

C(55)	9110(7)	3931(8)	3250(4)	43(3)
C(56)	9155(7)	4797(7)	3102(4)	38(3)
C(61)	8405(7)	7660(7)	559(4)	28(3)
C(62)	7934(7)	7949(8)	98(4)	42(3)
C(63)	7972(8)	8829(8)	-38(5)	50(4)
C(64)	8513(7)	9406(8)	288(4)	46(4)
C(65)	8995(7)	9113(8)	734(4)	40(3)
C(66)	8946(7)	8246(7)	866(4)	37(3)
C(71)	9274(7)	6363(7)	962(4)	33(3)
C(72)	9540(8)	5964(8)	1417(4)	45(4)
C(73)	10400(9)	5655(9)	1585(5)	63(4)
C(74)	10917(9)	5750(9)	1292(5)	64(4)
C(75)	10675(9)	6146(9)	853(5)	66(4)
C(76)	9845(8)	6451(8)	675(5)	51(4)
C(81)	7840(7)	6057(7)	353(4)	24(3)
C(82)	8210(7)	5260(7)	248(4)	36(3)
C(83)	7707(8)	4678(8)	-97(4)	44(4)
C(84)	6887(8)	4873(8)	-339(4)	45(3)
C(85)	6530(8)	5651(8)	-243(4)	41(3)
C(86)	7002(7)	6239(8)	102(4)	39(3)
S(1)	5358(3)	11659(2)	1411(1)	51(1)
O(6)	6247(7)	11602(7)	1443(4)	97(4)
O(7)	5014(9)	10923(6)	1596(5)	121(5)
O(8)	5087(6)	12506(5)	1540(3)	59(3)
C(1S)	4870(15)	11612(13)	750(7)	93(6)
F(1)	4096(8)	11730(9)	610(5)	158(6)
F(2)	5210(9)	12301(9)	529(4)	147(5)
F(3)	5073(7)	10872(7)	555(3)	130(4)
S(2)	3370(2)	7244(2)	1380(1)	49(1)
O(9)	3507(5)	8151(5)	1524(3)	58(3)
O(10)	4117(6)	6781(6)	1299(4)	69(3)
O(11)	2563(5)	7065(6)	1021(3)	62(3)
C(2S)	3242(12)	6754(10)	1944(6)	63(4)
F(4)	3135(5)	5867(5)	1872(3)	85(3)
F(5)	3917(6)	6861(7)	2318(3)	103(3)
F(6)	2554(6)	7033(6)	2066(3)	80(3)
C(1S)	9782(12)	1647(12)	149(5)	96(6)
C(2S)	9022(12)	2223(11)	178(6)	92(6)
O(1S)	8327(10)	1595(8)	132(4)	118(4)
C(3S)	7458(16)	1979(16)	86(8)	156(11)
C(4S)	6780(15)	1390(19)	15(11)	224(18)
O(1W)	3455(35)	9975(37)	1018(20)	662(34)

* U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S-13. Bond lengths [Å] and Angles [deg] for **3-Ph-OTf**.

Fe(1)-O(1)	1.804(7)	C(41)-C(46)	1.404(14)
Fe(1)-O(2)	2.046(7)	C(42)-C(43)	1.403(15)
Fe(1)-O(4)	2.059(8)	C(43)-C(44)	1.365(14)
Fe(1)-N(2)	2.185(9)	C(44)-C(45)	1.340(14)
Fe(1)-N(3)	2.219(9)	C(45)-C(46)	1.383(15)
Fe(1)-N(1)	2.232(9)	C(51)-C(52)	1.380(15)
Fe(1)-Fe(2)	3.154(2)	C(51)-C(56)	1.410(14)
Fe(2)-O(1)	1.790(7)	C(52)-C(53)	1.45(2)
Fe(2)-O(5)	2.035(8)	C(53)-C(54)	1.36(2)
Fe(2)-O(3)	2.051(7)	C(54)-C(55)	1.312(15)
Fe(2)-N(5)	2.182(9)	C(55)-C(56)	1.387(15)
Fe(2)-N(6)	2.207(8)	C(61)-C(66)	1.378(14)
Fe(2)-N(4)	2.255(9)	C(61)-C(62)	1.387(14)
O(2)-C(1)	1.258(12)	C(62)-C(63)	1.40(2)
O(3)-C(1)	1.293(12)	C(63)-C(64)	1.40(2)
O(4)-C(3)	1.277(12)	C(64)-C(65)	1.361(14)
O(5)-C(3)	1.244(13)	C(65)-C(66)	1.376(14)
N(1)-C(11)	1.473(13)	C(71)-C(72)	1.373(15)
N(1)-C(16)	1.476(14)	C(71)-C(76)	1.38(2)
N(1)-C(17)	1.498(13)	C(72)-C(73)	1.42(2)
N(2)-C(18)	1.467(13)	C(73)-C(74)	1.32(2)
N(2)-C(13)	1.467(13)	C(74)-C(75)	1.33(2)
N(2)-C(12)	1.502(13)	C(75)-C(76)	1.38(2)
N(3)-C(19)	1.462(13)	C(81)-C(86)	1.380(14)
N(3)-C(14)	1.484(15)	C(81)-C(82)	1.414(14)
N(3)-C(15)	1.489(14)	C(82)-C(83)	1.401(14)
N(4)-C(27)	1.477(13)	C(83)-C(84)	1.354(14)
N(4)-C(21)	1.479(13)	C(84)-C(85)	1.373(15)
N(4)-C(26)	1.496(13)	C(85)-C(86)	1.388(14)
N(6)-C(24)	1.479(13)	S(1)-O(7)	1.406(10)
N(6)-C(29)	1.479(13)	S(1)-O(6)	1.419(10)
N(6)-C(25)	1.485(13)	S(1)-O(8)	1.435(8)
N(5)-C(23)	1.475(13)	S(1)-C(1S)	1.81(2)
N(5)-C(28)	1.485(13)	C(1S)-F(1)	1.22(2)
N(5)-C(22)	1.504(13)	C(1S)-F(3)	1.33(2)
C(1)-C(2)	1.549(15)	C(1S)-F(2)	1.40(2)
C(2)-C(31)	1.537(15)	S(2)-O(9)	1.436(8)
C(2)-C(41)	1.54(2)	S(2)-O(11)	1.448(8)
C(2)-C(51)	1.562(14)	S(2)-O(10)	1.467(8)
C(3)-C(4)	1.563(15)	S(2)-C(2S)	1.81(2)
C(4)-C(81)	1.534(14)	C(2S)-F(5)	1.309(15)
C(4)-C(71)	1.544(15)	C(2S)-F(6)	1.32(2)
C(4)-C(61)	1.560(14)	C(2S)-F(4)	1.366(15)
C(11)-C(12)	1.49(2)	C(1S)-C(2S)	1.53(2)
C(13)-C(14)	1.47(2)	C(2S)-O(1S)	1.45(2)
C(15)-C(16)	1.46(2)	O(1S)-C(3S)	1.50(2)
C(26)-C(25)	1.481(15)	C(3S)-C(4S)	1.39(3)
C(23)-C(24)	1.514(15)		
C(22)-C(21)	1.51(2)	O(1)-Fe(1)-O(2)	95.2(3)
C(31)-C(36)	1.374(14)	O(1)-Fe(1)-O(4)	97.6(3)
C(31)-C(32)	1.389(14)	O(2)-Fe(1)-O(4)	92.4(3)
C(32)-C(33)	1.41(2)	O(1)-Fe(1)-N(2)	95.8(3)
C(33)-C(34)	1.36(2)	O(2)-Fe(1)-N(2)	93.6(3)
C(34)-C(35)	1.38(2)	O(4)-Fe(1)-N(2)	164.8(3)
C(35)-C(36)	1.380(15)	O(1)-Fe(1)-N(3)	100.7(3)
C(41)-C(42)	1.361(14)	O(2)-Fe(1)-N(3)	163.3(3)

O(4)-Fe(1)-N(3)	90.5(3)	C(27)-N(4)-C(26)	109.5(9)
N(2)-Fe(1)-N(3)	79.9(3)	C(21)-N(4)-C(26)	111.0(9)
O(1)-Fe(1)-N(1)	174.8(3)	C(27)-N(4)-Fe(2)	113.7(7)
O(2)-Fe(1)-N(1)	84.5(3)	C(21)-N(4)-Fe(2)	103.5(7)
O(4)-Fe(1)-N(1)	87.6(3)	C(26)-N(4)-Fe(2)	110.6(7)
N(2)-Fe(1)-N(1)	79.0(3)	C(24)-N(6)-C(29)	108.9(8)
N(3)-Fe(1)-N(1)	79.1(3)	C(24)-N(6)-C(25)	113.9(9)
O(1)-Fe(1)-Fe(2)	28.5(2)	C(29)-N(6)-C(25)	109.2(9)
O(2)-Fe(1)-Fe(2)	77.2(2)	C(24)-N(6)-Fe(2)	108.0(6)
O(4)-Fe(1)-Fe(2)	76.4(2)	C(29)-N(6)-Fe(2)	111.7(6)
N(2)-Fe(1)-Fe(2)	118.5(3)	C(25)-N(6)-Fe(2)	105.1(7)
N(3)-Fe(1)-Fe(2)	119.4(2)	C(23)-N(5)-C(28)	108.8(8)
N(1)-Fe(1)-Fe(2)	155.1(2)	C(23)-N(5)-C(22)	110.9(9)
O(1)-Fe(2)-O(5)	95.5(3)	C(28)-N(5)-C(22)	108.4(9)
O(1)-Fe(2)-O(3)	97.6(3)	C(23)-N(5)-Fe(2)	102.3(6)
O(5)-Fe(2)-O(3)	92.9(3)	C(28)-N(5)-Fe(2)	114.3(7)
O(1)-Fe(2)-N(5)	98.3(3)	C(22)-N(5)-Fe(2)	112.1(7)
O(5)-Fe(2)-N(5)	165.0(3)	O(2)-C(1)-O(3)	123.6(10)
O(3)-Fe(2)-N(5)	91.2(3)	O(2)-C(1)-C(2)	117.9(10)
O(1)-Fe(2)-N(6)	95.8(3)	O(3)-C(1)-C(2)	118.4(10)
O(5)-Fe(2)-N(6)	91.4(3)	C(31)-C(2)-C(41)	111.6(9)
O(3)-Fe(2)-N(6)	165.4(3)	C(31)-C(2)-C(1)	105.4(9)
N(5)-Fe(2)-N(6)	81.3(3)	C(41)-C(2)-C(1)	109.8(9)
O(1)-Fe(2)-N(4)	174.0(3)	C(31)-C(2)-C(51)	112.1(9)
O(5)-Fe(2)-N(4)	86.4(3)	C(41)-C(2)-C(51)	106.7(9)
O(3)-Fe(2)-N(4)	88.0(3)	C(1)-C(2)-C(51)	111.3(9)
N(5)-Fe(2)-N(4)	79.3(3)	O(5)-C(3)-O(4)	124.4(10)
N(6)-Fe(2)-N(4)	78.4(3)	O(5)-C(3)-C(4)	116.9(10)
O(1)-Fe(2)-Fe(1)	28.8(2)	O(4)-C(3)-C(4)	118.7(11)
O(5)-Fe(2)-Fe(1)	77.0(2)	C(81)-C(4)-C(71)	110.9(9)
O(3)-Fe(2)-Fe(1)	76.8(2)	C(81)-C(4)-C(61)	115.1(9)
N(5)-Fe(2)-Fe(1)	118.0(2)	C(71)-C(4)-C(61)	107.9(8)
N(6)-Fe(2)-Fe(1)	117.8(2)	C(81)-C(4)-C(3)	105.0(8)
N(4)-Fe(2)-Fe(1)	156.7(3)	C(71)-C(4)-C(3)	107.7(8)
Fe(2)-O(1)-Fe(1)	122.7(4)	C(61)-C(4)-C(3)	110.0(9)
C(1)-O(2)-Fe(1)	130.7(7)	N(1)-C(11)-C(12)	112.2(10)
C(1)-O(3)-Fe(2)	129.1(7)	C(11)-C(12)-N(2)	111.7(10)
C(3)-O(4)-Fe(1)	129.0(7)	N(2)-C(13)-C(14)	112.5(10)
C(3)-O(5)-Fe(2)	131.1(7)	C(13)-C(14)-N(3)	113.4(11)
C(11)-N(1)-C(16)	109.9(9)	C(16)-C(15)-N(3)	112.2(10)
C(11)-N(1)-C(17)	109.7(9)	C(15)-C(16)-N(1)	114.4(10)
C(16)-N(1)-C(17)	108.0(9)	C(25)-C(26)-N(4)	110.9(9)
C(11)-N(1)-Fe(1)	110.8(7)	N(5)-C(23)-C(24)	111.7(9)
C(16)-N(1)-Fe(1)	103.7(7)	N(6)-C(24)-C(23)	113.5(9)
C(17)-N(1)-Fe(1)	114.4(7)	N(5)-C(22)-C(21)	110.5(10)
C(18)-N(2)-C(13)	108.8(9)	C(26)-C(25)-N(6)	112.5(9)
C(18)-N(2)-C(12)	108.4(9)	N(4)-C(21)-C(22)	112.1(10)
C(13)-N(2)-C(12)	112.2(9)	C(36)-C(31)-C(32)	115.6(11)
C(18)-N(2)-Fe(1)	111.7(7)	C(36)-C(31)-C(2)	121.9(11)
C(13)-N(2)-Fe(1)	110.5(7)	C(32)-C(31)-C(2)	122.3(10)
C(12)-N(2)-Fe(1)	105.1(7)	C(31)-C(32)-C(33)	122.2(12)
C(19)-N(3)-C(14)	110.1(9)	C(34)-C(33)-C(32)	118.0(13)
C(19)-N(3)-C(15)	109.6(9)	C(33)-C(34)-C(35)	122.5(14)
C(14)-N(3)-C(15)	112.0(10)	C(34)-C(35)-C(36)	117.2(12)
C(19)-N(3)-Fe(1)	112.7(7)	C(31)-C(36)-C(35)	124.5(12)
C(14)-N(3)-Fe(1)	101.6(7)	C(42)-C(41)-C(46)	117.8(11)
C(15)-N(3)-Fe(1)	110.6(7)	C(42)-C(41)-C(2)	124.4(10)
C(27)-N(4)-C(21)	108.4(9)	C(46)-C(41)-C(2)	117.7(10)

C(41)-C(42)-C(43)	121.0(11)	C(83)-C(82)-C(81)	118.9(11)
C(44)-C(43)-C(42)	120.0(12)	C(84)-C(83)-C(82)	121.5(12)
C(45)-C(44)-C(43)	119.8(12)	C(83)-C(84)-C(85)	119.8(12)
C(44)-C(45)-C(46)	121.4(12)	C(84)-C(85)-C(86)	120.5(12)
C(45)-C(46)-C(41)	120.1(11)	C(81)-C(86)-C(85)	120.8(11)
C(52)-C(51)-C(56)	118.6(11)	O(7)-S(1)-O(6)	114.9(8)
C(52)-C(51)-C(2)	124.3(11)	O(7)-S(1)-O(8)	116.3(6)
C(56)-C(51)-C(2)	117.1(10)	O(6)-S(1)-O(8)	114.1(6)
C(51)-C(52)-C(53)	118.5(12)	O(7)-S(1)-C(1S)	103.7(9)
C(54)-C(53)-C(52)	119.5(13)	O(6)-S(1)-C(1S)	103.0(9)
C(55)-C(54)-C(53)	121.7(14)	O(8)-S(1)-C(1S)	102.2(7)
C(54)-C(55)-C(56)	121.4(13)	F(1)-C(1S)-F(3)	109.7(18)
C(55)-C(56)-C(51)	120.2(11)	F(1)-C(1S)-F(2)	103.7(18)
C(66)-C(61)-C(62)	118.7(10)	F(3)-C(1S)-F(2)	106.4(17)
C(66)-C(61)-C(4)	118.6(9)	F(1)-C(1S)-S(1)	117.0(16)
C(62)-C(61)-C(4)	122.7(10)	F(3)-C(1S)-S(1)	111.4(14)
C(61)-C(62)-C(63)	120.3(11)	F(2)-C(1S)-S(1)	107.8(13)
C(62)-C(63)-C(64)	119.2(12)	O(9)-S(2)-O(11)	114.8(6)
C(65)-C(64)-C(63)	120.3(12)	O(9)-S(2)-O(10)	115.5(5)
C(64)-C(65)-C(66)	120.0(12)	O(11)-S(2)-O(10)	115.6(5)
C(65)-C(66)-C(61)	121.4(11)	O(9)-S(2)-C(2S)	101.2(6)
C(72)-C(71)-C(76)	119.2(12)	O(11)-S(2)-C(2S)	103.9(7)
C(72)-C(71)-C(4)	123.2(11)	O(10)-S(2)-C(2S)	103.0(7)
C(76)-C(71)-C(4)	117.5(10)	F(5)-C(2S)-F(6)	109.6(13)
C(71)-C(72)-C(73)	119.4(12)	F(5)-C(2S)-F(4)	106.7(12)
C(74)-C(73)-C(72)	118.8(13)	F(6)-C(2S)-F(4)	105.8(13)
C(73)-C(74)-C(75)	122.7(15)	F(5)-C(2S)-S(2)	112.6(11)
C(74)-C(75)-C(76)	120.4(14)	F(6)-C(2S)-S(2)	113.1(10)
C(71)-C(76)-C(75)	119.4(12)	F(4)-C(2S)-S(2)	108.5(11)
C(86)-C(81)-C(82)	118.5(10)	O(1S)-C(2S)-C(1S)	103.5(13)
C(86)-C(81)-C(4)	120.5(10)	C(2S)-O(1S)-C(3S)	116.1(16)
C(82)-C(81)-C(4)	120.9(10)	C(4S)-C(3S)-O(1S)	116.8(22)

Table S-14. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **3-Ph-OTf**.

