	6859(4)	7826(4)	80(2)
N(18)	7928(4)	6921(3)	7677(3)	66(1)
C(19)	7426(4)	6410(3)	6963(3)	49(1)
C(20)	7092(4)	5559(3)	7184(3)	52(1)
Cl(20)	9760(1)	12859(1)	9188(1)	93(1)
C(21)	7277(5)	5290(4)	7947(4)	76(2)
C(22)	6918(6)	4523(5)	8086(4)	91(2)
C(23)	6364(5)	4017(4)	7455(4)	84(2)
C(24)	6188(4)	4281(4)	6704(4)	64(2)
N(25)	6546(3)	5041(3)	6580(2)	48(1)
O(26)	6388(2)	5262(2)	5834(2)	52(1)
O(27)	7048(2)	4370(2)	4673(2)	51(1)
S(28)	6539(1)	3557(1)	4769(1)	49(1)
C(29)	6706(5)	2833(4)	4086(4)	77(2)
C(30)	5361(4)	3691(4)	4274(4)	77(2)
Cl(30)	14999(1)	13295(1)	9096(1)	83(1)
O(31)	8089(2)	4376(2)	6466(2)	52(1)
S(32)	8620(1)	3663(1)	6334(1)	59(1)
C(33)	8273(5)	2790(4)	6800(5)	95(2)
C(34)	9735(4)	3886(5)	7033(5)	93(2)
O(40)	13804(2)	9921(2)	9686(2)	52(1)
Cl(40)	13344(2)	11046(2)	13336(1)	102(1)
N(41)	14180(3)	10294(3)	10407(2)	48(1)
C(42)	14542(4)	11093(3)	10464(4)	57(1)
C(43)	14896(4)	11510(4)	11182(4)	72(2)
C(44)	14862(4)	11124(4)	11845(4)	77(2)

C(45)	14505(4)	10304(4)	11779(3)	67(2)
C(46)	14159(3)	9877(3)	11049(3)	53(1)
C(47)	13777(4)	8967(3)	10925(3)	56(1)
N(48)	13863(4)	8594(4)	11685(3)	75(2)
C(49)	12960(5)	8564(5)	11777(4)	89(2)
C(50)	12362(4)	9028(4)	11064(3)	67(2)
N(51)	12773(3)	8901(3)	10441(2)	50(1)
C(52)	12513(4)	8035(3)	10073(3)	62(2)
C(53)	12712(4)	7985(3)	9312(3)	56(1)
N(54)	12181(3)	8586(2)	8726(2)	47(1)
C(55)	12484(4)	8613(3)	8029(3)	58(1)
C(56)	11984(5)	7841(4)	7507(4)	73(2)
N(57)	11198(4)	7606(4)	7750(3)	70(2)
C(58)	11204(4)	8227(3)	8345(3)	56(1)
C(59)	10582(3)	8918(3)	7968(3)	53(1)
C(60)	10079(4)	8923(4)	7170(4)	69(2)
C(61)	9499(5)	9571(5)	6867(4)	87(2)
C(62)	9420(5)	10187(5)	7374(5)	91(2)
C(63)	9937(4)	10168(4)	8170(4)	71(2)
N(64)	10486(3)	9539(3)	8448(3)	55(1)
O(65)	10953(2)	9535(2)	9222(2)	54(1)
O(66)	12111(3)	10499(2)	8442(2)	57(1)
S(67)	12643(1)	11354(1)	8517(1)	65(1)
C(68)	13413(5)	11228(5)	8000(4)	96(2)
C(69)	11867(6)	11991(4)	7838(5)	109(3)
O(70)	12446(2)	10750(2)	10200(2)	52(1)
S(71)	11728(1)	11391(1)	10049(1)	57(1)
C(72)	12368(5)	12324(4)	10556(5)	94(2)
C(73)	11116(5)	11146(5)	10700(4)	92(2)
O(101)	8854(7)	2259(7)	4662(7)	133(4)
O(102)	10338(10)	1815(7)	4915(9)	121(5)
O(103)	9582(7)	1474(6)	5736(6)	193(4)
O(104)	10091(7)	2885(5)	5657(7)	112(4)
O(10A)	10210(33)	2433(40)	5881(22)	174(27)
O(10B)	10004(30)	1927(36)	4637(21)	231(28)
O(10C)	8808(28)	2081(30)	5158(30)	126(16)
O(200)	9672(16)	12609(17)	9916(16)	155(11)
O(201)	9551(6)	12057(5)	8827(7)	196(4)
O(202)	10560(14)	13206(13)	9233(19)	231(14)
O(203)	9073(5)	13385(5)	8847(4)	160(3)
O(20A)	10112(22)	12977(20)	9974(12)	196(13)
O(20B)	10471(26)	12956(25)	8855(22)	157(17)
O(301)	15566(8)	13993(5)	9400(5)	236(5)
O(302)	15130(5)	12653(4)	9633(4)	132(2)