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	31(1)	20(1)	34(1)	-1(1)	6(1)	0(1)
Fe(2)	32(1)	21(1)	34(1)	0(1)	9(1)	-3(1)
O(1)	25(5)	24(4)	38(4)	2(4)	14(4)	0(4)
O(2)	33(5)	18(5)	45(5)	-1(4)	0(4)	1(4)
O(3)	33(5)	24(5)	36(5)	7(4)	11(4)	-2(4)
O(4)	26(5)	21(5)	34(5)	-9(4)	-1(4)	-3(4)
O(5)	37(5)	16(5)	32(5)	-2(4)	6(4)	-10(4)
N(1)	34(7)	21(6)	28(6)	1(5)	8(5)	7(5)
N(2)	36(7)	20(5)	38(6)	-1(5)	1(5)	10(5)
N(3)	37(7)	24(6)	48(7)	0(5)	13(6)	-6(5)
N(4)	32(7)	30(6)	31(6)	8(5)	8(5)	5(5)
N(6)	31(6)	19(6)	39(6)	7(5)	0(5)	-8(5)
N(5)	43(7)	22(6)	30(5)	-2(5)	13(5)	8(5)
C(1)	37(8)	31(8)	21(7)	-5(7)	8(6)	-5(7)
C(2)	58(9)	13(6)	30(7)	6(5)	13(7)	2(6)
C(3)	21(8)	33(9)	27(7)	-5(7)	-4(6)	3(7)
C(4)	43(8)	23(7)	36(7)	11(6)	19(6)	-20(6)
C(11)	56(10)	45(9)	62(9)	-13(8)	29(8)	-11(8)
C(12)	66(10)	49(9)	42(8)	-19(7)	20(8)	-3(8)
C(13)	45(9)	51(9)	53(9)	4(8)	25(8)	14(8)
C(14)	41(10)	48(9)	77(11)	5(8)	21(9)	8(7)
C(15)	60(11)	28(8)	63(9)	10(7)	3(8)	7(8)
C(16)	48(10)	30(8)	74(10)	8(8)	14(9)	-9(7)
C(17)	35(10)	41(8)	47(8)	-19(7)	1(7)	-4(7)
C(18)	48(9)	34(8)	43(8)	8(7)	15(7)	-10(7)
C(19)	56(9)	26(7)	49(8)	8(7)	12(7)	4(7)
C(26)	46(9)	37(8)	57(9)	-7(8)	7(8)	6(8)
C(23)	59(10)	28(8)	44(8)	-1(7)	23(8)	-12(7)
C(24)	23(8)	35(8)	51(9)	17(7)	2(7)	-10(6)
C(22)	71(11)	23(8)	56(9)	12(7)	27(8)	10(7)
C(25)	46(9)	31(7)	44(8)	-14(7)	9(7)	5(7)
C(21)	50(10)	21(7)	71(10)	14(7)	24(8)	2(7)
C(27)	43(10)	19(7)	68(9)	-6(7)	18(7)	1(7)
C(29)	50(9)	30(7)	37(7)	2(7)	16(7)	-8(7)
S(1)	64(3)	33(2)	50(2)	-2(2)	7(2)	-1(2)
O(6)	55(8)	78(8)	149(11)	-20(8)	9(7)	19(6)
O(7)	205(13)	34(6)	162(12)	6(7)	116(11)	-36(8)
O(8)	82(7)	29(5)	68(6)	-18(5)	24(5)	2(5)
C(1S)	114(18)	55(12)	109(16)	-5(12)	27(15)	-2(13)
F(1)	90(8)	179(13)	158(11)	-82(9)	-48(8)	52(9)
F(2)	222(14)	127(10)	90(8)	5(7)	36(9)	26(10)
F(3)	179(11)	98(8)	86(7)	-40(6)	-12(7)	49(8)
S(2)	47(3)	43(2)	58(2)	-7(2)	16(2)	-3(2)
O(9)	64(6)	27(5)	83(7)	-4(5)	20(5)	-1(5)
O(10)	53(6)	57(6)	105(8)	-32(6)	35(6)	13(5)
O(11)	41(6)	83(7)	55(6)	-4(5)	-3(5)	-14(5)
C(2S)	73(13)	39(10)	69(11)	0(9)	4(11)	0(10)
F(4)	73(6)	57(6)	124(7)	30(5)	21(5)	5(5)
F(5)	82(7)	148(9)	60(6)	26(6)	-15(5)	-22(6)
F(6)	80(7)	97(7)	77(6)	-4(5)	44(5)	1(6)
C(1S)	99(15)	136(17)	47(10)	5(11)	9(10)	-61(14)
C(2S)	87(14)	78(13)	104(14)	54(11)	12(12)	-54(13)

O(1S)	150(13)	90(9)	123(10)	39(8)	53(9)	39(10)
C(3S)	174(24)	176(25)	135(19)	35(18)	69(19)	133(22)
C(4S)	127(23)	262(37)	302(39)	30(29)	88(24)	-109(24)

*The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$$

Table S-15. Calculated Hydrogen Atom Coordinates ($\times 10^4$) and Temperature ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **3-Ph-OTf**.

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	7041(9)	10005(8)	2160(5)	63
H(11B)	7892(9)	9813(8)	2591(5)	63
H(12A)	6578(8)	9397(8)	2778(4)	61
H(12B)	7298(8)	8646(8)	2874(4)	61
H(13A)	5705(8)	9511(8)	1964(4)	57
H(13B)	5049(8)	8767(8)	2039(4)	57
H(14A)	5056(8)	9030(9)	1202(5)	65
H(14B)	5157(8)	8021(9)	1369(5)	65
H(15A)	6591(8)	9594(8)	896(5)	64
H(15B)	6343(8)	9865(8)	1393(5)	64
H(16A)	7755(8)	10045(8)	1556(5)	61
H(16B)	7883(8)	9126(8)	1307(5)	61
H(17A)	8923(7)	8562(8)	1960(4)	64
H(17B)	8844(7)	8635(8)	2517(4)	64
H(17C)	8959(7)	9507(8)	2219(4)	64
H(18A)	6401(7)	7453(8)	2794(4)	61
H(18B)	5549(7)	7361(8)	2350(4)	61
H(18C)	5612(7)	8107(8)	2762(4)	61
H(19A)	6613(8)	8098(7)	666(4)	66
H(19B)	5660(8)	8489(7)	528(4)	66
H(19C)	5849(8)	7540(7)	782(4)	66
H(26A)	7153(8)	3417(8)	1110(4)	57
H(26B)	6425(8)	3380(8)	1402(4)	57
H(23A)	5153(8)	5648(8)	1929(4)	50
H(23B)	4969(8)	4665(8)	2082(4)	50
H(24A)	5238(7)	4078(8)	1388(4)	46
H(24B)	4643(7)	4915(8)	1198(4)	46
H(22A)	6061(9)	3622(7)	2067(5)	57
H(22B)	6536(9)	3817(7)	2635(5)	57
H(25A)	5832(8)	4082(8)	678(4)	49
H(25B)	6650(8)	4706(8)	738(4)	49
H(21A)	7810(8)	4114(8)	2452(5)	55
H(21B)	7465(8)	3213(8)	2172(5)	55
H(27A)	8313(8)	4466(7)	1351(5)	64
H(27B)	8458(8)	3586(7)	1677(5)	64
H(27C)	8656(8)	4525(7)	1941(5)	64
H(29A)	5896(7)	6003(7)	642(4)	57
H(29B)	5239(7)	6238(7)	963(4)	57
H(29C)	4999(7)	5495(7)	543(4)	57
H(28A)	6923(8)	5298(8)	2910(4)	67
H(28B)	5952(8)	5040(8)	2882(4)	67
H(28C)	6165(8)	5971(8)	2673(4)	67
H(32A)	9660(8)	7879(8)	3594(4)	52
H(33A)	9234(9)	8961(9)	4087(5)	72
H(34A)	7878(8)	8884(9)	4204(5)	67
H(35A)	6944(8)	7743(8)	3869(4)	57
H(36A)	7414(7)	6657(8)	3420(4)	46
H(42A)	9505(7)	6939(7)	2367(4)	45
H(43A)	10935(8)	7033(8)	2329(5)	56
H(44A)	12039(8)	6804(7)	3036(4)	47
H(45A)	11737(8)	6429(8)	3761(4)	52

H(46A)	10331(7)	6271(7)	3806(4)	48
H(52A)	8311(7)	5723(8)	3917(4)	52
H(53A)	8279(8)	4195(9)	4153(5)	75
H(54A)	8782(8)	3128(9)	3717(5)	63
H(55A)	9309(7)	3474(8)	3076(4)	51
H(56A)	9407(7)	4930(7)	2840(4)	46
H(62A)	7585(7)	7546(8)	-127(4)	50
H(63A)	7632(8)	9034(8)	-349(5)	60
H(64A)	8546(7)	10006(8)	198(4)	55
H(65A)	9365(7)	9507(8)	954(4)	48
H(66A)	9292(7)	8046(7)	1176(4)	44
H(72A)	9155(8)	5894(8)	1619(4)	54
H(73A)	10598(9)	5387(9)	1901(5)	76
H(74A)	11484(9)	5525(9)	1400(5)	77
H(75A)	11075(9)	6220(9)	661(5)	79
H(76A)	9669(8)	6720(8)	358(5)	61
H(82A)	8789(7)	5122(7)	408(4)	43
H(83A)	7946(8)	4134(8)	-163(4)	52
H(84A)	6560(8)	4472(8)	-575(4)	54
H(85A)	5955(8)	5788(8)	-413(4)	49
H(86A)	6746(7)	6774(8)	166(4)	47
H(1SA)	10288(12)	2018(12)	177(5)	144
H(1SB)	9646(12)	1335(12)	-169(5)	144
H(1SC)	9899(12)	1218(12)	420(5)	144
H(2SA)	9140(12)	2540(11)	498(6)	110
H(2SB)	8886(12)	2657(11)	-96(6)	110
H(3SA)	7480(16)	2322(16)	390(8)	187
H(3SB)	7333(16)	2397(16)	-195(8)	187
H(4SA)	6247(15)	1715(19)	-10(11)	336
H(4SB)	6881(15)	982(19)	296(11)	336
H(4SC)	6734(15)	1057(19)	-291(11)	336

Table S-16 . Crystal data and structure refinement for **1-Ph-BPh₄**.

Empirical formula	C ₈₄ H ₉₆ B Fe ₂ N ₇ O ₅
Formula weight	1406.19
Temperature	173(2) K
Wavelength	Cu K α 1.54178 Å
Crystal system	Orthorhombic
Space group, Z	P _{bca} , 8
Unit cell dimensions	$a = 20.4177(2)$ Å $b = 19.2789(14)$ Å $c = 37.6063(2)$ Å
Volume	14803.0(18) Å ³
Color	colorless
Density (calculated)	1.262 g/cm ³
Absorption coefficient	3.588 mm ⁻¹
F(000)	5968
Crystal size	0.20 x 0.40 x 0.40 mm
2 θ range for data collection	2 to 97°
Limiting indices	$-1 \leq h \leq 19$, $-1 \leq k \leq 18$, $-36 \leq l \leq 1$
Reflections collected	8506
Independent reflections	7091 [$R_{\text{int}} = 0.0589$]
Absorption correction	Semi-empirical from psi-scans
Max. and min. transmission	0.0977 and 0.0255
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	7056 / 0 / 577
Goodness-of-fit on F ²	1.021
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0816$, $wR_2 = 0.2153$
R indices (all data)	$R_1 = 0.1226$, $wR_2 = 0.3213$
Largest diff. peak and hole	0.535 and -0.360 e.Å ⁻³

Table S-17. Refined Atom Coordinates ($\times 10^4$) and Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **1-Ph-BPh₄**

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	9165(1)	5844(1)	3906(1)	48(1)
Fe(2)	10264(1)	7033(1)	3589(1)	47(1)
N(1)	8338(4)	5098(4)	3831(2)	66(2)
N(2)	8598(5)	5947(4)	4428(2)	74(2)
N(3)	9530(4)	4916(4)	4214(2)	59(2)
N(4)	10634(3)	7819(4)	3185(2)	57(2)
N(5)	11368(4)	6831(4)	3591(2)	60(2)
N(6)	10625(4)	7899(4)	3948(2)	58(2)
O(1)	9966(4)	6425(4)	3989(2)	58(2)
O(2)	9524(3)	5479(3)	3413(2)	57(2)
O(3)	10142(3)	6301(3)	3166(2)	54(2)
O(4)	8596(3)	6655(3)	3679(2)	56(2)
O(5)	9322(3)	7471(3)	3531(2)	53(2)
C(1)	7830(6)	5209(10)	4099(3)	123(6)
C(2)	7917(8)	5709(7)	4328(6)	166(9)
C(3)	8892(13)	5498(8)	4682(3)	176(10)
C(4)	9416(6)	5087(8)	4590(3)	101(4)
C(5)	9155(5)	4315(6)	4096(4)	96(4)
C(6)	8667(8)	4417(6)	3870(4)	140(7)
C(7)	8042(5)	5139(5)	3474(2)	65(3)
C(8)	8591(5)	6673(5)	4549(3)	71(3)
C(9)	10233(4)	4790(5)	4147(3)	65(3)
C(10)	11205(4)	7471(5)	3029(3)	65(3)
C(11)	11690(5)	7238(5)	3299(3)	71(3)
C(12)	11557(5)	7091(5)	3949(3)	66(3)
C(13)	11337(5)	7809(5)	4027(3)	66(3)
C(14)	10487(5)	8528(5)	3722(3)	66(3)
C(15)	10789(5)	8482(5)	3367(3)	70(3)
C(16)	10140(5)	7942(5)	2903(3)	71(3)
C(17)	11505(5)	6096(5)	3553(3)	76(3)
C(18)	10250(5)	7955(5)	4278(3)	71(3)
C(19)	9872(4)	5721(5)	3167(2)	47(2)
C(20)	9933(4)	5231(4)	2830(2)	46(2)
C(21)	10581(4)	5369(4)	2637(2)	49(2)
C(22)	10670(4)	6016(5)	2479(2)	55(2)
C(23)	11234(5)	6174(5)	2286(3)	69(3)
C(24)	11714(5)	5677(5)	2254(3)	76(3)
C(25)	11638(5)	5035(5)	2399(3)	73(3)
C(26)	11072(4)	4878(5)	2589(2)	62(2)
C(27)	9377(4)	5412(4)	2569(2)	53(2)
C(28)	9426(5)	5168(5)	2219(3)	66(3)
C(29)	8930(5)	5307(5)	1973(3)	77(3)
C(30)	8396(5)	5678(5)	2068(3)	83(3)
C(31)	8349(5)	5937(6)	2415(3)	78(3)
C(32)	8841(4)	5792(5)	2656(3)	63(3)
C(33)	9862(4)	4480(4)	2964(2)	51(2)
C(34)	9341(4)	4062(4)	2873(2)	56(2)
C(35)	9266(5)	3398(5)	3011(2)	63(3)
C(36)	9720(4)	3145(5)	3244(3)	63(3)
C(37)	10238(4)	3530(5)	3343(2)	60(2)
C(38)	10303(4)	4218(4)	3207(2)	56(2)
C(39)	8740(4)	7253(4)	3574(2)	45(2)
C(40)	8185(4)	7780(4)	3498(2)	50(2)

C(41)	7538(4)	7518(4)	3650(2)	50(2)
C(42)	7200(4)	7810(4)	3931(2)	51(2)
C(43)	6609(4)	7537(5)	4052(3)	60(2)
C(44)	6344(4)	6960(4)	3884(2)	55(2)
C(45)	6674(4)	6670(5)	3606(2)	61(3)
C(46)	7248(4)	6954(4)	3487(2)	55(2)
C(47)	8096(4)	7873(4)	3092(2)	51(2)
C(48)	7572(4)	8269(4)	2975(2)	55(2)
C(49)	7461(5)	8390(5)	2616(2)	63(3)
C(50)	7884(5)	8106(5)	2370(3)	72(3)
C(51)	8407(5)	7686(5)	2482(3)	66(3)
C(52)	8503(4)	7575(5)	2842(2)	58(2)
C(53)	8435(4)	8472(4)	3660(2)	49(2)
C(54)	8607(4)	9049(4)	3456(2)	51(2)
C(55)	8849(5)	9642(5)	3610(2)	64(3)
C(56)	8922(4)	9698(5)	3966(2)	60(2)
C(57)	8789(4)	9133(4)	4177(3)	59(2)
C(58)	8538(4)	8531(5)	4027(2)	56(2)
B	6982(5)	4941(5)	5565(3)	54(3)
C(1B)	6576(4)	5417(5)	5273(2)	58(2)
C(2B)	6747(5)	6093(5)	5179(3)	65(3)
C(3B)	6409(5)	6468(6)	4920(3)	82(3)
C(4B)	5892(5)	6192(5)	4753(3)	76(3)
C(5B)	5694(5)	5530(5)	4830(3)	73(3)
C(6B)	6034(5)	5163(5)	5090(2)	64(3)
C(7B)	7528(4)	4475(4)	5339(2)	51(2)
C(8B)	7328(5)	4064(5)	5046(2)	63(3)
C(9B)	7748(5)	3603(5)	4880(3)	68(3)
C(10B)	8384(4)	3542(5)	4982(2)	60(2)
C(11B)	8607(5)	3951(5)	5251(2)	59(2)
C(12B)	8180(4)	4399(4)	5426(2)	56(2)
C(13B)	6505(4)	4402(4)	5775(2)	52(2)
C(14B)	6737(5)	3770(5)	5903(2)	60(2)
C(15B)	6364(5)	3325(5)	6108(3)	74(3)
C(16B)	5736(5)	3500(5)	6194(3)	71(3)
C(17B)	5489(5)	4117(5)	6078(3)	69(3)
C(18B)	5867(4)	4552(5)	5874(2)	56(2)
C(19B)	7373(4)	5433(4)	5855(2)	51(2)
C(20B)	7880(5)	5873(5)	5767(3)	67(3)
C(21B)	8199(5)	6289(5)	6016(3)	74(3)
C(22B)	8034(5)	6275(5)	6371(3)	68(3)
C(23B)	7541(5)	5813(5)	6475(3)	65(3)
C(24B)	7216(4)	5422(5)	6221(2)	55(2)
N(7)	4934(7)	8089(8)	4720(4)	151(5)
C(1N)	4623(6)	7611(7)	4753(4)	96(4)
C(2N)	4257(6)	6991(6)	4792(3)	98(4)

* $U_{(eq)}$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S-18 . Bond lengths [Å] and Angles [deg] for **1-Ph-BPh₄**.

Fe(1)-O(1)	2.007(8)	C(31)-C(32)	1.382(13)
Fe(1)-O(2)	2.115(6)	C(33)-C(38)	1.377(12)
Fe(1)-O(4)	2.127(6)	C(33)-C(34)	1.379(12)
Fe(1)-N(1)	2.236(8)	C(34)-C(35)	1.391(12)
Fe(1)-N(3)	2.256(7)	C(35)-C(36)	1.365(13)
Fe(1)-N(2)	2.286(8)	C(36)-C(37)	1.346(12)
Fe(1)-Fe(2)	3.424(2)	C(37)-C(38)	1.428(12)
Fe(2)-O(1)	2.002(7)	C(39)-C(40)	1.550(12)
Fe(2)-O(5)	2.112(6)	C(40)-C(41)	1.526(12)
Fe(2)-O(3)	2.141(6)	C(40)-C(47)	1.549(12)
Fe(2)-N(6)	2.269(7)	C(40)-C(53)	1.553(12)
Fe(2)-N(4)	2.272(7)	C(41)-C(42)	1.383(11)
Fe(2)-N(5)	2.288(8)	C(41)-C(46)	1.380(12)
N(1)-C(1)	1.46(2)	C(42)-C(43)	1.394(12)
N(1)-C(7)	1.475(11)	C(43)-C(44)	1.389(12)
N(1)-C(6)	1.482(14)	C(44)-C(45)	1.365(12)
N(2)-C(3)	1.42(2)	C(45)-C(46)	1.368(12)
N(2)-C(8)	1.472(11)	C(47)-C(52)	1.378(12)
N(2)-C(2)	1.51(2)	C(47)-C(48)	1.385(11)
N(3)-C(5)	1.458(12)	C(48)-C(49)	1.390(12)
N(3)-C(4)	1.472(14)	C(49)-C(50)	1.379(13)
N(3)-C(9)	1.479(11)	C(50)-C(51)	1.404(13)
N(4)-C(10)	1.468(11)	C(51)-C(52)	1.386(12)
N(4)-C(15)	1.485(11)	C(53)-C(54)	1.397(11)
N(4)-C(16)	1.483(11)	C(53)-C(58)	1.402(12)
N(5)-C(17)	1.451(12)	C(54)-C(55)	1.374(12)
N(5)-C(12)	1.488(11)	C(55)-C(56)	1.350(12)
N(5)-C(11)	1.502(12)	C(56)-C(57)	1.375(12)
N(6)-C(18)	1.462(12)	C(57)-C(58)	1.389(12)
N(6)-C(13)	1.494(11)	B-C(13B)	1.629(13)
N(6)-C(14)	1.506(11)	B-C(19B)	1.653(13)
O(2)-C(19)	1.256(10)	B-C(1B)	1.652(14)
O(3)-C(19)	1.247(10)	B-C(7B)	1.664(13)
O(4)-C(39)	1.253(10)	C(1B)-C(6B)	1.392(12)
O(5)-C(39)	1.272(10)	C(1B)-C(2B)	1.394(12)
C(1)-C(2)	1.30(2)	C(2B)-C(3B)	1.397(14)
C(3)-C(4)	1.37(2)	C(3B)-C(4B)	1.337(14)
C(5)-C(6)	1.32(2)	C(4B)-C(5B)	1.370(14)
C(10)-C(11)	1.489(13)	C(5B)-C(6B)	1.392(13)
C(12)-C(13)	1.485(13)	C(7B)-C(12B)	1.377(12)
C(14)-C(15)	1.474(14)	C(7B)-C(8B)	1.418(12)
C(19)-C(20)	1.583(12)	C(8B)-C(9B)	1.384(12)
C(20)-C(21)	1.534(12)	C(9B)-C(10B)	1.358(12)
C(20)-C(27)	1.542(12)	C(10B)-C(11B)	1.361(12)
C(20)-C(33)	1.540(12)	C(11B)-C(12B)	1.392(12)
C(21)-C(26)	1.390(12)	C(13B)-C(18B)	1.385(12)
C(21)-C(22)	1.394(12)	C(13B)-C(14B)	1.392(12)
C(22)-C(23)	1.395(13)	C(14B)-C(15B)	1.381(13)
C(23)-C(24)	1.376(13)	C(15B)-C(16B)	1.364(13)
C(24)-C(25)	1.363(13)	C(16B)-C(17B)	1.364(13)
C(25)-C(26)	1.391(13)	C(17B)-C(18B)	1.372(13)
C(27)-C(32)	1.357(12)	C(19B)-C(20B)	1.379(12)
C(27)-C(28)	1.400(12)	C(19B)-C(24B)	1.412(12)
C(28)-C(29)	1.398(13)	C(20B)-C(21B)	1.395(13)
C(29)-C(30)	1.352(14)	C(21B)-C(22B)	1.376(13)
C(30)-C(31)	1.40(2)	C(22B)-C(23B)	1.399(13)

C(23B)-C(24B)	1.389(12)	C(1N)-C(2N)	1.42(2)
N(7)-C(1N)	1.13(2)		
O(1)-Fe(1)-O(2)	92.2(3)	C(5)-N(3)-C(9)	109.1(8)
O(1)-Fe(1)-O(4)	95.5(3)	C(4)-N(3)-C(9)	110.7(7)
O(2)-Fe(1)-O(4)	94.6(2)	C(5)-N(3)-Fe(1)	107.5(6)
O(1)-Fe(1)-N(1)	173.9(3)	C(4)-N(3)-Fe(1)	105.2(7)
O(2)-Fe(1)-N(1)	86.4(3)	C(9)-N(3)-Fe(1)	111.3(5)
O(4)-Fe(1)-N(1)	90.5(2)	C(10)-N(4)-C(15)	114.1(7)
O(1)-Fe(1)-N(3)	95.4(3)	C(10)-N(4)-C(16)	108.9(7)
O(2)-Fe(1)-N(3)	94.1(2)	C(15)-N(4)-C(16)	109.7(7)
O(4)-Fe(1)-N(3)	165.7(2)	C(10)-N(4)-Fe(2)	103.2(5)
N(1)-Fe(1)-N(3)	78.7(3)	C(15)-N(4)-Fe(2)	109.7(6)
O(1)-Fe(1)-N(2)	103.3(3)	C(16)-N(4)-Fe(2)	111.0(5)
O(2)-Fe(1)-N(2)	163.2(3)	C(17)-N(5)-C(12)	111.6(8)
O(4)-Fe(1)-N(2)	90.2(3)	C(17)-N(5)-C(11)	110.6(8)
N(1)-Fe(1)-N(2)	77.4(3)	C(12)-N(5)-C(11)	111.9(7)
N(3)-Fe(1)-N(2)	78.3(3)	C(17)-N(5)-Fe(2)	110.9(6)
O(1)-Fe(1)-Fe(2)	31.3(2)	C(12)-N(5)-Fe(2)	101.7(5)
O(2)-Fe(1)-Fe(2)	71.9(2)	C(11)-N(5)-Fe(2)	109.8(6)
O(4)-Fe(1)-Fe(2)	74.1(2)	C(18)-N(6)-C(13)	110.4(7)
N(1)-Fe(1)-Fe(2)	151.9(2)	C(18)-N(6)-C(14)	108.7(7)
N(3)-Fe(1)-Fe(2)	119.6(2)	C(13)-N(6)-C(14)	112.8(7)
N(2)-Fe(1)-Fe(2)	124.9(2)	C(18)-N(6)-Fe(2)	112.9(5)
O(1)-Fe(2)-O(5)	92.0(3)	C(13)-N(6)-Fe(2)	110.4(5)
O(1)-Fe(2)-O(3)	97.9(3)	C(14)-N(6)-Fe(2)	101.4(5)
O(5)-Fe(2)-O(3)	94.7(2)	Fe(2)-O(1)-Fe(1)	117.3(4)
O(1)-Fe(2)-N(6)	94.7(3)	C(19)-O(2)-Fe(1)	136.0(5)
O(5)-Fe(2)-N(6)	93.6(2)	C(19)-O(3)-Fe(2)	129.8(5)
O(3)-Fe(2)-N(6)	164.7(2)	C(39)-O(4)-Fe(1)	132.4(5)
O(1)-Fe(2)-N(4)	173.1(3)	C(39)-O(5)-Fe(2)	134.8(5)
O(5)-Fe(2)-N(4)	88.1(2)	C(2)-C(1)-N(1)	117.9(13)
O(3)-Fe(2)-N(4)	89.0(2)	C(1)-C(2)-N(2)	120.9(12)
N(6)-Fe(2)-N(4)	78.4(3)	C(4)-C(3)-N(2)	120.6(12)
O(1)-Fe(2)-N(5)	101.3(3)	C(3)-C(4)-N(3)	119.7(10)
O(5)-Fe(2)-N(5)	165.0(2)	C(6)-C(5)-N(3)	118.1(10)
O(3)-Fe(2)-N(5)	90.3(2)	C(5)-C(6)-N(1)	122.5(11)
N(6)-Fe(2)-N(5)	78.6(3)	N(4)-C(10)-C(11)	113.1(8)
N(4)-Fe(2)-N(5)	77.8(3)	C(10)-C(11)-N(5)	111.5(8)
O(1)-Fe(2)-Fe(1)	31.4(2)	C(13)-C(12)-N(5)	114.4(8)
O(5)-Fe(2)-Fe(1)	73.0(2)	C(12)-C(13)-N(6)	111.3(8)
O(3)-Fe(2)-Fe(1)	75.0(2)	C(15)-C(14)-N(6)	112.5(8)
N(6)-Fe(2)-Fe(1)	119.9(2)	C(14)-C(15)-N(4)	112.3(8)
N(4)-Fe(2)-Fe(1)	153.8(2)	O(3)-C(19)-O(2)	125.8(8)
N(5)-Fe(2)-Fe(1)	122.0(2)	O(3)-C(19)-C(20)	119.8(8)
C(1)-N(1)-C(7)	109.2(8)	O(2)-C(19)-C(20)	114.4(7)
C(1)-N(1)-C(6)	112.7(11)	C(21)-C(20)-C(27)	107.1(7)
C(7)-N(1)-C(6)	108.8(9)	C(21)-C(20)-C(33)	113.4(7)
C(1)-N(1)-Fe(1)	110.8(8)	C(27)-C(20)-C(33)	110.6(7)
C(7)-N(1)-Fe(1)	113.0(6)	C(21)-C(20)-C(19)	110.1(7)
C(6)-N(1)-Fe(1)	102.4(7)	C(27)-C(20)-C(19)	108.5(6)
C(3)-N(2)-C(8)	112.1(10)	C(33)-C(20)-C(19)	107.0(7)
C(3)-N(2)-C(2)	111.7(14)	C(26)-C(21)-C(22)	117.4(8)
C(8)-N(2)-C(2)	110.9(9)	C(26)-C(21)-C(20)	124.5(7)
C(3)-N(2)-Fe(1)	108.1(8)	C(22)-C(21)-C(20)	117.9(7)
C(8)-N(2)-Fe(1)	110.7(6)	C(21)-C(22)-C(23)	121.6(9)
C(2)-N(2)-Fe(1)	103.0(9)	C(24)-C(23)-C(22)	118.8(10)
C(5)-N(3)-C(4)	112.9(9)	C(25)-C(24)-C(23)	121.0(10)

C(24)-C(25)-C(26)	120.0(10)	C(58)-C(53)-C(40)	120.4(7)
C(25)-C(26)-C(21)	121.1(9)	C(55)-C(54)-C(53)	121.4(8)
C(32)-C(27)-C(28)	117.8(8)	C(56)-C(55)-C(54)	121.6(9)
C(32)-C(27)-C(20)	124.2(8)	C(55)-C(56)-C(57)	119.2(9)
C(28)-C(27)-C(20)	118.1(8)	C(56)-C(57)-C(58)	120.0(9)
C(27)-C(28)-C(29)	120.4(9)	C(57)-C(58)-C(53)	121.5(8)
C(30)-C(29)-C(28)	120.7(11)	C(13B)-B-C(19B)	109.6(7)
C(29)-C(30)-C(31)	119.3(11)	C(13B)-B-C(1B)	112.2(8)
C(32)-C(31)-C(30)	119.4(10)	C(19B)-B-C(1B)	111.2(7)
C(27)-C(32)-C(31)	122.5(9)	C(13B)-B-C(7B)	107.7(7)
C(38)-C(33)-C(34)	117.1(8)	C(19B)-B-C(7B)	108.8(7)
C(38)-C(33)-C(20)	120.0(8)	C(1B)-B-C(7B)	107.3(7)
C(34)-C(33)-C(20)	122.7(8)	C(6B)-C(1B)-C(2B)	113.7(9)
C(33)-C(34)-C(35)	122.0(9)	C(6B)-C(1B)-B	122.0(8)
C(36)-C(35)-C(34)	119.6(9)	C(2B)-C(1B)-B	124.2(8)
C(37)-C(36)-C(35)	120.9(9)	C(1B)-C(2B)-C(3B)	122.5(10)
C(36)-C(37)-C(38)	119.1(9)	C(4B)-C(3B)-C(2B)	120.7(11)
C(33)-C(38)-C(37)	121.2(8)	C(3B)-C(4B)-C(5B)	120.4(11)
O(4)-C(39)-O(5)	124.4(8)	C(4B)-C(5B)-C(6B)	118.3(10)
O(4)-C(39)-C(40)	119.4(8)	C(5B)-C(6B)-C(1B)	124.4(9)
O(5)-C(39)-C(40)	116.2(7)	C(12B)-C(7B)-C(8B)	113.7(8)
C(41)-C(40)-C(47)	107.8(7)	C(12B)-C(7B)-B	125.8(8)
C(41)-C(40)-C(39)	110.2(7)	C(8B)-C(7B)-B	120.3(8)
C(47)-C(40)-C(39)	110.1(7)	C(9B)-C(8B)-C(7B)	122.0(9)
C(41)-C(40)-C(53)	115.0(7)	C(10B)-C(9B)-C(8B)	121.5(9)
C(47)-C(40)-C(53)	109.1(7)	C(11B)-C(10B)-C(9B)	118.5(9)
C(39)-C(40)-C(53)	104.5(6)	C(10B)-C(11B)-C(12B)	120.1(9)
C(42)-C(41)-C(46)	116.5(8)	C(7B)-C(12B)-C(11B)	124.1(9)
C(42)-C(41)-C(40)	125.6(8)	C(18B)-C(13B)-C(14B)	114.2(8)
C(46)-C(41)-C(40)	117.8(7)	C(18B)-C(13B)-B	124.0(8)
C(41)-C(42)-C(43)	121.8(8)	C(14B)-C(13B)-B	121.5(8)
C(44)-C(43)-C(42)	119.5(9)	C(15B)-C(14B)-C(13B)	123.2(9)
C(45)-C(44)-C(43)	119.0(9)	C(16B)-C(15B)-C(14B)	119.8(10)
C(44)-C(45)-C(46)	120.5(9)	C(17B)-C(16B)-C(15B)	119.1(10)
C(45)-C(46)-C(41)	122.6(9)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	120.2(10)
C(52)-C(47)-C(48)	118.7(8)	C(17B)-C(18B)-C(13B)	123.4(9)
C(52)-C(47)-C(40)	123.6(8)	C(20B)-C(19B)-C(24B)	114.5(8)
C(48)-C(47)-C(40)	117.7(7)	C(20B)-C(19B)-B	123.9(8)
C(47)-C(48)-C(49)	121.6(8)	C(24B)-C(19B)-B	121.6(8)
C(50)-C(49)-C(48)	119.0(9)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	122.9(9)
C(49)-C(50)-C(51)	120.2(10)	C(22B)-C(21B)-C(20B)	121.7(10)
C(52)-C(51)-C(50)	119.3(9)	C(21B)-C(22B)-C(23B)	117.5(10)
C(47)-C(52)-C(51)	121.1(9)	C(24B)-C(23B)-C(22B)	119.7(9)
C(54)-C(53)-C(58)	116.1(8)	C(23B)-C(24B)-C(19B)	123.7(9)
C(54)-C(53)-C(40)	123.4(7)	N(7)-C(1N)-C(2N)	177(2)

Table S-19. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **1-Ph-BPh₄**.

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	55(1)	45(1)	44(1)	3(1)	2(1)	-2(1)
Fe(2)	52(1)	44(1)	45(1)	2(1)	1(1)	-3(1)
N(1)	63(5)	58(5)	76(6)	17(4)	-8(5)	0(4)
N(2)	100(7)	58(5)	65(5)	4(5)	29(5)	9(5)
N(3)	66(5)	63(5)	48(5)	7(4)	-5(4)	-10(4)
N(4)	51(5)	59(5)	61(5)	12(4)	-3(4)	-5(4)
N(5)	69(5)	48(5)	63(5)	0(4)	8(4)	2(4)
N(6)	58(5)	56(5)	59(5)	-8(4)	1(4)	-2(4)
O(1)	66(5)	57(4)	51(5)	15(4)	-5(4)	7(3)
O(2)	77(4)	44(3)	50(4)	-9(3)	5(3)	-2(3)
O(3)	69(4)	41(3)	53(4)	0(3)	4(3)	-8(3)
O(4)	60(4)	42(3)	67(4)	5(3)	1(3)	-2(3)
O(5)	65(4)	37(3)	57(4)	4(3)	-4(3)	5(3)
C(1)	70(8)	237(20)	63(8)	41(10)	2(7)	-7(11)
C(2)	109(12)	96(11)	293(25)	-74(14)	126(15)	-41(9)
C(3)	369(30)	103(11)	57(8)	12(8)	22(13)	106(15)
C(4)	69(7)	176(14)	58(8)	39(8)	3(6)	15(8)
C(5)	59(7)	66(7)	162(13)	-9(8)	-18(8)	-9(6)
C(6)	180(15)	47(7)	192(16)	24(8)	-131(13)	-20(8)
C(7)	57(6)	68(6)	69(7)	-1(5)	-7(5)	0(5)
C(8)	99(8)	58(6)	58(6)	2(5)	9(6)	6(6)
C(9)	58(6)	64(6)	74(7)	1(5)	-9(5)	3(5)
C(10)	58(6)	73(6)	64(6)	13(5)	-1(5)	-3(5)
C(11)	65(6)	71(7)	78(7)	-4(6)	11(6)	-11(5)
C(12)	55(6)	79(7)	63(7)	2(6)	-11(5)	4(5)
C(13)	59(6)	70(7)	70(7)	-5(5)	-5(5)	0(5)
C(14)	83(7)	45(6)	70(7)	11(5)	-3(6)	-8(5)
C(15)	68(7)	47(6)	94(8)	9(6)	-14(6)	-10(5)
C(16)	72(7)	79(7)	60(6)	21(5)	-3(5)	-8(6)
C(17)	59(6)	71(7)	99(8)	0(6)	6(6)	11(5)
C(18)	73(7)	77(7)	62(7)	-15(5)	-4(5)	-12(6)
B	65(7)	43(6)	56(6)	-5(5)	1(6)	-3(5)
N(7)	119(10)	144(12)	190(14)	38(11)	4(10)	-30(9)
C(1N)	78(8)	90(9)	120(11)	5(8)	6(7)	-16(8)
C(2N)	108(9)	89(8)	97(9)	-27(7)	-2(7)	-31(8)