O(303)	15146(5)	12987(5)	8412(4)	144(2)
O(304)	14119(6)	13511(6)	8858(6)	198(4)
O(401)	13854(25)	10441(16)	13327(16)	209(17)
O(402)	13792(13)	11880(9)	13434(13)	178(7)
O(403)	13236(35)	11489(29)	13853(22)	307(33)
O(404)	12715(8)	11181(7)	12619(5)	229(5)

O(40A)	12955(23)	10272(22)	13052(29)	288(24)
O(40B)	14261(24)	10861(29)	13490(20)	196(21)
O(40C)	12955(14)	10900(11)	13943(10)	143(6)
S(500)	14365(2)	8251(2)	13880(2)	77(1)
S(50A)	14930(23)	8232(14)	14359(12)	220(13)
O(501)	14708(5)	7428(3)	14223(4)	126(2)
C(502)	15326(6)	8902(5)	13889(7)	128(4)
C(503)	14103(9)	8791(6)	14620(7)	140(4)
S(600)	11868(3)	492(3)	5478(2)	62(1)
S(60A)	12027(15)	418(13)	5615(14)	190(9)
O(601)	7489(3)	8820(3)	3987(3)	88(1)
C(602)	12610(7)	-368(6)	5551(10)	191(6)
C(603)	11226(6)	25(5)	6038(5)	100(2)
S(700)	11251(4)	15224(3)	8879(2)	105(1)
S(70A)	11839(3)	15627(2)	9416(2)	94(1)
O(701)	11553(5)	15986(3)	8595(3)	117(2)
C(702)	12246(9)	14602(8)	9277(9)	194(6)
C(703)	10885(12)	15298(8)	9598(9)	206(7)
S(800)	5471(12)	4080(5)	1867(6)	183(6)
S(80A)	5811(8)	4099(9)	1725(11)	250(10)
O(801)	5807(7)	3217(4)	2175(4)	184(4)
C(803)	4465(8)	3965(7)	1080(7)	164(5)
C(802)	5458(18)	4639(14)	2283(13)	275(10)
H(3)	9337(4)	4081(4)	4894(4)	70
H(4)	9064(4)	3665(4)	3613(4)	85
H(5)	8233(5)	4489(4)	2600(4)	96
H(6)	7729(4)	5747(4)	2900(3)	79
H(8)	8493(4)	6801(3)	4692(3)	61
H(9)	7604(46)	7476(43)	3783(37)	84(22)
H(10A)	6207(5)	6531(4)	2969(4)	94
H(10B)	6214(5)	7317(4)	3511(4)	94
H(11A)	5901(4)	6361(3)	4296(3)	72
H(11B)	6265(4)	5624(3)	3920(3)	72
H(13A)	6752(4)	7062(3)	5403(3)	61
H(13B)	7371(4)	7568(3)	5009(3)	61
H(14A)	8685(4)	7097(3)	5948(3)	64
H(14B)	8121(4)	7569(3)	6374(3)	64
H(16A)	9470(4)	6391(4)	7023(3)	72
H(16B)	9004(4)	5667(4)	7380(3)	72
H(17A)	9217(5)	6649(4)	8349(4)	96
H(17B)	9205(5)	7405(4)	7784(4)	96
H(18)	7773(40)	7403(37)	7624(33)	61(19)
H(19)	6899(4)	6706(3)	6635(3)	58
H(21)	7650(5)	5633(4)	8371(4)	92
H(22)	7045(6)	4345(5)	8601(4)	109
H(23)	6112(5)	3496(4)	7543(4)	101
H(24)	5822(4)	3938(4)	6277(4)	77
H(29A)	7332(5)	2689(4)	4272(4)	115
H(29B)	6566(5)	3087(4)	3580(4)	115
H(29C)	6310(5)	2332(4)	4037(4)	115

H(30A)	5153(4)	4079(4)	4574(4)	115
H(30B)	5018(4)	3156(4)	4218(4)	115
H(30C)	5274(4)	3910(4)	3760(4)	115
H(33A)	7660(5)	2584(4)	6487(5)	143
H(33B)	8289(5)	2965(4)	7316(5)	143
H(33C)	8681(5)	2349(4)	6849(5)	143
H(34A)	10030(4)	4359(5)	6867(5)	140
H(34B)	10085(4)	3401(5)	7072(5)	140
H(34C)	9694(4)	4017(5)	7540(5)	140
H(42)	14552(4)	11364(3)	10012(4)	69
H(43)	15161(4)	12058(4)	11219(4)	86
H(44)	15078(4)	11411(4)	12333(4)	92
H(45)	14493(4)	10029(4)	12229(3)	80
H(47)	14110(4)	8646(3)	10659(3)	67
H(48)	13966(47)	8134(41)	11672(39)	75(24)
H(49A)	12998(5)	8845(5)	12268(4)	107