*The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

Table S-20. Calculated Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **1-Ph-BPh₄**

	x	y	z	U _(eq)
H(1)	10122(36)	6330(40)	4123(20)	12(26)
H(1A)	7413(6)	5298(10)	3972(3)	148
H(1B)	7776(6)	4772(10)	4233(3)	148
H(2A)	7695(8)	5568(7)	4550(6)	200
H(2B)	7679(8)	6119(7)	4236(6)	200
H(3A)	9033(13)	5789(8)	4885(3)	212
H(3B)	8544(13)	5186(8)	4772(3)	212
H(4A)	9371(6)	4645(8)	4721(3)	121
H(4B)	9816(6)	5317(8)	4680(3)	121
H(5A)	9464(5)	3984(6)	3984(4)	115
H(5B)	8973(5)	4085(6)	4309(4)	115
H(6A)	8323(8)	4076(6)	3931(4)	168
H(6B)	8833(8)	4289(6)	3631(4)	168
H(7A)	8381(5)	5064(5)	3294(2)	97
H(7B)	7845(5)	5597(5)	3441(2)	97
H(7C)	7703(5)	4781(5)	3451(2)	97
H(8A)	8385(5)	6965(5)	4367(3)	107
H(8B)	9041(5)	6831(5)	4590(3)	107
H(8C)	8341(5)	6708(5)	4771(3)	107
H(9A)	10488(4)	5192(5)	4226(3)	98
H(9B)	10304(4)	4716(5)	3892(3)	98
H(9C)	10374(4)	4377(5)	4279(3)	98
H(10A)	11422(4)	7793(5)	2861(3)	78
H(10B)	11054(4)	7064(5)	2891(3)	78
H(11A)	11912(5)	7648(5)	3402(3)	85
H(11B)	12026(5)	6946(5)	3182(3)	85
H(12A)	11371(5)	6776(5)	4131(3)	79
H(12B)	12040(5)	7072(5)	3971(3)	79
H(13A)	11594(5)	8140(5)	3882(3)	80
H(13B)	11418(5)	7916(5)	4281(3)	80
H(14A)	10007(5)	8581(5)	3695(3)	79
H(14B)	10654(5)	8945(5)	3846(3)	79
H(15A)	11270(5)	8527(5)	3391(3)	84
H(15B)	10632(5)	8873(5)	3219(3)	84
H(16A)	9758(5)	8174(5)	3006(3)	106
H(16B)	10006(5)	7497(5)	2800(3)	106
H(16C)	10331(5)	8235(5)	2717(3)	106
H(17A)	11375(5)	5942(5)	3315(3)	114
H(17B)	11258(5)	5835(5)	3732(3)	114
H(17C)	11975(5)	6014(5)	3586(3)	114
H(18A)	9785(5)	8013(5)	4221(3)	106
H(18B)	10405(5)	8356(5)	4414(3)	106
H(18C)	10310(5)	7532(5)	4419(3)	106
H(22A)	10339(4)	6359(5)	2504(2)	67
H(23A)	11285(5)	6616(5)	2178(3)	83
H(24A)	12105(5)	5783(5)	2128(3)	91
H(25A)	11971(5)	4695(5)	2372(3)	88
H(26A)	11020(4)	4427(5)	2687(2)	74
H(28A)	9798(5)	4906(5)	2149(3)	79
H(29A)	8969(5)	5140(5)	1736(3)	92
H(30A)	8055(5)	5762(5)	1901(3)	100

H(31A)	7982(5)	6208(6)	2484(3)	93
H(32A)	8803(4)	5966(5)	2892(3)	75
H(34A)	9023(4)	4232(4)	2710(2)	67
H(35A)	8901(5)	3121(5)	2944(2)	76
H(36A)	9669(4)	2690(5)	3337(3)	76
H(37A)	10557(4)	3347(5)	3501(2)	73
H(38A)	10656(4)	4500(4)	3285(2)	67
H(42A)	7377(4)	8208(4)	4046(2)	61
H(43A)	6389(4)	7744(5)	4248(3)	72
H(44A)	5940(4)	6769(4)	3962(2)	67
H(45A)	6504(4)	6267(5)	3493(2)	74
H(46A)	7455(4)	6756(4)	3285(2)	66
H(48A)	7282(4)	8464(4)	3146(2)	66
H(49A)	7100(5)	8663(5)	2541(2)	75
H(50A)	7821(5)	8194(5)	2124(3)	87
H(51A)	8692(5)	7480(5)	2312(3)	79
H(52A)	8855(4)	7289(5)	2919(2)	70
H(54A)	8555(4)	9031(4)	3205(2)	61
H(55A)	8968(5)	10022(5)	3463(2)	76
H(56A)	9064(4)	10122(5)	4069(2)	73
H(57A)	8868(4)	9156(4)	4426(3)	71
H(58A)	8435(4)	8150(5)	4177(2)	68
H(2BA)	7107(5)	6306(5)	5296(3)	78
H(3BA)	6548(5)	6924(6)	4861(3)	98
H(4BA)	5661(5)	6456(5)	4581(3)	91
H(5BA)	5333(5)	5326(5)	4710(3)	88
H(6BA)	5887(5)	4709(5)	5147(2)	77
H(8BA)	6891(5)	4106(5)	4961(2)	75
H(9BA)	7589(5)	3323(5)	4691(3)	81
H(10C)	8667(4)	3221(5)	4867(2)	72
H(11C)	9054(5)	3932(5)	5319(2)	71
H(12C)	8348(4)	4669(4)	5616(2)	67
H(14C)	7173(5)	3639(5)	5847(2)	72
H(15C)	6544(5)	2899(5)	6188(3)	89
H(16D)	5475(5)	3197(5)	6333(3)	85
H(17D)	5054(5)	4246(5)	6138(3)	83
H(18D)	5681(4)	4978(5)	5797(2)	67
H(20A)	8019(5)	5893(5)	5526(3)	80
H(21A)	8539(5)	6590(5)	5939(3)	89
H(22B)	8245(5)	6568(5)	6538(3)	82
H(23B)	7431(5)	5766(5)	6720(3)	79
H(24B)	6867(4)	5130(5)	6296(2)	66
H(2N1)	3808(13)	7104(6)	4864(22)	147
H(2N2)	4461(24)	6699(20)	4975(16)	147
H(2N3)	4249(36)	6740(23)	4566(7)	147

Table S-21 . Crystal data and structure refinement for **2-Ph-BPh₄**.

Empirical formula	C ₈₄ H ₉₅ B Fe ₂ N ₇ O ₅
Formula weight	1405.18
Temperature	296(2) K
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system	orthorhombic
Space group, Z	Pbca, 8
Unit cell dimensions	$a = 20.5573(9)$ Å $b = 19.3176(8)$ Å $c = 37.7437(14)$ Å
Volume	14988.7(11) Å ³
Color	dark green
Density (calculated)	1.245 g/cm ³
Absorption coefficient	3.543 mm ⁻¹
F(000)	5960
Crystal size	0.60 x 0.50 x 0.25 mm
2 θ range for data collection	2 to 113.5°
Limiting indices	$-1 \leq h \leq 22$, $-1 \leq k \leq 20$, $-40 \leq l \leq 1$
Reflections collected	11580
Independent reflections	9859 [$R_{\text{(int)}} = 0.0620$]
Max. and min. transmission	0.1007 and 0.0160
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	9856 / 0 / 893
Goodness-of-fit on F ²	1.022
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0716$, $wR_2 = 0.1729$
R indices (all data)	$R_1 = 0.1304$, $wR_2 = 0.2175$
Largest diff. peak and hole	0.617 and -0.272 e.Å ⁻³

Table S-22. Refined Atom Coordinates ($\times 10^4$) and Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **2-Ph-BPh₄**

	x	y	z	U _(eq)
Fe(1)	9195(1)	5885(1)	3894(1)	61(1)
Fe(2)	10221(1)	6968(1)	3612(1)	63(1)
N(1)	8323(3)	5135(3)	3845(2)	80(2)
N(2)	8669(3)	6009(3)	4417(2)	89(2)
N(3)	9540(3)	4953(3)	4193(2)	79(2)
N(4)	10621(3)	7780(3)	3219(2)	86(2)
N(5)	11305(3)	6765(3)	3607(2)	77(2)
N(6)	10587(3)	7811(3)	3976(2)	86(2)
O(1)	9924(2)	6399(2)	3969(1)	66(1)
O(2)	9462(2)	5467(2)	3405(1)	69(1)
O(3)	10103(2)	6277(2)	3168(1)	71(1)
O(4)	8594(2)	6649(2)	3665(1)	68(1)
O(5)	9320(2)	7458(2)	3516(1)	67(1)
C(1)	7842(4)	5409(8)	4107(3)	148(5)
C(2)	8033(7)	5708(7)	4405(4)	189(7)
C(3)	9088(9)	5650(6)	4672(3)	203(8)
C(4)	9427(4)	5093(7)	4572(2)	126(4)
C(5)	9170(5)	4363(4)	4059(4)	135(4)
C(6)	8569(6)	4447(4)	3938(4)	171(6)
C(7)	8041(4)	5132(4)	3488(2)	90(2)
C(8)	8622(4)	6744(4)	4517(2)	98(2)
C(9)	10244(3)	4847(4)	4132(2)	90(2)
C(10)	11225(5)	7469(6)	3077(3)	134(4)
C(11)	11625(4)	7123(5)	3320(3)	118(3)
C(12)	11511(4)	7012(5)	3955(3)	118(3)
C(13)	11257(4)	7651(6)	4077(3)	158(5)
C(14)	10532(6)	8457(4)	3758(3)	142(4)
C(15)	10735(6)	8429(4)	3410(3)	128(4)
C(16)	10179(4)	7918(4)	2921(2)	104(3)
C(17)	11431(4)	6001(4)	3581(3)	111(3)
C(18)	10171(4)	7876(4)	4290(2)	98(2)
C(19)	9825(3)	5700(3)	3164(2)	63(2)
C(20)	9902(3)	5217(3)	2834(2)	66(2)
C(21)	10546(4)	5368(4)	2638(2)	76(2)
C(22)	10630(4)	6007(4)	2482(2)	90(2)
C(23)	11188(5)	6177(5)	2302(2)	111(3)
C(24)	11670(5)	5701(6)	2267(2)	113(3)
C(25)	11607(4)	5052(5)	2414(2)	106(3)
C(26)	11045(4)	4891(4)	2596(2)	87(2)
C(27)	9348(3)	5384(4)	2571(2)	74(2)
C(28)	9401(4)	5126(4)	2228(2)	98(2)
C(29)	8913(6)	5242(5)	1984(2)	120(3)
C(30)	8383(5)	5633(5)	2067(3)	125(3)
C(31)	8324(4)	5883(5)	2409(2)	106(3)
C(32)	8808(4)	5764(4)	2658(2)	85(2)
C(33)	9844(3)	4464(3)	2967(2)	70(2)
C(34)	9325(4)	4045(3)	2875(2)	81(2)
C(35)	9285(4)	3374(4)	3015(2)	94(2)
C(36)	9739(4)	3129(4)	3244(2)	98(2)
C(37)	10255(4)	3539(4)	3342(2)	93(2)
C(38)	10298(4)	4207(4)	3208(2)	82(2)

C(39)	8746(3)	7245(3)	3562(2)	58(2)
C(40)	8198(3)	7775(3)	3480(2)	59(2)
C(41)	7545(3)	7517(3)	3627(2)	64(2)
C(42)	7208(3)	7810(3)	3909(2)	75(2)
C(43)	6620(4)	7556(4)	4022(2)	86(2)
C(44)	6361(4)	6979(4)	3864(2)	88(2)
C(45)	6676(4)	6675(4)	3584(2)	82(2)
C(46)	7253(3)	6941(3)	3470(2)	73(2)
C(47)	8110(3)	7848(3)	3073(2)	64(2)
C(48)	7590(3)	8242(3)	2955(2)	76(2)
C(49)	7491(4)	8356(4)	2599(2)	96(2)
C(50)	7907(5)	8068(5)	2362(2)	105(3)
C(51)	8420(4)	7670(4)	2473(2)	98(2)
C(52)	8517(4)	7569(4)	2828(2)	80(2)
C(53)	8432(3)	8469(3)	3640(2)	63(2)
C(54)	8614(3)	9030(3)	3427(2)	71(2)
C(55)	8856(4)	9634(4)	3580(2)	87(2)
C(56)	8921(4)	9694(4)	3939(2)	89(2)
C(57)	8761(3)	9133(4)	4152(2)	85(2)
C(58)	8530(3)	8530(3)	3999(2)	76(2)
B	6983(4)	4964(4)	5548(2)	67(2)
C(1B)	6563(4)	5433(4)	5266(2)	78(2)
C(2B)	6717(4)	6114(4)	5171(2)	96(2)
C(3B)	6389(6)	6470(5)	4909(3)	128(4)
C(4B)	5881(7)	6163(7)	4735(3)	137(4)
C(5B)	5698(5)	5501(6)	4818(2)	113(3)
C(6B)	6039(4)	5155(5)	5081(2)	98(2)
C(7B)	7514(3)	4491(3)	5325(2)	69(2)
C(8B)	7305(4)	4076(4)	5046(2)	95(2)
C(9B)	7714(5)	3621(4)	4872(2)	104(3)
C(10B)	8364(4)	3581(4)	4959(2)	89(2)
C(11B)	8585(4)	3987(4)	5223(2)	86(2)
C(12B)	8172(4)	4433(4)	5401(2)	80(2)
C(13B)	6511(3)	4438(3)	5772(2)	68(2)
C(14B)	6734(4)	3801(4)	5900(2)	90(2)
C(15B)	6376(5)	3375(4)	6116(3)	116(3)
C(16B)	5754(5)	3555(5)	6202(3)	111(3)
C(17B)	5522(4)	4165(5)	6083(2)	103(2)
C(18B)	5874(4)	4602(4)	5869(2)	83(2)
C(19B)	7361(3)	5458(3)	5842(2)	71(2)
C(20B)	7870(4)	5908(4)	5744(2)	94(2)
C(21B)	8193(4)	6328(4)	5984(3)	108(3)
C(22B)	8032(4)	6316(5)	6333(3)	114(3)
C(23B)	7542(4)	5874(4)	6448(2)	96(2)
C(24B)	7223(3)	5456(4)	6202(2)	77(2)
N(7)	4951(7)	8082(7)	4653(4)	227(6)
C(1N)	4641(6)	7619(6)	4700(3)	138(4)
C(2N)	4263(5)	7012(5)	4780(3)	148(4)

* $U_{(eq)}$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S-23. Bond lengths [Å] and Angles [deg] for **2-Ph-BPh₄**.

Fe(1)-O(1)	1.818(4)	C(31)-C(32)	1.388(10)
Fe(1)-O(2)	2.089(4)	C(33)-C(34)	1.384(9)
Fe(1)-O(4)	2.111(4)	C(33)-C(38)	1.395(9)
Fe(1)-N(3)	2.239(5)	C(34)-C(35)	1.402(10)
Fe(1)-N(2)	2.263(6)	C(35)-C(36)	1.357(11)
Fe(1)-N(1)	2.314(5)	C(36)-C(37)	1.375(10)
Fe(1)-Fe(2)	3.1554(13)	C(37)-C(38)	1.387(9)
Fe(2)-O(1)	1.844(4)	C(39)-C(40)	1.553(8)
Fe(2)-O(5)	2.109(4)	C(40)-C(41)	1.535(8)
Fe(2)-O(3)	2.154(4)	C(40)-C(53)	1.548(8)
Fe(2)-N(6)	2.259(6)	C(40)-C(47)	1.553(9)
Fe(2)-N(5)	2.263(6)	C(41)-C(42)	1.390(8)
Fe(2)-N(4)	2.309(6)	C(41)-C(46)	1.395(8)
N(1)-C(6)	1.465(10)	C(42)-C(43)	1.371(9)
N(1)-C(7)	1.467(9)	C(43)-C(44)	1.372(10)
N(1)-C(1)	1.494(12)	C(44)-C(45)	1.371(10)
N(2)-C(2)	1.431(13)	C(45)-C(46)	1.362(9)
N(2)-C(3)	1.466(13)	C(47)-C(52)	1.360(9)
N(2)-C(8)	1.474(9)	C(47)-C(48)	1.385(8)
N(3)-C(5)	1.461(10)	C(48)-C(49)	1.377(10)
N(3)-C(4)	1.474(10)	C(49)-C(50)	1.357(11)
N(3)-C(9)	1.481(8)	C(50)-C(51)	1.372(11)
N(4)-C(15)	1.465(11)	C(51)-C(52)	1.367(10)
N(4)-C(16)	1.473(9)	C(53)-C(58)	1.373(9)
N(4)-C(10)	1.479(10)	C(53)-C(54)	1.401(8)
N(5)-C(11)	1.445(10)	C(54)-C(55)	1.393(9)
N(5)-C(12)	1.458(10)	C(55)-C(56)	1.365(10)
N(5)-C(17)	1.502(9)	C(56)-C(57)	1.389(10)
N(6)-C(13)	1.463(10)	C(57)-C(58)	1.385(9)
N(6)-C(18)	1.468(9)	B-C(13B)	1.641(10)
N(6)-C(14)	1.499(11)	B-C(1B)	1.642(10)
O(2)-C(19)	1.261(7)	B-C(7B)	1.652(10)
O(3)-C(19)	1.252(7)	B-C(19B)	1.658(10)
O(4)-C(39)	1.253(7)	C(1B)-C(6B)	1.393(10)
O(5)-C(39)	1.262(7)	C(1B)-C(2B)	1.398(10)
C(1)-C(2)	1.326(14)	C(2B)-C(3B)	1.381(12)
C(3)-C(4)	1.335(13)	C(3B)-C(4B)	1.37(2)
C(5)-C(6)	1.327(11)	C(4B)-C(5B)	1.37(2)
C(10)-C(11)	1.403(12)	C(5B)-C(6B)	1.386(11)
C(12)-C(13)	1.418(12)	C(7B)-C(12B)	1.388(9)
C(14)-C(15)	1.379(13)	C(7B)-C(8B)	1.391(9)
C(19)-C(20)	1.566(8)	C(8B)-C(9B)	1.382(10)
C(20)-C(27)	1.542(9)	C(9B)-C(10B)	1.377(10)
C(20)-C(21)	1.543(9)	C(10B)-C(11B)	1.346(10)
C(20)-C(33)	1.544(9)	C(11B)-C(12B)	1.383(9)
C(21)-C(22)	1.380(9)	C(13B)-C(18B)	1.396(9)
C(21)-C(26)	1.388(9)	C(13B)-C(14B)	1.398(9)
C(22)-C(23)	1.373(11)	C(14B)-C(15B)	1.374(11)
C(23)-C(24)	1.359(12)	C(15B)-C(16B)	1.364(11)
C(24)-C(25)	1.377(11)	C(16B)-C(17B)	1.348(11)
C(25)-C(26)	1.381(10)	C(17B)-C(18B)	1.373(10)
C(27)-C(32)	1.370(9)	C(19B)-C(24B)	1.388(9)
C(27)-C(28)	1.394(9)	C(19B)-C(20B)	1.409(10)
C(28)-C(29)	1.381(11)	C(20B)-C(21B)	1.384(10)
C(29)-C(30)	1.361(12)	C(21B)-C(22B)	1.361(12)
C(30)-C(31)	1.386(12)	C(22B)-C(23B)	1.391(11)

Payne and Hagen

Supporting Information

61

C(23B)-C(24B)	1.395(10)	C(1N)-C(2N)	1.440(14)
N(7)-C(1N)	1.112(13)		
O(1)-Fe(1)-O(2)	97.5(2)	C(4)-N(3)-C(9)	109.3(6)
O(1)-Fe(1)-O(4)	99.5(2)	C(5)-N(3)-Fe(1)	106.8(5)
O(2)-Fe(1)-O(4)	93.5(2)	C(4)-N(3)-Fe(1)	106.9(6)
O(1)-Fe(1)-N(3)	95.8(2)	C(9)-N(3)-Fe(1)	110.0(4)
O(2)-Fe(1)-N(3)	92.9(2)	C(15)-N(4)-C(16)	108.6(6)
O(4)-Fe(1)-N(3)	162.6(2)	C(15)-N(4)-C(10)	113.1(8)
O(1)-Fe(1)-N(2)	101.6(2)	C(16)-N(4)-C(10)	108.2(7)
O(2)-Fe(1)-N(2)	159.6(2)	C(15)-N(4)-Fe(2)	108.9(5)
O(4)-Fe(1)-N(2)	90.3(2)	C(16)-N(4)-Fe(2)	113.2(4)
N(3)-Fe(1)-N(2)	78.3(2)	C(10)-N(4)-Fe(2)	104.9(5)
O(1)-Fe(1)-N(1)	173.1(2)	C(11)-N(5)-C(12)	112.6(7)
O(2)-Fe(1)-N(1)	83.7(2)	C(11)-N(5)-C(17)	110.1(7)
O(4)-Fe(1)-N(1)	87.2(2)	C(12)-N(5)-C(17)	109.4(7)
N(3)-Fe(1)-N(1)	77.4(2)	C(11)-N(5)-Fe(2)	111.8(5)
N(2)-Fe(1)-N(1)	76.5(2)	C(12)-N(5)-Fe(2)	102.9(5)
O(1)-Fe(1)-Fe(2)	30.73(12)	C(17)-N(5)-Fe(2)	109.9(4)
O(2)-Fe(1)-Fe(2)	77.41(12)	C(13)-N(6)-C(18)	110.8(7)
O(4)-Fe(1)-Fe(2)	77.80(11)	C(13)-N(6)-C(14)	112.9(8)
N(3)-Fe(1)-Fe(2)	119.5(2)	C(18)-N(6)-C(14)	109.1(7)
N(2)-Fe(1)-Fe(2)	123.0(2)	C(13)-N(6)-Fe(2)	108.7(5)
N(1)-Fe(1)-Fe(2)	154.9(2)	C(18)-N(6)-Fe(2)	111.1(4)
O(1)-Fe(2)-O(5)	95.8(2)	C(14)-N(6)-Fe(2)	104.0(6)
O(1)-Fe(2)-O(3)	99.3(2)	Fe(1)-O(1)-Fe(2)	119.0(2)
O(5)-Fe(2)-O(3)	92.7(2)	C(19)-O(2)-Fe(1)	131.0(4)
O(1)-Fe(2)-N(6)	95.5(2)	C(19)-O(3)-Fe(2)	127.8(4)
O(5)-Fe(2)-N(6)	94.2(2)	C(39)-O(4)-Fe(1)	128.5(4)
O(3)-Fe(2)-N(6)	163.0(2)	C(39)-O(5)-Fe(2)	130.6(4)
O(1)-Fe(2)-N(5)	103.2(2)	C(2)-C(1)-N(1)	121.3(9)
O(5)-Fe(2)-N(5)	160.2(2)	C(1)-C(2)-N(2)	118.4(10)
O(3)-Fe(2)-N(5)	89.8(2)	C(4)-C(3)-N(2)	120.1(9)
N(6)-Fe(2)-N(5)	78.5(2)	C(3)-C(4)-N(3)	120.3(9)
O(1)-Fe(2)-N(4)	172.9(2)	C(6)-C(5)-N(3)	120.5(8)
O(5)-Fe(2)-N(4)	84.2(2)	C(5)-C(6)-N(1)	121.0(8)
O(3)-Fe(2)-N(4)	87.9(2)	C(11)-C(10)-N(4)	116.6(8)
N(6)-Fe(2)-N(4)	77.4(2)	C(10)-C(11)-N(5)	116.9(7)
N(5)-Fe(2)-N(4)	76.2(2)	C(13)-C(12)-N(5)	118.1(8)
O(1)-Fe(2)-Fe(1)	30.24(12)	C(12)-C(13)-N(6)	116.4(8)
O(5)-Fe(2)-Fe(1)	76.64(11)	C(15)-C(14)-N(6)	117.8(8)
O(3)-Fe(2)-Fe(1)	77.12(11)	C(14)-C(15)-N(4)	115.9(8)
N(6)-Fe(2)-Fe(1)	119.6(2)	O(3)-C(19)-O(2)	125.4(6)
N(5)-Fe(2)-Fe(1)	123.0(2)	O(3)-C(19)-C(20)	119.7(6)
N(4)-Fe(2)-Fe(1)	154.9(2)	O(2)-C(19)-C(20)	115.0(5)
C(6)-N(1)-C(7)	110.7(7)	C(27)-C(20)-C(21)	106.7(5)
C(6)-N(1)-C(1)	113.0(9)	C(27)-C(20)-C(33)	110.5(5)
C(7)-N(1)-C(1)	110.3(6)	C(21)-C(20)-C(33)	113.5(5)
C(6)-N(1)-Fe(1)	106.3(5)	C(27)-C(20)-C(19)	108.2(5)
C(7)-N(1)-Fe(1)	112.5(4)	C(21)-C(20)-C(19)	110.7(5)
C(1)-N(1)-Fe(1)	103.7(6)	C(33)-C(20)-C(19)	107.2(5)
C(2)-N(2)-C(3)	111.4(11)	C(22)-C(21)-C(26)	116.9(7)
C(2)-N(2)-C(8)	109.9(7)	C(22)-C(21)-C(20)	118.7(6)
C(3)-N(2)-C(8)	109.1(7)	C(26)-C(21)-C(20)	124.4(6)
C(2)-N(2)-Fe(1)	111.5(7)	C(23)-C(22)-C(21)	122.0(8)
C(3)-N(2)-Fe(1)	103.9(6)	C(24)-C(23)-C(22)	119.8(8)
C(8)-N(2)-Fe(1)	110.9(4)	C(23)-C(24)-C(25)	120.5(8)
C(5)-N(3)-C(4)	113.4(8)	C(24)-C(25)-C(26)	119.0(8)
C(5)-N(3)-C(9)	110.3(6)	C(25)-C(26)-C(21)	121.8(8)

C(32)-C(27)-C(28)	118.5(7)	C(56)-C(55)-C(54)	121.2(7)
C(32)-C(27)-C(20)	123.9(6)	C(55)-C(56)-C(57)	119.0(7)
C(28)-C(27)-C(20)	117.7(6)	C(58)-C(57)-C(56)	119.8(7)
C(29)-C(28)-C(27)	120.3(8)	C(53)-C(58)-C(57)	122.2(7)
C(30)-C(29)-C(28)	121.2(9)	C(13B)-B-C(1B)	111.5(6)
C(29)-C(30)-C(31)	118.6(9)	C(13B)-B-C(7B)	108.1(5)
C(30)-C(31)-C(32)	120.6(8)	C(1B)-B-C(7B)	108.8(5)
C(27)-C(32)-C(31)	120.6(7)	C(13B)-B-C(19B)	106.7(5)
C(34)-C(33)-C(38)	118.1(6)	C(1B)-B-C(19B)	111.1(5)
C(34)-C(33)-C(20)	122.0(6)	C(7B)-B-C(19B)	110.4(5)
C(38)-C(33)-C(20)	119.8(6)	C(6B)-C(1B)-C(2B)	114.1(7)
C(33)-C(34)-C(35)	119.5(7)	C(6B)-C(1B)-B	121.2(7)
C(36)-C(35)-C(34)	121.5(8)	C(2B)-C(1B)-B	124.5(7)
C(35)-C(36)-C(37)	120.0(7)	C(3B)-C(2B)-C(1B)	122.9(9)
C(36)-C(37)-C(38)	119.2(7)	C(4B)-C(3B)-C(2B)	120.0(10)
C(37)-C(38)-C(33)	121.7(7)	C(5B)-C(4B)-C(3B)	120.2(10)
O(4)-C(39)-O(5)	125.1(6)	C(4B)-C(5B)-C(6B)	118.5(10)
O(4)-C(39)-C(40)	119.1(5)	C(5B)-C(6B)-C(1B)	124.3(9)
O(5)-C(39)-C(40)	115.9(5)	C(12B)-C(7B)-C(8B)	114.1(7)
C(41)-C(40)-C(53)	114.3(5)	C(12B)-C(7B)-B	125.8(6)
C(41)-C(40)-C(39)	110.4(5)	C(8B)-C(7B)-B	120.0(6)
C(53)-C(40)-C(39)	105.6(5)	C(9B)-C(8B)-C(7B)	122.6(8)
C(41)-C(40)-C(47)	106.5(5)	C(10B)-C(9B)-C(8B)	120.8(8)
C(53)-C(40)-C(47)	110.1(5)	C(11B)-C(10B)-C(9B)	118.1(7)
C(39)-C(40)-C(47)	110.0(5)	C(10B)-C(11B)-C(12B)	120.9(8)
C(42)-C(41)-C(46)	115.7(6)	C(11B)-C(12B)-C(7B)	123.3(7)
C(42)-C(41)-C(40)	125.5(6)	C(18B)-C(13B)-C(14B)	114.6(7)
C(46)-C(41)-C(40)	118.8(6)	C(18B)-C(13B)-B	123.3(6)
C(43)-C(42)-C(41)	122.2(7)	C(14B)-C(13B)-B	122.0(6)
C(42)-C(43)-C(44)	119.8(7)	C(15B)-C(14B)-C(13B)	123.8(8)
C(45)-C(44)-C(43)	119.9(7)	C(16B)-C(15B)-C(14B)	119.3(8)
C(46)-C(45)-C(44)	119.5(7)	C(17B)-C(16B)-C(15B)	118.5(9)
C(45)-C(46)-C(41)	122.9(7)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	123.0(9)
C(52)-C(47)-C(48)	118.3(6)	C(17B)-C(18B)-C(13B)	120.7(7)
C(52)-C(47)-C(40)	124.4(6)	C(24B)-C(19B)-C(20B)	114.1(7)
C(48)-C(47)-C(40)	117.2(6)	C(24B)-C(19B)-B	124.0(6)
C(49)-C(48)-C(47)	121.0(7)	C(20B)-C(19B)-B	121.9(6)
C(50)-C(49)-C(48)	119.1(8)	C(21B)-C(20B)-C(19B)	123.1(8)
C(49)-C(50)-C(51)	120.9(8)	C(22B)-C(21B)-C(20B)	120.5(9)
C(52)-C(51)-C(50)	119.4(8)	C(21B)-C(22B)-C(23B)	119.3(8)
C(47)-C(52)-C(51)	121.4(7)	C(22B)-C(23B)-C(24B)	119.2(8)
C(58)-C(53)-C(54)	117.4(6)	C(19B)-C(24B)-C(23B)	123.8(7)
C(58)-C(53)-C(40)	120.3(6)	N(7)-C(1N)-C(2N)	176.5(2)
C(54)-C(53)-C(40)	122.0(6)		
C(55)-C(54)-C(53)	120.3(7)		

Table S-24. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **2-Ph-BPh₄**.

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	69(1)	55(1)	61(1)	3(1)	-1(1)	-5(1)
Fe(2)	65(1)	54(1)	69(1)	3(1)	1(1)	-3(1)
N(1)	74(4)	69(4)	95(4)	15(3)	-5(3)	-15(3)
N(2)	115(5)	75(4)	78(4)	2(3)	17(4)	-3(4)
N(3)	81(4)	66(3)	90(4)	16(3)	-6(3)	-11(3)
N(4)	81(4)	75(4)	101(5)	17(4)	6(4)	-13(3)
N(5)	75(4)	74(4)	83(4)	2(3)	2(3)	2(3)
N(6)	79(4)	74(4)	104(5)	-18(4)	2(3)	-7(3)
O(1)	71(3)	63(2)	66(3)	6(2)	-9(2)	-5(2)
O(2)	83(3)	59(2)	64(3)	-3(2)	6(2)	-13(2)
O(3)	86(3)	61(3)	66(3)	-4(2)	7(2)	-14(2)
O(4)	67(3)	51(2)	87(3)	6(2)	-3(2)	-2(2)
O(5)	64(3)	58(2)	80(3)	5(2)	-1(2)	-3(2)
C(1)	63(5)	276(16)	105(7)	41(9)	10(5)	-24(8)
C(2)	160(12)	162(11)	245(17)	-92(11)	123(12)	-66(9)
C(3)	396(24)	135(9)	78(7)	16(7)	-15(10)	104(13)
C(4)	97(6)	196(11)	85(6)	43(7)	-5(5)	16(7)
C(5)	103(7)	66(5)	235(13)	13(7)	-33(8)	-19(5)
C(6)	175(11)	59(5)	280(16)	36(7)	-120(11)	-36(6)
C(7)	82(5)	95(5)	94(6)	-11(5)	0(4)	-20(4)
C(8)	125(7)	92(6)	78(5)	-13(4)	17(5)	8(5)
C(9)	82(5)	85(5)	103(6)	10(4)	-13(4)	4(4)
C(10)	106(7)	164(10)	130(8)	61(7)	36(6)	15(7)
C(11)	94(6)	113(7)	147(9)	18(7)	42(6)	11(5)
C(12)	105(7)	116(7)	133(8)	-15(6)	-40(6)	20(6)
C(13)	82(6)	222(13)	169(10)	-111(10)	-40(6)	20(7)
C(14)	211(12)	56(5)	159(10)	-18(6)	65(9)	-25(6)
C(15)	165(9)	73(6)	145(9)	27(6)	-45(8)	-29(6)
C(16)	123(7)	96(6)	91(6)	38(5)	2(5)	-10(5)
C(17)	79(5)	86(5)	168(9)	-11(6)	4(5)	21(4)
C(18)	108(6)	89(5)	96(6)	-28(5)	-2(5)	-2(5)
C(19)	67(4)	61(4)	61(4)	2(3)	-6(3)	1(3)
C(20)	73(4)	63(4)	63(4)	-4(3)	3(3)	4(3)
C(21)	92(5)	68(4)	68(4)	-11(4)	4(4)	5(4)
C(22)	116(6)	76(5)	76(5)	1(4)	29(4)	2(5)
C(23)	148(8)	92(6)	92(6)	-6(5)	38(6)	-11(6)
C(24)	126(8)	126(8)	87(6)	0(6)	36(5)	-16(7)
C(25)	96(6)	109(7)	114(7)	-3(6)	22(5)	5(5)
C(26)	88(5)	86(5)	89(5)	-10(4)	14(4)	-2(4)
C(27)	91(5)	69(4)	63(4)	-5(3)	-8(4)	3(4)
C(28)	123(7)	91(6)	80(5)	-15(4)	-21(5)	14(5)
C(29)	171(9)	102(7)	89(6)	-23(5)	-41(7)	17(7)
C(30)	157(9)	108(7)	110(8)	-13(6)	-49(7)	35(7)
C(31)	97(6)	110(6)	112(7)	-8(6)	-24(5)	28(5)
C(32)	83(5)	84(5)	88(5)	-11(4)	-9(4)	16(4)
C(33)	79(5)	61(4)	69(4)	-7(3)	7(4)	3(4)
C(34)	91(5)	60(4)	92(5)	-13(4)	-1(4)	0(4)
C(35)	92(6)	70(5)	120(7)	-12(5)	-4(5)	-3(4)
C(36)	99(6)	62(4)	134(7)	7(5)	5(6)	1(5)
C(37)	93(5)	74(5)	111(6)	18(5)	-14(5)	14(5)
C(38)	84(5)	73(5)	90(5)	-2(4)	-9(4)	1(4)
C(39)	64(4)	54(4)	57(4)	-10(3)	-7(3)	3(3)
C(40)	58(4)	53(3)	67(4)	-5(3)	4(3)	3(3)
C(41)	70(4)	47(3)	74(4)	-2(3)	-5(4)	2(3)

C(42)	79(5)	61(4)	84(5)	-9(4)	4(4)	-2(4)
C(43)	80(5)	83(5)	94(6)	-7(4)	12(4)	0(4)
C(44)	80(5)	96(5)	87(5)	10(5)	3(4)	-8(4)
C(45)	81(5)	72(4)	94(5)	-7(4)	-9(4)	-21(4)
C(46)	72(4)	69(4)	79(4)	-11(4)	-2(3)	1(4)
C(47)	72(4)	54(4)	66(4)	3(3)	-12(3)	-5(3)
C(48)	84(5)	76(4)	70(4)	10(4)	-8(4)	-7(4)
C(49)	98(6)	98(6)	93(6)	15(5)	-20(5)	-1(5)
C(50)	128(7)	116(7)	71(5)	9(5)	-26(5)	-6(6)
C(51)	119(7)	110(6)	64(5)	-11(5)	3(5)	7(6)
C(52)	96(5)	72(4)	72(5)	-8(4)	0(4)	7(4)
C(53)	60(4)	61(4)	68(4)	-5(3)	-1(3)	1(3)
C(54)	73(4)	59(4)	81(4)	3(4)	-4(3)	2(3)
C(55)	95(5)	56(4)	110(7)	-3(4)	-3(5)	-5(4)
C(56)	81(5)	72(5)	114(7)	-28(5)	-1(5)	-8(4)
C(57)	87(5)	82(5)	85(5)	-24(4)	-7(4)	-5(4)
C(58)	85(5)	61(4)	81(5)	-2(4)	-3(4)	-6(4)
B	75(5)	63(4)	64(4)	4(4)	1(4)	-1(4)
C(1B)	89(5)	71(4)	75(5)	3(4)	13(4)	14(4)
C(2B)	115(6)	86(5)	87(5)	16(5)	7(5)	16(5)
C(3B)	182(11)	103(7)	101(7)	44(6)	20(7)	31(8)
C(4B)	167(11)	156(11)	87(7)	37(7)	10(7)	69(9)
C(5B)	121(7)	137(8)	81(6)	14(6)	-5(5)	30(7)
C(6B)	100(6)	96(6)	98(6)	16(5)	-8(5)	13(5)
C(7B)	80(5)	61(4)	65(4)	1(3)	-2(4)	-3(3)
C(8B)	90(5)	111(6)	85(5)	-21(5)	1(4)	12(5)
C(9B)	119(7)	100(6)	94(6)	-35(5)	0(5)	5(5)
C(10B)	103(6)	83(5)	81(5)	7(4)	27(5)	14(5)
C(11B)	89(5)	86(5)	83(5)	-7(4)	4(4)	13(4)
C(12B)	85(5)	76(5)	78(5)	2(4)	4(4)	-8(4)
C(13B)	73(4)	64(4)	67(4)	-2(3)	-6(3)	5(3)
C(14B)	87(5)	81(5)	102(6)	9(5)	-7(4)	-1(4)
C(15B)	105(7)	88(6)	155(9)	45(6)	5(6)	4(5)
C(16B)	107(7)	110(7)	116(7)	26(6)	8(6)	-22(6)
C(17B)	110(6)	101(6)	97(6)	4(6)	19(5)	5(5)
C(18B)	85(5)	77(5)	87(5)	3(4)	4(4)	3(4)
C(19B)	74(4)	61(4)	77(5)	-2(4)	4(4)	3(3)
C(20B)	98(5)	91(5)	94(5)	-13(5)	12(5)	-6(5)
C(21B)	115(7)	90(6)	119(7)	-36(5)	19(6)	-29(5)
C(22B)	91(6)	127(7)	123(8)	-56(6)	5(5)	-9(6)
C(23B)	93(6)	114(6)	82(5)	-22(5)	3(4)	-5(5)
C(24B)	74(4)	79(5)	78(5)	-9(4)	4(4)	3(4)
N(7)	208(12)	166(11)	307(17)	50(11)	9(11)	-61(9)
C(1N)	124(9)	115(9)	174(11)	-1(8)	9(8)	-10(7)
C(2N)	159(10)	124(8)	162(10)	-40(8)	3(8)	-35(7)