H(49B)	12718(5)	7985(5)	11771(4)	107
H(50A)	11733(4)	8792(4)	10890(3)	80
H(50B)	12375(4)	9624(4)	11194(3)	80
H(52A)	11865(4)	7896(3)	9965(3)	74
H(52B)	12855(4)	7628(3)	10436(3)	74
H(53A)	13362(4)	8114(3)	9424(3)	67
H(53B)	12557(4)	7414(3)	9089(3)	67
H(55A)	13143(4)	8583(3)	8193(3)	70
H(55B)	12319(4)	9130(3)	7747(3)	70
H(56A)	11781(5)	7980(4)	6953(4)	88
H(56B)	12384(5)	7380(4)	7588(4)	88
H(57)	11288(40)	7219(34)	7929(33)	47(19)
H(58)	10996(4)	7953(3)	8744(3)	68
H(60)	10125(4)	8495(4)	6834(4)	82
H(61)	9170(5)	9584(5)	6328(4)	105
H(62)	9023(5)	10612(5)	7185(5)	110
H(63)	9903(4)	10594(4)	8514(4)	86
H(68A)	13893(5)	10885(5)	8299(4)	144
H(68B)	13675(5)	11771(5)	7929(4)	144
H(68C)	13089(5)	10958(5)	7493(4)	144
H(69A)	11391(6)	12121(4)	8035(5)	163
H(69B)	11602(6)	11692(4)	7337(5)	163
H(69C)	12188(6)	12506(4)	7773(5)	163
H(72A)	12749(5)	12549(4)	10275(5)	141
H(72B)	12745(5)	12188(4)	11081(5)	141
H(72C)	11955(5)	12735(4)	10585(5)	141
H(73A)	10724(5)	10641(5)	10509(4)	138
H(73B)	10753(5)	11605(5)	10723(4)	138
H(73C)	11543(5)	11058(5)	11219(4)	138

Table S8. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **V**. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Atom	x	y	z	$U(\text{eq})$
Fe	0	1958(1)	2500	39(1)
O(10)	-1081(3)	2715(2)	2234(2)	55(1)
N(11)	-1037(3)	3256(2)	1532(2)	42(1)
C(12)	-1755(4)	3871(3)	1639(4)	58(1)
C(13)	-1843(5)	4452(3)	955(4)	68(2)
C(14)	-1204(5)	4406(3)	191(4)	61(1)
C(15)	-469(5)	3790(3)	102(3)	58(1)
C(16)	-383(4)	3199(3)	791(3)	46(1)
C(17)	373(4)	2535(3)	664(3)	53(1)
N(18)	562(3)	1981(2)	1253(3)	50(1)
C(19)	1350(5)	1330(3)	1037(4)	68(2)
C(20)	1915(5)	1134(4)	1942(5)	77(2)
N(30)	-1076(4)	1076(3)	2308(4)	64(1)
C(31)	-502(5)	277(3)	2208(5)	78(2)
Cl(40)	-1806(1)	1328(1)	-424(1)	67(1)
O(41)	-713(23)	996(17)	-480(19)	165(11)
O(42)	-2112(22)	1305(15)	500(10)	160(12)
O(43)	-2631(20)	1000(15)	-902(17)	161(12)
O(44)	-1732(27)	2108(12)	-675(23)	128(10)
O(41A)	-1099(19)	849(15)	-2(20)	145(9)
O(42A)	-2384(25)	1532(19)	322(16)	241(18)
O(43A)	-2214(26)	887(17)	-1125(15)	187(14)
O(44A)	-1446(28)	2087(16)	-743(17)	130(11)
Cl(50)	0	5473(2)	2500	85(1)
O(51)	728(5)	5965(4)	3043(4)	121(2)
O(52)	-640(4)	4997(4)	3106(3)	110(2)
C(60)	1104(17)	1952(14)	-1529(12)	122(7)
O(70)	492(11)	7908(9)	2875(12)	147(5)
H(12)	-2185(4)	3901(3)	2171(4)	70
H(13)	-2337(5)	4873(3)	1020(4)	82
H(14)	-1265(5)	4792(3)	-275(4)	74
H(15)	-24(5)	3766(3)	-420(3)	70
H(17)	751(4)	2513(3)	104(3)	63
H(19A)	1872(5)	1511(3)	576(4)	81
H(19B)	976(5)	859(3)	797(4)	81
H(20A)	2302(5)	626(4)	1887(5)	92
H(20B)	2437(5)	1553(4)	2093(5)	92
H(30)	-1347(47)	1135(32)	1813(40)	63(17)
H(31A)	-981(5)	-156(3)	2405(5)	94
H(31B)	-312(5)	187(3)	1562(5)	94