*The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

Table S-25. Calculated Hydrogen Coordinates ($\times 10^4$) and Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **2-Ph-BPh₄**

	x	y	z	U _(eq)
H(1A)	7573(4)	5742(8)	3982(3)	178
H(1B)	7561(4)	5026(8)	4172(3)	178
H(2A)	8008(7)	5364(7)	4592(4)	227
H(2B)	7722(7)	6068(7)	4462(4)	227
H(3A)	9397(9)	5986(6)	4762(3)	243
H(3B)	8817(9)	5512(6)	4870(3)	243
H(4A)	9209(4)	4691(7)	4670(2)	151
H(4B)	9850(4)	5122(7)	4685(2)	151
H(5A)	9423(5)	4158(4)	3869(4)	162
H(5B)	9150(5)	4023(4)	4248(4)	162
H(6A)	8277(6)	4258(4)	4115(4)	206
H(6B)	8526(6)	4159(4)	3729(4)	206
H(7A)	7882(4)	5586(4)	3431(2)	136
H(7B)	7687(4)	4807(4)	3479(2)	136
H(7C)	8368(4)	5000(4)	3319(2)	136
H(8A)	9049(4)	6943(4)	4525(2)	147
H(8B)	8422(4)	6783(4)	4746(2)	147
H(8C)	8362(4)	6986(4)	4346(2)	147
H(9A)	10482(3)	5238(4)	4221(2)	135
H(9B)	10324(3)	4798(4)	3882(2)	135
H(9C)	10384(3)	4435(4)	4252(2)	135
H(10A)	11105(5)	7144(6)	2892(3)	160
H(10B)	11478(5)	7834(6)	2967(3)	160
H(11A)	11922(4)	7459(5)	3422(3)	142
H(11C)	11885(4)	6789(5)	3191(3)	142
H(12A)	11401(4)	6660(5)	4127(3)	141
H(12C)	11982(4)	7050(5)	3952(3)	141
H(13A)	11535(4)	8020(6)	3990(3)	190
H(13B)	11284(4)	7655(6)	4334(3)	190
H(14A)	10080(6)	8600(4)	3759(3)	170
H(14C)	10779(6)	8817(4)	3876(3)	170
H(15A)	11198(6)	8525(4)	3404(3)	153
H(15B)	10520(6)	8798(4)	3281(3)	153
H(16A)	10100(4)	7495(4)	2794(2)	155
H(16B)	10373(4)	8251(4)	2765(2)	155
H(16C)	9774(4)	8096(4)	3009(2)	155
H(17A)	11216(4)	5767(4)	3773(3)	167
H(17B)	11890(4)	5916(4)	3594(3)	167
H(17C)	11266(4)	5830(4)	3360(3)	167
H(18A)	9734(4)	7980(4)	4218(2)	147
H(18B)	10332(4)	8242(4)	4438(2)	147
H(18C)	10174(4)	7448(4)	4420(2)	147
H(22A)	10299(4)	6334(4)	2500(2)	107
H(23A)	11235(5)	6616(5)	2204(2)	133
H(24A)	12046(5)	5814(6)	2142(2)	135
H(25A)	11938(4)	4727(5)	2390(2)	127
H(26A)	10999(4)	4451(4)	2692(2)	105
H(28A)	9768(4)	4873(4)	2163(2)	118
H(29A)	8946(6)	5049(5)	1759(2)	144
H(30A)	8068(5)	5730(5)	1897(3)	150
H(31A)	7956(4)	6134(5)	2473(2)	127

H(32A)	8766(4)	5943(4)	2885(2)	102
H(34A)	9004(4)	4207(3)	2722(2)	97
H(35A)	8940(4)	3090(4)	2949(2)	113
H(36A)	9700(4)	2684(4)	3335(2)	118
H(37A)	10572(4)	3371(4)	3495(2)	112
H(38A)	10638(4)	4490(4)	3281(2)	99
H(42A)	7386(3)	8190(3)	4024(2)	90
H(43A)	6398(4)	7775(4)	4205(2)	103
H(44A)	5972(4)	6794(4)	3946(2)	105
H(45A)	6497(4)	6290(4)	3472(2)	99
H(46A)	7462(3)	6730(3)	3280(2)	88
H(48A)	7303(3)	8432(3)	3119(2)	92
H(49A)	7144(4)	8626(4)	2523(2)	116
H(50A)	7844(5)	8143(5)	2121(2)	126
H(51A)	8700(4)	7469(4)	2309(2)	117
H(52A)	8869(4)	7304(4)	2903(2)	96
H(54A)	8574(3)	9000(3)	3182(2)	85
H(55A)	8976(4)	10002(4)	3436(2)	104
H(56A)	9070(4)	10105(4)	4039(2)	107
H(57A)	8809(3)	9163(4)	4396(2)	102
H(58A)	8437(3)	8153(3)	4144(2)	91
H(2BA)	7054(4)	6336(4)	5290(2)	115
H(3BA)	6513(6)	6919(5)	4851(3)	154
H(4BA)	5659(7)	6406(7)	4559(3)	164
H(5BA)	5354(5)	5289(6)	4701(2)	135
H(6BA)	5908(4)	4708(5)	5138(2)	117
H(8BA)	6874(4)	4105(4)	4974(2)	114
H(9BA)	7548(5)	3338(4)	4694(2)	125
H(10C)	8642(4)	3283(4)	4839(2)	107
H(11B)	9021(4)	3966(4)	5287(2)	104
H(12B)	8344(4)	4707(4)	5580(2)	96
H(14B)	7149(4)	3658(4)	5834(2)	108
H(15C)	6556(5)	2967(4)	6204(3)	139
H(16D)	5496(5)	3264(5)	6338(3)	133
H(17D)	5104(4)	4296(5)	6149(2)	123
H(18D)	5687(4)	5010(4)	5789(2)	100
H(20A)	7996(4)	5922(4)	5508(2)	113
H(21A)	8522(4)	6621(4)	5905(3)	130
H(22B)	8247(4)	6601(5)	6494(3)	136
H(23B)	7428(4)	5856(4)	6687(2)	115
H(24B)	6900(3)	5159(4)	6283(2)	93
H(2NA)	4332(34)	6669(18)	4599(13)	222
H(2NB)	3810(6)	7132(11)	4788(23)	222
H(2NC)	4394(30)	6829(27)	5005(11)	222

Table S-26 . Crystal data and structure refinement for **3-Ph-BPh₄**.

Identification code	sp3022b
Empirical formula	C ₁₁₂ H ₁₁₉ B ₂ Fe ₂ N ₈ O ₇
Formula weight	1822.47
Temperature	296(2) K
Wavelength	1.54178 Å
Crystal system	Triclinic
Space group, Z	P-1, 2
Unit cell dimensions	$a = 12.937(2)$ Å $b = 14.977(3)$ Å $c = 25.627(5)$ Å $\alpha = 93.840(10)$ deg $\beta = 91.120(10)$ deg $\gamma = 96.260(10)$ deg
Volume,	$4923(2)$ Å ³
Color	orange-red
Density (calculated)	1.229 g/cm ³
Absorption coefficient	2.833 mm ⁻¹
F(000)	1930
Crystal size	0.30 x 0.56 x 0.56 mm
Theta range for data collection	2 to 113.5°
Limiting indices	$-1 \leq h \leq 14$, $-16 \leq k \leq 16$, $-27 \leq l \leq 27$
Reflections collected	15199
Independent reflections	13195 [$R_{\text{(int)}} = 0.0297$]
Absorption correction	Semi-empirical from psi-scans
Max. and min. transmission	0.1301 and 0.0402
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	13195 / 8 / 1181
Goodness-of-fit on F ²	1.015
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0657$, $wR_2 = 0.1758$
R indices (all data)	$R_1 = 0.0954$, $wR_2 = 0.2032$
Extinction coefficient	0.00054(9)
Largest diff. peak and hole	0.522 and -0.292 e.Å ⁻³

Table S-27. Refined Atom Coordinates ($\times 10^4$) and Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **3-Ph-BPh₄**.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	1218(1)	3025(1)	1890(1)	72(1)
Fe(2)	2320(1)	3679(1)	2982(1)	68(1)
O(1)	1476(2)	3833(2)	2440(1)	72(1)
O(2)	2754(3)	2920(2)	1782(1)	78(1)
O(3)	3524(2)	3237(2)	2562(1)	73(1)
O(4)	995(2)	1915(2)	2330(1)	75(1)
O(5)	1649(2)	2429(2)	3115(1)	71(1)
N(1)	1037(3)	2147(3)	1142(2)	83(1)
N(2)	-490(3)	2878(3)	1762(2)	90(1)
N(3)	1058(4)	4037(3)	1326(2)	88(1)
N(4)	3242(3)	3563(3)	3722(1)	74(1)
N(5)	3191(3)	5021(3)	3083(2)	79(1)
N(6)	1369(3)	4309(3)	3564(2)	80(1)
C(1)	1432(6)	2757(5)	749(2)	117(2)
C(2)	1138(6)	3644(5)	792(2)	122(2)
C(3)	5(6)	4316(5)	1418(3)	125(2)
C(4)	-791(6)	3613(6)	1466(3)	134(3)
C(5)	-729(5)	1989(5)	1456(3)	121(2)
C(6)	-73(5)	1826(5)	1039(3)	115(2)
C(7)	1641(5)	1367(4)	1131(2)	95(2)
C(8)	1803(5)	4852(4)	1431(2)	105(2)
C(9)	-1059(4)	2830(5)	2252(2)	102(2)
C(10)	4193(4)	4192(4)	3671(2)	84(1)
C(11)	3963(5)	5094(4)	3527(2)	92(2)
C(12)	2346(5)	5603(4)	3191(2)	96(2)
C(13)	1704(5)	5291(4)	3631(2)	96(2)
C(14)	1517(4)	3850(4)	4050(2)	88(2)
C(15)	2651(4)	3840(4)	4187(2)	89(2)
C(16)	3541(4)	2649(4)	3774(2)	90(2)
C(17)	3734(5)	5285(4)	2604(2)	95(2)
C(18)	255(4)	4157(4)	3397(2)	94(2)
C(19)	3540(4)	3054(3)	2082(2)	72(1)
C(20)	4596(4)	2930(4)	1813(2)	74(1)
C(21)	4777(4)	1937(4)	1831(2)	81(1)
C(22)	5742(5)	1691(5)	1718(2)	106(2)
C(23)	5930(7)	813(7)	1720(3)	129(3)
C(24)	5173(9)	156(6)	1827(3)	129(3)
C(25)	4205(7)	382(5)	1939(2)	113(2)
C(26)	4007(5)	1274(4)	1946(2)	92(2)
C(27)	4470(4)	3188(5)	1241(2)	89(2)
C(28)	4276(5)	4050(5)	1146(3)	110(2)
C(29)	4115(6)	4305(7)	645(4)	137(3)
C(30)	4123(7)	3683(9)	232(3)	151(4)
C(31)	4315(7)	2847(8)	315(3)	139(3)
C(32)	4479(5)	2579(5)	816(2)	108(2)
C(33)	5513(4)	3492(4)	2108(2)	80(1)
C(34)	6157(4)	4152(4)	1886(2)	93(2)
C(35)	6989(5)	4614(5)	2163(3)	114(2)
C(36)	7196(5)	4426(5)	2671(3)	117(2)
C(37)	6589(5)	3759(5)	2896(3)	107(2)

C(38)	5763(4)	3291(4)	2611(2)	90(2)
C(39)	1121(4)	1845(3)	2811(2)	67(1)
C(40)	609(4)	1010(3)	3075(2)	71(1)
C(41)	1438(4)	388(3)	3195(2)	76(1)
C(42)	2472(4)	568(4)	3085(2)	85(1)
C(43)	3169(5)	-32(5)	3201(2)	105(2)
C(44)	2844(7)	-808(5)	3437(3)	116(2)
C(45)	1827(7)	-988(4)	3540(3)	113(2)
C(46)	1123(5)	-400(4)	3426(2)	96(2)
C(47)	143(4)	1383(3)	3585(2)	75(1)
C(48)	584(4)	1281(4)	4066(2)	87(2)
C(49)	153(6)	1649(5)	4519(2)	105(2)
C(50)	-690(6)	2104(5)	4495(3)	109(2)
C(51)	-1116(5)	2221(4)	4016(3)	100(2)
C(52)	-702(4)	1864(4)	3572(2)	86(2)
C(53)	-201(4)	447(3)	2697(2)	75(1)
C(54)	134(4)	93(3)	2224(2)	84(1)
C(55)	-549(5)	-391(4)	1864(2)	102(2)
C(56)	-1585(6)	-535(4)	1978(3)	116(2)
C(57)	-1915(5)	-232(5)	2448(3)	116(2)
C(58)	-1218(4)	254(4)	2811(2)	92(2)
B(1)	6464(5)	-2712(4)	4113(2)	76(2)
C(1A)	6958(4)	-1748(3)	4402(2)	76(1)
C(2A)	7705(5)	-1169(4)	4177(2)	93(2)
C(3A)	8190(5)	-391(4)	4429(3)	106(2)
C(4A)	7934(6)	-162(4)	4934(3)	110(2)
C(5A)	7214(5)	-708(4)	5176(2)	99(2)
C(6A)	6731(4)	-1480(3)	4908(2)	83(1)
C(7A)	7267(4)	-3466(3)	4218(2)	76(1)
C(8A)	8258(4)	-3253(4)	4444(2)	86(2)
C(9A)	8913(5)	-3887(5)	4541(2)	100(2)
C(10A)	8609(5)	-4784(5)	4420(2)	97(2)
C(11A)	7654(5)	-5030(4)	4195(2)	92(2)
C(12A)	7000(4)	-4386(4)	4093(2)	84(1)
C(13A)	6297(4)	-2594(3)	3483(2)	82(1)
C(14A)	6444(5)	-3243(4)	3087(2)	94(2)
C(15A)	6234(6)	-3126(5)	2565(2)	115(2)
C(16A)	5884(6)	-2360(5)	2414(3)	120(2)
C(17A)	5714(6)	-1710(5)	2790(3)	112(2)
C(18A)	5930(5)	-1816(4)	3305(2)	93(2)
C(19A)	5315(4)	-3004(3)	4350(2)	75(1)
C(21A)	4178(5)	-3880(3)	4921(2)	84(2)
C(22A)	3336(5)	-3465(4)	4772(2)	91(2)
C(23A)	3482(5)	-2830(4)	4421(2)	99(2)
C(24A)	4445(5)	-2611(4)	4217(2)	94(2)
C(20A)	5140(4)	-3648(3)	4715(2)	77(1)
B(2)	-1748(6)	2180(6)	-551(3)	105(2)
C(1B)	-2152(5)	2336(5)	-1134(2)	106(2)
C(2B)	-1812(6)	1865(6)	-1570(3)	140(3)
C(3B)	-2190(8)	1903(8)	-2073(3)	159(3)
C(4B)	-2976(10)	2404(7)	-2158(4)	157(4)
C(5B)	-3368(9)	2900(6)	-1738(4)	164(4)
C(6B)	-2937(7)	2856(5)	-1239(3)	129(2)
C(7B)	-1921(5)	3077(5)	-160(2)	107(2)
C(8B)	-2840(6)	3155(6)	94(3)	144(3)
C(9B)	-3043(7)	3905(7)	395(3)	151(3)
C(10B)	-2336(7)	4641(6)	453(3)	123(2)
C(11B)	-1415(6)	4608(5)	209(3)	111(2)

C(12B)	-1221(5)	3848(5)	-89(2)	105(2)
C(13B)	-2437(5)	1322(5)	-332(2)	105(2)
C(14B)	-3103(6)	704(5)	-646(3)	115(2)
C(15B)	-3681(8)	-10(6)	-465(4)	148(3)
C(16B)	-3633(8)	-178(7)	51(4)	149(3)
C(17B)	-2998(8)	384(8)	378(3)	153(3)
C(18B)	-2410(6)	1111(7)	188(3)	145(3)
C(19B)	-524(6)	2019(6)	-570(2)	109(2)
C(20B)	225(6)	2596(6)	-800(3)	128(2)
C(21B)	1262(7)	2474(8)	-825(3)	136(3)
C(22B)	1609(7)	1737(8)	-637(3)	137(3)
C(23B)	914(7)	1114(7)	-418(3)	134(3)
C(24B)	-128(6)	1259(6)	-385(2)	115(2)
O(1S)	6311(5)	2615(4)	3906(2)	149(2)
C(1S)	5988(6)	1986(5)	4152(3)	114(2)
N(1S)	5895(4)	1137(4)	3984(2)	103(1)
C(2S)	6228(7)	890(6)	3476(3)	148(3)
C(3S)	5494(7)	438(5)	4303(3)	144(3)
O(1X)	174(10)	4420(5)	-2546(4)	235(5)
C(1X)	252(15)	3561(13)	-2287(7)	393(18)
N(1X)	617(5)	3053(4)	-2676(3)	116(2)
C(2X)	622(9)	3420(14)	-3128(6)	325(13)
C(3X)	919(11)	2216(7)	-2669(9)	360(14)

* U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S-28. Bond lengths [Å] and Angles [deg] for **3-Ph-BPh₄**.

Fe(1)-O(1)	1.796(3)	C(33)-C(34)	1.381(7)
Fe(1)-O(2)	2.032(3)	C(33)-C(38)	1.384(7)
Fe(1)-O(4)	2.069(3)	C(34)-C(35)	1.373(8)
Fe(1)-N(3)	2.187(4)	C(35)-C(36)	1.377(10)
Fe(1)-N(2)	2.213(4)	C(36)-C(37)	1.367(9)
Fe(1)-N(1)	2.245(4)	C(37)-C(38)	1.380(8)
Fe(2)-O(1)	1.792(3)	C(39)-C(40)	1.552(7)
Fe(2)-O(5)	2.028(3)	C(40)-C(41)	1.534(7)
Fe(2)-O(3)	2.053(3)	C(40)-C(47)	1.545(6)
Fe(2)-N(6)	2.185(4)	C(40)-C(53)	1.552(6)
Fe(2)-N(5)	2.192(4)	C(41)-C(42)	1.374(7)
Fe(2)-N(4)	2.249(4)	C(41)-C(46)	1.381(7)
O(2)-C(19)	1.252(5)	C(42)-C(43)	1.382(8)
O(3)-C(19)	1.245(5)	C(43)-C(44)	1.374(9)
O(4)-C(39)	1.253(5)	C(44)-C(45)	1.349(9)
O(5)-C(39)	1.263(5)	C(45)-C(46)	1.375(9)
N(1)-C(1)	1.468(7)	C(47)-C(48)	1.375(7)
N(1)-C(7)	1.474(7)	C(47)-C(52)	1.374(7)
N(1)-C(6)	1.476(7)	C(48)-C(49)	1.403(8)
N(2)-C(4)	1.461(8)	C(49)-C(50)	1.349(9)
N(2)-C(9)	1.470(6)	C(50)-C(51)	1.365(9)
N(2)-C(5)	1.497(8)	C(51)-C(52)	1.369(7)
N(3)-C(2)	1.463(7)	C(53)-C(58)	1.357(7)
N(3)-C(8)	1.477(7)	C(53)-C(54)	1.386(7)
N(3)-C(3)	1.486(8)	C(54)-C(55)	1.378(7)
N(4)-C(16)	1.476(6)	C(55)-C(56)	1.375(9)
N(4)-C(10)	1.479(6)	C(56)-C(57)	1.350(9)
N(4)-C(15)	1.488(6)	C(57)-C(58)	1.395(8)
N(5)-C(17)	1.482(6)	B(1)-C(1A)	1.637(7)
N(5)-C(12)	1.489(7)	B(1)-C(19A)	1.643(8)
N(5)-C(11)	1.490(6)	B(1)-C(7A)	1.646(8)
N(6)-C(14)	1.481(6)	B(1)-C(13A)	1.647(8)
N(6)-C(13)	1.484(7)	C(1A)-C(6A)	1.377(7)
N(6)-C(18)	1.484(6)	C(1A)-C(2A)	1.387(7)
C(1)-C(2)	1.419(9)	C(2A)-C(3A)	1.375(7)
C(3)-C(4)	1.404(9)	C(3A)-C(4A)	1.372(8)
C(5)-C(6)	1.403(8)	C(4A)-C(5A)	1.360(8)
C(10)-C(11)	1.482(7)	C(5A)-C(6A)	1.386(7)
C(12)-C(13)	1.484(8)	C(7A)-C(8A)	1.392(7)
C(14)-C(15)	1.503(7)	C(7A)-C(12A)	1.397(7)
C(19)-C(20)	1.565(7)	C(8A)-C(9A)	1.372(8)
C(20)-C(33)	1.533(7)	C(9A)-C(10A)	1.371(8)
C(20)-C(21)	1.535(7)	C(10A)-C(11A)	1.356(8)
C(20)-C(27)	1.549(7)	C(11A)-C(12A)	1.386(7)
C(21)-C(22)	1.369(8)	C(13A)-C(14A)	1.389(7)
C(21)-C(26)	1.378(8)	C(13A)-C(18A)	1.404(7)
C(22)-C(23)	1.364(10)	C(14A)-C(15A)	1.387(8)
C(23)-C(24)	1.356(11)	C(15A)-C(16A)	1.355(9)
C(24)-C(25)	1.364(10)	C(16A)-C(17A)	1.361(9)
C(25)-C(26)	1.387(8)	C(17A)-C(18A)	1.369(8)
C(27)-C(32)	1.376(8)	C(19A)-C(24A)	1.374(7)
C(27)-C(28)	1.378(8)	C(19A)-C(20A)	1.392(7)
C(28)-C(29)	1.383(9)	C(21A)-C(22A)	1.371(8)
C(29)-C(30)	1.363(12)	C(21A)-C(20A)	1.381(7)
C(30)-C(31)	1.333(12)	C(22A)-C(23A)	1.353(8)
C(31)-C(32)	1.390(9)	C(23A)-C(24A)	1.376(8)

Payne and Hagen

Supporting Information

72

B(2)-C(1B)	1.614(9)	C(14B)-C(15B)	1.350(10)
B(2)-C(13B)	1.621(10)	C(15B)-C(16B)	1.365(11)
B(2)-C(19B)	1.628(10)	C(16B)-C(17B)	1.346(12)
B(2)-C(7B)	1.660(10)	C(17B)-C(18B)	1.380(11)
C(1B)-C(6B)	1.379(10)	C(19B)-C(20B)	1.392(10)
C(1B)-C(2B)	1.386(9)	C(19B)-C(24B)	1.406(10)
C(2B)-C(3B)	1.375(10)	C(20B)-C(21B)	1.376(10)
C(3B)-C(4B)	1.351(13)	C(21B)-C(22B)	1.350(12)
C(4B)-C(5B)	1.400(13)	C(22B)-C(23B)	1.379(11)
C(5B)-C(6B)	1.393(10)	C(23B)-C(24B)	1.391(10)
C(7B)-C(8B)	1.379(9)	O(1S)-C(1S)	1.210(8)
C(7B)-C(12B)	1.387(9)	C(1S)-N(1S)	1.306(8)
C(8B)-C(9B)	1.371(11)	N(1S)-C(2S)	1.417(8)
C(9B)-C(10B)	1.351(11)	N(1S)-C(3S)	1.431(8)
C(10B)-C(11B)	1.359(9)	O(1X)-C(1X)	1.50(2)
C(11B)-C(12B)	1.378(9)	C(1X)-N(1X)	1.338(14)
C(13B)-C(18B)	1.391(9)	N(1X)-C(2X)	1.315(11)
C(13B)-C(14B)	1.394(9)	N(1X)-C(3X)	1.355(11)
O(1)-Fe(1)-O(2)	92.99(14)	C(1)-N(1)-Fe(1)	103.2(4)
O(1)-Fe(1)-O(4)	95.49(13)	C(7)-N(1)-Fe(1)	114.4(3)
O(2)-Fe(1)-O(4)	94.55(13)	C(6)-N(1)-Fe(1)	109.7(3)
O(1)-Fe(1)-N(3)	94.6(2)	C(4)-N(2)-C(9)	110.6(5)
O(2)-Fe(1)-N(3)	96.7(2)	C(4)-N(2)-C(5)	111.2(6)
O(4)-Fe(1)-N(3)	164.5(2)	C(9)-N(2)-C(5)	107.6(5)
O(1)-Fe(1)-N(2)	105.4(2)	C(4)-N(2)-Fe(1)	109.9(4)
O(2)-Fe(1)-N(2)	161.4(2)	C(9)-N(2)-Fe(1)	112.9(3)
O(4)-Fe(1)-N(2)	86.8(2)	C(5)-N(2)-Fe(1)	104.5(4)
N(3)-Fe(1)-N(2)	79.2(2)	C(2)-N(3)-C(8)	111.5(5)
O(1)-Fe(1)-N(1)	172.2(2)	C(2)-N(3)-C(3)	111.4(5)
O(2)-Fe(1)-N(1)	82.70(14)	C(8)-N(3)-C(3)	106.6(5)
O(4)-Fe(1)-N(1)	91.4(2)	C(2)-N(3)-Fe(1)	110.4(4)
N(3)-Fe(1)-N(1)	79.5(2)	C(8)-N(3)-Fe(1)	112.6(3)
N(2)-Fe(1)-N(1)	78.7(2)	C(3)-N(3)-Fe(1)	104.0(4)
O(1)-Fe(2)-O(5)	95.61(13)	C(16)-N(4)-C(10)	109.0(4)
O(1)-Fe(2)-O(3)	97.89(13)	C(16)-N(4)-C(15)	109.6(4)
O(5)-Fe(2)-O(3)	95.15(13)	C(10)-N(4)-C(15)	110.9(4)
O(1)-Fe(2)-N(6)	94.5(2)	C(16)-N(4)-Fe(2)	113.0(3)
O(5)-Fe(2)-N(6)	91.97(14)	C(10)-N(4)-Fe(2)	103.8(3)
O(3)-Fe(2)-N(6)	165.06(14)	C(15)-N(4)-Fe(2)	110.4(3)
O(1)-Fe(2)-N(5)	100.2(2)	C(17)-N(5)-C(12)	109.8(4)
O(5)-Fe(2)-N(5)	162.85(13)	C(17)-N(5)-C(11)	109.0(4)
O(3)-Fe(2)-N(5)	89.3(2)	C(12)-N(5)-C(11)	111.5(4)
N(6)-Fe(2)-N(5)	80.3(2)	C(17)-N(5)-Fe(2)	112.6(3)
O(1)-Fe(2)-N(4)	173.13(14)	C(12)-N(5)-Fe(2)	101.9(3)
O(5)-Fe(2)-N(4)	84.60(13)	C(11)-N(5)-Fe(2)	112.0(3)
O(3)-Fe(2)-N(4)	88.92(13)	C(14)-N(6)-C(13)	112.5(4)
N(6)-Fe(2)-N(4)	78.7(2)	C(14)-N(6)-C(18)	109.2(4)
N(5)-Fe(2)-N(4)	78.9(2)	C(13)-N(6)-C(18)	109.5(4)
Fe(2)-O(1)-Fe(1)	123.4(2)	C(14)-N(6)-Fe(2)	105.7(3)
C(19)-O(2)-Fe(1)	133.1(3)	C(13)-N(6)-Fe(2)	109.7(3)
C(19)-O(3)-Fe(2)	127.4(3)	C(18)-N(6)-Fe(2)	110.1(3)
C(39)-O(4)-Fe(1)	130.7(3)	C(2)-C(1)-N(1)	117.0(6)
C(39)-O(5)-Fe(2)	130.3(3)	C(1)-C(2)-N(3)	115.6(5)
C(1)-N(1)-C(7)	109.3(5)	C(4)-C(3)-N(3)	115.7(6)
C(1)-N(1)-C(6)	111.1(5)	C(3)-C(4)-N(2)	114.5(6)
C(7)-N(1)-C(6)	109.2(5)	C(6)-C(5)-N(2)	115.7(6)
		C(5)-C(6)-N(1)	115.1(5)
		N(4)-C(10)-C(11)	112.7(4)

C(10)-C(11)-N(5)	111.2(4)	C(47)-C(48)-C(49)	119.6(6)
C(13)-C(12)-N(5)	111.5(5)	C(50)-C(49)-C(48)	121.6(6)
C(12)-C(13)-N(6)	111.6(4)	C(49)-C(50)-C(51)	118.9(6)
N(6)-C(14)-C(15)	111.6(4)	C(50)-C(51)-C(52)	120.0(7)
N(4)-C(15)-C(14)	111.4(4)	C(51)-C(52)-C(47)	122.5(6)
O(3)-C(19)-O(2)	125.0(5)	C(58)-C(53)-C(54)	118.0(5)
O(3)-C(19)-C(20)	120.0(4)	C(58)-C(53)-C(40)	123.6(5)
O(2)-C(19)-C(20)	114.9(4)	C(54)-C(53)-C(40)	118.4(4)
C(33)-C(20)-C(21)	107.3(4)	C(55)-C(54)-C(53)	121.5(5)
C(33)-C(20)-C(27)	112.6(4)	C(56)-C(55)-C(54)	119.3(6)
C(21)-C(20)-C(27)	111.1(4)	C(57)-C(56)-C(55)	119.9(6)
C(33)-C(20)-C(19)	111.7(4)	C(56)-C(57)-C(58)	120.5(6)
C(21)-C(20)-C(19)	107.6(4)	C(53)-C(58)-C(57)	120.8(6)
C(27)-C(20)-C(19)	106.5(4)	C(1A)-B(1)-C(19A)	109.3(4)
C(22)-C(21)-C(26)	118.2(6)	C(1A)-B(1)-C(7A)	108.1(4)
C(22)-C(21)-C(20)	118.8(6)	C(19A)-B(1)-C(7A)	111.0(4)
C(26)-C(21)-C(20)	123.0(5)	C(1A)-B(1)-C(13A)	109.2(4)
C(23)-C(22)-C(21)	120.6(7)	C(19A)-B(1)-C(13A)	107.6(4)
C(24)-C(23)-C(22)	121.5(7)	C(7A)-B(1)-C(13A)	111.6(4)
C(23)-C(24)-C(25)	119.1(7)	C(6A)-C(1A)-C(2A)	114.2(5)
C(24)-C(25)-C(26)	120.0(7)	C(6A)-C(1A)-B(1)	122.6(5)
C(21)-C(26)-C(25)	120.6(6)	C(2A)-C(1A)-B(1)	123.0(5)
C(32)-C(27)-C(28)	117.3(6)	C(3A)-C(2A)-C(1A)	123.9(5)
C(32)-C(27)-C(20)	123.0(6)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	119.1(6)
C(28)-C(27)-C(20)	119.6(5)	C(5A)-C(4A)-C(3A)	119.6(5)
C(27)-C(28)-C(29)	121.9(8)	C(4A)-C(5A)-C(6A)	119.6(6)
C(30)-C(29)-C(28)	119.3(9)	C(1A)-C(6A)-C(5A)	123.5(5)
C(31)-C(30)-C(29)	119.8(8)	C(8A)-C(7A)-C(12A)	113.9(5)
C(30)-C(31)-C(32)	121.7(9)	C(8A)-C(7A)-B(1)	123.7(5)
C(27)-C(32)-C(31)	120.0(8)	C(12A)-C(7A)-B(1)	122.4(5)
C(34)-C(33)-C(38)	117.5(5)	C(9A)-C(8A)-C(7A)	123.3(5)
C(34)-C(33)-C(20)	123.5(5)	C(10A)-C(9A)-C(8A)	120.6(6)
C(38)-C(33)-C(20)	118.8(5)	C(11A)-C(10A)-C(9A)	118.7(6)
C(35)-C(34)-C(33)	121.0(6)	C(10A)-C(11A)-C(12A)	120.4(6)
C(34)-C(35)-C(36)	120.3(7)	C(11A)-C(12A)-C(7A)	123.0(5)
C(37)-C(36)-C(35)	120.0(7)	C(14A)-C(13A)-C(18A)	114.0(5)
C(36)-C(37)-C(38)	119.3(7)	C(14A)-C(13A)-B(1)	124.8(5)
C(37)-C(38)-C(33)	121.9(6)	C(18A)-C(13A)-B(1)	121.1(5)
O(4)-C(39)-O(5)	124.1(4)	C(15A)-C(14A)-C(13A)	122.3(6)
O(4)-C(39)-C(40)	120.6(4)	C(16A)-C(15A)-C(14A)	121.2(6)
O(5)-C(39)-C(40)	115.3(4)	C(15A)-C(16A)-C(17A)	118.5(6)
C(41)-C(40)-C(47)	110.9(4)	C(16A)-C(17A)-C(18A)	120.5(6)
C(41)-C(40)-C(53)	106.1(4)	C(17A)-C(18A)-C(13A)	123.4(6)
C(47)-C(40)-C(53)	113.9(4)	C(24A)-C(19A)-C(20A)	113.9(5)
C(41)-C(40)-C(39)	109.6(4)	C(24A)-C(19A)-B(1)	122.7(5)
C(47)-C(40)-C(39)	105.8(4)	C(20A)-C(19A)-B(1)	123.3(5)
C(53)-C(40)-C(39)	110.7(4)	C(22A)-C(21A)-C(20A)	120.2(5)
C(42)-C(41)-C(46)	118.2(5)	C(23A)-C(22A)-C(21A)	118.1(6)
C(42)-C(41)-C(40)	123.9(5)	C(22A)-C(23A)-C(24A)	121.0(6)
C(46)-C(41)-C(40)	117.9(5)	C(19A)-C(24A)-C(23A)	123.6(5)
C(41)-C(42)-C(43)	120.4(6)	C(21A)-C(20A)-C(19A)	123.2(5)
C(44)-C(43)-C(42)	120.6(7)	C(1B)-B(2)-C(13B)	109.7(5)
C(45)-C(44)-C(43)	119.0(6)	C(1B)-B(2)-C(19B)	108.7(5)
C(44)-C(45)-C(46)	121.1(7)	C(13B)-B(2)-C(19B)	111.0(6)
C(45)-C(46)-C(41)	120.7(6)	C(1B)-B(2)-C(7B)	108.8(6)
C(48)-C(47)-C(52)	117.4(5)	C(13B)-B(2)-C(7B)	107.5(6)
C(48)-C(47)-C(40)	121.4(5)	C(19B)-B(2)-C(7B)	111.1(5)
C(52)-C(47)-C(40)	121.1(5)	C(6B)-C(1B)-C(2B)	114.3(6)

C(6B)-C(1B)-B(2)	123.7(6)	C(17B)-C(16B)-C(15B)	118.7(9)
C(2B)-C(1B)-B(2)	121.5(7)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	119.9(8)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	124.7(9)	C(17B)-C(18B)-C(13B)	123.9(8)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	119.2(9)	C(20B)-C(19B)-C(24B)	113.2(7)
C(3B)-C(4B)-C(5B)	119.7(8)	C(20B)-C(19B)-B(2)	123.3(8)
C(6B)-C(5B)-C(4B)	118.7(9)	C(24B)-C(19B)-B(2)	123.4(7)
C(1B)-C(6B)-C(5B)	123.3(8)	C(21B)-C(20B)-C(19B)	124.6(9)
C(8B)-C(7B)-C(12B)	112.9(7)	C(22B)-C(21B)-C(20B)	120.1(9)
C(8B)-C(7B)-B(2)	122.0(7)	C(21B)-C(22B)-C(23B)	119.2(9)
C(12B)-C(7B)-B(2)	124.8(6)	C(22B)-C(23B)-C(24B)	119.9(9)
C(9B)-C(8B)-C(7B)	124.1(8)	C(23B)-C(24B)-C(19B)	123.0(8)
C(10B)-C(9B)-C(8B)	120.8(8)	O(1S)-C(1S)-N(1S)	126.0(7)
C(9B)-C(10B)-C(11B)	117.9(8)	C(1S)-N(1S)-C(2S)	119.6(6)
C(10B)-C(11B)-C(12B)	120.6(7)	C(1S)-N(1S)-C(3S)	122.1(6)
C(11B)-C(12B)-C(7B)	123.6(7)	C(2S)-N(1S)-C(3S)	118.3(6)
C(18B)-C(13B)-C(14B)	112.7(7)	N(1X)-C(1X)-O(1X)	101.0(12)
C(18B)-C(13B)-B(2)	123.5(7)	C(2X)-N(1X)-C(1X)	113.5(13)
C(14B)-C(13B)-B(2)	123.7(6)	C(2X)-N(1X)-C(3X)	117.4(14)
C(15B)-C(14B)-C(13B)	124.0(7)	C(1X)-N(1X)-C(3X)	129.0(14)
C(14B)-C(15B)-C(16B)	120.8(9)		

Table S-29. Anisotropic Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **3-Ph-BPh₄**.

	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
Fe(1)	71(1)	86(1)	58(1)	3(1)	-5(1)	11(1)
Fe(2)	70(1)	73(1)	58(1)	0(1)	-2(1)	6(1)
O(1)	74(2)	79(2)	64(2)	1(2)	-4(2)	14(2)
O(2)	72(2)	97(2)	62(2)	-1(2)	-3(2)	6(2)
O(3)	73(2)	93(2)	52(2)	1(2)	-6(1)	6(2)
O(4)	80(2)	83(2)	59(2)	2(2)	-3(2)	4(2)
O(5)	71(2)	76(2)	60(2)	-1(2)	-4(2)	-3(2)
N(1)	81(3)	103(3)	63(2)	-1(2)	-6(2)	11(2)
N(2)	85(3)	120(4)	66(2)	6(2)	3(2)	22(3)
N(3)	93(3)	101(3)	70(3)	14(2)	-9(2)	13(3)
N(4)	74(3)	82(3)	63(2)	3(2)	-1(2)	-1(2)
N(5)	88(3)	77(3)	71(2)	4(2)	-6(2)	4(2)
N(6)	83(3)	83(3)	72(3)	-5(2)	2(2)	7(2)
C(1)	154(6)	135(6)	66(3)	15(4)	14(4)	30(5)
C(2)	156(7)	133(6)	75(4)	14(4)	2(4)	-3(5)
C(3)	102(5)	112(5)	167(7)	26(5)	-26(5)	33(4)
C(4)	103(5)	175(8)	140(6)	59(6)	11(5)	49(5)
C(5)	92(4)	168(7)	92(4)	-29(4)	10(4)	-17(4)
C(6)	85(4)	135(5)	117(5)	-22(4)	-17(4)	5(4)
C(7)	96(4)	107(4)	79(3)	-14(3)	-2(3)	13(3)
C(8)	113(5)	101(4)	101(4)	26(3)	-7(4)	8(4)
C(9)	82(4)	146(5)	80(4)	5(3)	4(3)	22(4)
C(10)	79(3)	93(4)	79(3)	6(3)	-7(3)	2(3)
C(11)	99(4)	91(4)	80(3)	3(3)	-16(3)	-9(3)
C(12)	112(5)	75(3)	100(4)	2(3)	-2(4)	12(3)
C(13)	101(4)	87(4)	98(4)	-21(3)	-1(3)	16(3)
C(14)	86(4)	109(4)	70(3)	-5(3)	9(3)	14(3)
C(15)	97(4)	105(4)	64(3)	1(3)	0(3)	5(3)
C(16)	96(4)	90(4)	85(4)	14(3)	-13(3)	9(3)
C(17)	104(4)	98(4)	80(3)	14(3)	0(3)	-6(3)
C(18)	77(4)	109(4)	93(4)	-16(3)	2(3)	14(3)
C(19)	73(3)	72(3)	71(3)	7(2)	-6(3)	2(2)
C(20)	62(3)	96(4)	66(3)	4(2)	8(2)	13(3)
C(21)	87(4)	96(4)	62(3)	-3(3)	0(3)	16(3)
C(22)	90(4)	124(5)	107(5)	-18(4)	11(3)	37(4)
C(23)	125(6)	149(7)	120(6)	-13(5)	13(5)	58(6)
C(24)	183(9)	116(6)	97(5)	1(4)	3(5)	69(6)
C(25)	157(7)	102(5)	82(4)	14(3)	6(4)	23(5)
C(26)	114(5)	90(4)	74(3)	7(3)	6(3)	24(4)
C(27)	70(3)	128(5)	66(3)	10(3)	8(2)	3(3)
C(28)	97(4)	148(6)	95(4)	44(4)	15(3)	29(4)
C(29)	116(6)	183(8)	123(6)	70(6)	17(5)	33(5)
C(30)	136(7)	233(12)	85(5)	53(7)	8(5)	-8(7)
C(31)	147(7)	190(9)	69(4)	15(5)	-2(4)	-33(6)
C(32)	106(5)	136(5)	75(4)	2(4)	7(3)	-21(4)
C(33)	68(3)	93(4)	78(3)	-3(3)	-1(3)	8(3)
C(34)	82(4)	97(4)	98(4)	0(3)	9(3)	7(3)
C(35)	100(5)	99(4)	139(6)	-16(4)	13(4)	-2(4)
C(36)	82(4)	125(6)	136(6)	-42(5)	-3(4)	10(4)
C(37)	80(4)	142(6)	97(4)	-24(4)	-9(3)	20(4)
C(38)	71(3)	113(4)	82(4)	-3(3)	-4(3)	9(3)
C(39)	62(3)	76(3)	64(3)	3(2)	6(2)	14(2)

Payne and Hagen

Supporting Information

76

C(40)	74(3)	78(3)	60(3)	0(2)	2(2)	8(2)
C(41)	82(4)	79(3)	65(3)	2(2)	-7(2)	10(3)
C(42)	82(4)	97(4)	79(3)	10(3)	2(3)	17(3)
C(43)	97(4)	125(5)	100(4)	6(4)	-3(3)	35(4)
C(44)	138(7)	118(5)	99(4)	10(4)	-17(4)	49(5)
C(45)	137(6)	92(4)	111(5)	21(4)	-12(5)	16(4)
C(46)	110(5)	83(4)	96(4)	14(3)	-6(3)	10(3)
C(47)	76(3)	79(3)	66(3)	-3(2)	10(2)	-7(3)
C(48)	90(4)	95(4)	72(3)	-4(3)	3(3)	-8(3)
C(49)	120(5)	117(5)	70(4)	-4(3)	-1(3)	-25(4)
C(50)	114(5)	107(5)	97(5)	-21(4)	29(4)	-13(4)
C(51)	94(4)	99(4)	103(5)	-13(3)	26(4)	-2(3)
C(52)	90(4)	86(3)	80(3)	-7(3)	14(3)	4(3)
C(53)	71(3)	80(3)	71(3)	-3(2)	-4(2)	-1(3)
C(54)	86(4)	86(3)	76(3)	-10(3)	-1(3)	2(3)
C(55)	112(5)	100(4)	88(4)	-18(3)	-6(4)	-1(4)
C(56)	106(5)	110(5)	121(5)	-32(4)	-24(4)	-3(4)
C(57)	83(4)	121(5)	135(6)	-31(4)	-8(4)	-8(4)
C(58)	79(4)	94(4)	99(4)	-11(3)	9(3)	-5(3)
B(1)	82(4)	67(3)	76(4)	3(3)	0(3)	1(3)
C(1A)	89(4)	67(3)	68(3)	4(2)	-2(3)	-2(3)
C(2A)	109(4)	80(3)	84(4)	-4(3)	6(3)	-7(3)
C(3A)	122(5)	84(4)	102(4)	1(3)	0(4)	-23(3)
C(4A)	134(6)	84(4)	103(5)	-13(3)	-10(4)	-22(4)
C(5A)	120(5)	89(4)	84(4)	-9(3)	-4(3)	6(4)
C(6A)	92(4)	78(3)	76(3)	-1(3)	-1(3)	0(3)
C(7A)	89(4)	72(3)	64(3)	0(2)	4(3)	2(3)
C(8A)	84(4)	91(4)	81(3)	-4(3)	-5(3)	6(3)
C(9A)	90(4)	121(5)	88(4)	-2(4)	-1(3)	17(4)
C(10A)	111(5)	108(5)	78(4)	5(3)	3(3)	37(4)
C(11A)	114(5)	82(4)	82(4)	1(3)	7(3)	25(3)
C(12A)	92(4)	80(3)	78(3)	2(3)	-3(3)	8(3)
C(13A)	93(4)	70(3)	78(3)	3(3)	-3(3)	-6(3)
C(14A)	118(5)	88(4)	76(4)	1(3)	-7(3)	7(3)
C(15A)	155(6)	106(5)	80(4)	-6(3)	-6(4)	4(4)
C(16A)	152(6)	122(6)	80(4)	15(4)	-18(4)	-6(5)
C(17A)	136(6)	100(5)	100(5)	31(4)	-20(4)	-2(4)
C(18A)	111(4)	85(4)	81(4)	17(3)	-6(3)	2(3)
C(19A)	91(4)	62(3)	68(3)	-2(2)	-8(3)	2(3)
C(21A)	105(4)	70(3)	76(3)	5(2)	4(3)	-1(3)
C(22A)	90(4)	91(4)	88(4)	-4(3)	10(3)	3(3)
C(23A)	86(4)	106(4)	108(4)	17(4)	1(3)	20(3)
C(24A)	102(4)	83(4)	101(4)	23(3)	1(3)	20(3)
C(20A)	87(4)	74(3)	68(3)	2(2)	-5(3)	3(3)
B(2)	96(5)	139(6)	76(4)	-4(4)	-9(4)	4(5)
C(1B)	103(5)	124(5)	84(4)	1(4)	-9(3)	-6(4)
C(2B)	131(6)	205(8)	84(5)	-1(5)	-10(4)	33(6)
C(3B)	170(8)	221(10)	82(5)	-8(5)	-21(5)	19(8)
C(4B)	219(11)	137(7)	102(6)	21(5)	-51(7)	-28(7)
C(5B)	227(11)	113(6)	150(8)	23(6)	-70(8)	10(6)
C(6B)	169(7)	105(5)	108(5)	4(4)	-33(5)	4(5)
C(7B)	87(4)	147(6)	83(4)	0(4)	-10(3)	7(4)
C(8B)	94(5)	185(8)	139(6)	-47(6)	21(5)	-15(5)
C(9B)	103(6)	193(9)	147(7)	-43(7)	19(5)	4(6)
C(10B)	120(6)	147(7)	106(5)	-4(4)	-3(5)	41(5)
C(11B)	119(6)	117(5)	99(4)	16(4)	-6(4)	15(4)
C(12B)	105(5)	128(5)	84(4)	24(4)	-3(3)	12(4)
C(13B)	95(4)	142(6)	79(4)	7(4)	-6(3)	16(4)

C(14B)	138(6)	109(5)	98(4)	10(4)	-3(4)	11(4)
C(15B)	185(9)	122(6)	133(7)	16(5)	-6(6)	-1(6)
C(16B)	140(7)	153(8)	157(8)	43(7)	14(6)	13(6)
C(17B)	134(7)	224(11)	105(6)	55(7)	13(5)	18(7)
C(18B)	116(6)	227(10)	88(5)	31(5)	-6(4)	-14(6)
C(19B)	103(5)	152(6)	68(3)	-6(4)	-1(3)	7(5)
C(20B)	109(6)	167(7)	103(5)	-11(5)	5(4)	11(5)
C(21B)	102(6)	184(9)	114(6)	-25(6)	9(5)	-3(6)
C(22B)	96(6)	202(10)	104(6)	-46(6)	-1(5)	13(7)
C(23B)	117(6)	192(9)	93(5)	-35(5)	-15(4)	38(6)
C(24B)	101(5)	163(7)	76(4)	-19(4)	-6(3)	11(5)
O(1S)	174(5)	101(4)	173(5)	11(3)	28(4)	9(3)
C(1S)	112(5)	102(5)	126(6)	-6(4)	-2(4)	20(4)
N(1S)	99(4)	96(4)	111(4)	-9(3)	8(3)	16(3)
C(2S)	147(7)	145(7)	144(7)	-34(5)	30(5)	10(5)
C(3S)	141(7)	129(6)	166(7)	25(6)	17(6)	20(5)
O(1X)	370(14)	136(5)	208(8)	4(5)	-38(8)	77(7)
C(1X)	326(25)	470(35)	304(24)	-235(25)	129(20)	-169(25)
N(1X)	140(5)	93(4)	116(4)	9(3)	12(4)	12(3)
C(2X)	137(9)	518(32)	348(21)	289(24)	-7(11)	6(13)
C(3X)	199(13)	105(8)	774(43)	8(14)	-62(18)	28(8)

*The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

Table S-30. Calculated Hydrogen Atom Coordinates ($\times 10^4$) and Temperature Factors ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **3-Ph-BPh₄**

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	2186(6)	2800(5)	763(2)	140
H(1B)	1203(6)	2484(5)	406(2)	140
H(2A)	471(6)	3640(5)	612(2)	147
H(2B)	1642(6)	4032(5)	611(2)	147
H(3A)	40(6)	4712(5)	1735(3)	150
H(3B)	-182(6)	4664(5)	1132(3)	150
H(4A)	-1029(6)	3372(6)	1119(3)	161
H(4B)	-1373(6)	3858(6)	1636(3)	161
H(5A)	-698(5)	1516(5)	1695(3)	145
H(5B)	-1438(5)	1948(5)	1319(3)	145
H(6A)	-314(5)	2113(5)	738(3)	137
H(6B)	-136(5)	1183(5)	948(3)	137
H(7A)	1384(5)	966(4)	1388(2)	142
H(7B)	2360(5)	1571(4)	1208(2)	142
H(7C)	1572(5)	1056(4)	790(2)	142
H(8A)	1731(5)	5093(4)	1784(2)	157
H(8B)	1664(5)	5293(4)	1192(2)	157
H(8C)	2499(5)	4698(4)	1387(2)	157
H(9A)	-852(4)	2343(5)	2441(2)	153
H(9B)	-1793(4)	2728(5)	2173(2)	153
H(9C)	-905(4)	3386(5)	2461(2)	153
H(10A)	4623(4)	3939(4)	3406(2)	101
H(10B)	4586(4)	4256(4)	4000(2)	101
H(11A)	4600(5)	5438(4)	3430(2)	110
H(11B)	3691(5)	5412(4)	3827(2)	110
H(12A)	2650(5)	6218(4)	3275(2)	115
H(12B)	1906(5)	5596(4)	2879(2)	115
H(13A)	1094(5)	5615(4)	3651(2)	115
H(13B)	2102(5)	5426(4)	3956(2)	115
H(14A)	1185(4)	3236(4)	4005(2)	106
H(14B)	1185(4)	4157(4)	4336(2)	106
H(15A)	2940(4)	4436(4)	4325(2)	107
H(15B)	2723(4)	3425(4)	4457(2)	107
H(16A)	2928(4)	2237(4)	3808(2)	136
H(16B)	3985(4)	2651(4)	4079(2)	136
H(16C)	3906(4)	2466(4)	3470(2)	136
H(17A)	4278(5)	4908(4)	2536(2)	143
H(17B)	4029(5)	5902(4)	2652(2)	143
H(17C)	3247(5)	5216(4)	2312(2)	143
H(18A)	156(4)	4454(4)	3082(2)	141
H(18B)	-161(4)	4396(4)	3667(2)	141
H(18C)	51(4)	3523(4)	3332(2)	141
H(22A)	6273(5)	2127(5)	1640(2)	128
H(23A)	6592(7)	661(7)	1647(3)	155
H(24A)	5312(9)	-441(6)	1824(3)	154
H(25A)	3677(7)	-62(5)	2011(2)	135
H(26A)	3350(5)	1427(4)	2029(2)	110
H(28A)	4254(5)	4473(5)	1428(3)	132
H(29A)	4001(6)	4895(7)	590(4)	164
H(30A)	3995(7)	3842(9)	-106(3)	181
H(31A)	4339(7)	2432(8)	30(3)	167

H(32A)	4595(5)	1987(5)	863(2)	130
H(34A)	6024(4)	4285(4)	1543(2)	111
H(35A)	7416(5)	5055(5)	2007(3)	137
H(36A)	7747(5)	4753(5)	2861(3)	140
H(37A)	6733(5)	3622(5)	3236(3)	129
H(38A)	5362(4)	2828(4)	2762(2)	107
H(42A)	2704(4)	1095(4)	2931(2)	102
H(43A)	3865(5)	91(5)	3120(2)	126
H(44A)	3317(7)	-1202(5)	3523(3)	139
H(45A)	1598(7)	-1520(4)	3690(3)	135
H(46A)	427(5)	-533(4)	3506(2)	115
H(48A)	1165(4)	970(4)	4092(2)	105
H(49A)	454(6)	1578(5)	4844(2)	127
H(50A)	-975(6)	2334(5)	4799(3)	130
H(51A)	-1689(5)	2543(4)	3992(3)	120
H(52A)	-1004(4)	1950(4)	3249(2)	103
H(54A)	837(4)	185(3)	2149(2)	101
H(55A)	-312(5)	-618(4)	1547(2)	123
H(56A)	-2058(6)	-840(4)	1733(3)	139
H(57A)	-2612(5)	-348(5)	2529(3)	140
H(58A)	-1452(4)	448(4)	3136(2)	111
H(2AA)	7889(5)	-1315(4)	3835(2)	111
H(3AA)	8686(5)	-26(4)	4259(3)	127
H(4AA)	8252(6)	364(4)	5109(3)	133
H(5AA)	7046(5)	-564(4)	5521(2)	118
H(6AA)	6228(4)	-1837(3)	5078(2)	100
H(8AA)	8488(4)	-2651(4)	4532(2)	103
H(9AA)	9570(5)	-3707(5)	4692(2)	120
H(10C)	9049(5)	-5215(5)	4491(2)	116
H(11C)	7437(5)	-5635(4)	4108(2)	110
H(12C)	6352(4)	-4574(4)	3935(2)	101
H(14C)	6691(5)	-3775(4)	3175(2)	113
H(15C)	6336(6)	-3583(5)	2313(2)	138
H(16D)	5764(6)	-2280(5)	2063(3)	144
H(17D)	5448(6)	-1190(5)	2695(3)	135
H(18D)	5830(5)	-1349(4)	3551(2)	111
H(21A)	4099(5)	-4320(3)	5161(2)	101
H(22B)	2684(5)	-3616(4)	4907(2)	109
H(23B)	2923(5)	-2536(4)	4317(2)	119
H(24B)	4511(5)	-2173(4)	3975(2)	113
H(20A)	5699(4)	-3936(3)	4825(2)	92
H(2BA)	-1291(6)	1495(6)	-1519(3)	168
H(3BA)	-1907(8)	1589(8)	-2350(3)	190
H(4BA)	-3256(10)	2420(7)	-2494(4)	188
H(5BA)	-3905(9)	3252(6)	-1792(4)	197
H(6BA)	-3193(7)	3195(5)	-963(3)	155
H(8BA)	-3355(6)	2669(6)	59(3)	172
H(9BA)	-3674(7)	3907(7)	562(3)	181
H(10D)	-2474(7)	5153(6)	653(3)	147
H(11D)	-912(6)	5103(5)	245(3)	134
H(12D)	-585(5)	3853(5)	-253(2)	126
H(14D)	-3151(6)	789(5)	-1001(3)	138
H(15D)	-4118(8)	-391(6)	-695(4)	177
H(16E)	-4030(8)	-671(7)	175(4)	178
H(17E)	-2956(8)	283(8)	732(3)	183
H(18E)	-1968(6)	1481(7)	422(3)	174
H(20B)	9(6)	3098(6)	-946(3)	153
H(21B)	1724(7)	2899(8)	-973(3)	163