

Crystallographic data for Fe[OSi(O^tBu)₃]₃(THF).

Crystal Parameters

formula	FeSi ₃ O ₁₄ C ₄₀ H ₈₉
formula weight	934.24
cryst color, habit	yellow, blocky
cryst size, mm	0.40 x 0.25 x 0.15 mm
crystal system	monoclinic
space group	P2 ₁ /c
<i>a</i> , Å	25.7175(3)
<i>b</i> , Å	18.2111(2)
<i>c</i> , Å	26.5506(3)
β , deg	95.349(1)
volume, Å ³	11010.7(3)
<i>Z</i>	8
ρ (calc), g cm ⁻³	1.127
μ (Mo K α), cm ⁻¹	3.91
temp, °C	-102

Data Collection

diffractometer	Siemens SMART
radiation	MoK α (λ = 0.71073 Å)
scan type	ω (0.3° per frame)
scan rate	30.0 sec per frame
rflns. collected	45137
unique rflns.	16240 (R_{int} = 0.051)
no. observations	8581 ($I > 3.00\sigma(I)$)

Refinement

rfln./param ratio	8.69
$R(F)$, %	9.1
$R(wF)$, %	10.9
GOF	3.55
max./min. peak in	0.92; -0.57
final diff. map, e Å ⁻³	

Atomic coordinates and B_{iso}/B_{eq} for the structure of $Fe[OSi(O^tBu)_3]_3(THF)$.

atom	x	y	z	B_{eq}
Fe(1)	-0.15995(5)	0.20561(7)	0.10091(5)	2.78(3)
Fe(2)	0.32058(5)	0.27194(8)	0.17227(6)	3.07(3)
Si(1)	-0.2778(1)	0.2670(2)	0.1067(1)	3.16(6)
Si(2)	-0.0423(1)	0.1768(1)	0.2226(1)	2.91(6)
Si(3)	-0.1779(1)	0.1079(1)	-0.0113(1)	3.07(6)
Si(4)	0.4369(1)	0.2318(2)	0.1561(1)	3.07(6)
Si(5)	0.2156(1)	0.3855(1)	0.0833(1)	2.85(6)
Si(6)	0.3496(1)	0.2723(1)	0.3074(1)	2.98(6)
O(1)	-0.2169(3)	0.2353(4)	0.1174(3)	5.5(2)
O(2)	-0.3042(4)	0.3118(5)	0.0498(3)	6.9(3)
O(3)	-0.3244(6)	0.1949(7)	0.0801(6)	4.7(3)
O(4)	-0.3137(6)	0.2240(8)	0.1279(6)	5.4(3)
O(5)	-0.2868(5)	0.2953(7)	0.1588(5)	4.2(3)
O(6)	-0.2601(6)	0.3428(8)	0.1485(6)	5.3(3)
O(7)	-0.0932(3)	0.1709(4)	0.1597(3)	4.3(2)
O(8)	-0.0620(3)	0.1584(4)	0.2704(3)	4.9(2)
O(9)	-0.0239(3)	0.2621(4)	0.2311(3)	4.7(2)
O(10)	0.0112(3)	0.1235(4)	0.2329(3)	4.3(2)
O(11)	-0.1847(3)	0.1529(4)	0.0358(3)	4.1(2)
O(12)	-0.1477(3)	0.0281(4)	0.0092(3)	4.7(2)
O(13)	-0.1324(3)	0.1564(4)	-0.0244(3)	5.1(2)
O(14)	-0.2404(3)	0.0948(4)	-0.0660(3)	4.2(2)
O(15)	-0.1344(3)	0.3000(4)	0.0812(3)	5.1(2)
O(16)	0.3919(7)	0.2611(10)	0.1773(7)	6.0(4)
O(17)	0.3792(6)	0.2307(9)	0.1588(7)	4.9(3)
O(18)	0.4056(9)	0.168(1)	0.1118(8)	8.1(5)
O(19)	0.4442(9)	0.168(1)	0.1171(8)	7.9(5)
O(20)	0.4977(7)	0.2138(9)	0.2049(7)	7.1(4)
O(21)	0.486(1)	0.213(2)	0.223(1)	7.7(7)
O(22)	0.4503(8)	0.296(1)	0.1245(8)	8.5(5)
O(23)	0.439(1)	0.319(1)	0.143(1)	7.8(6)
O(24)	0.2703(2)	0.3336(4)	0.1184(3)	4.1(2)
O(25)	0.2091(3)	0.4057(3)	0.0208(2)	3.8(2)
O(26)	0.2181(3)	0.4631(4)	0.1140(3)	4.7(2)
O(27)	0.1587(2)	0.3429(4)	0.0790(3)	3.9(2)
O(28)	0.3303(3)	0.2886(4)	0.2427(3)	5.2(2)
O(29)	0.3627(4)	0.1859(4)	0.3172(3)	5.4(2)
O(30)	0.3127(6)	0.3089(8)	0.3362(6)	4.4(3)
O(31)	0.2860(6)	0.2721(9)	0.3112(6)	5.2(3)
O(32)	0.4179(6)	0.3004(8)	0.3456(6)	4.5(3)
O(33)	0.3887(5)	0.3324(7)	0.3507(5)	3.7(3)
O(34)	0.2744(3)	0.1776(4)	0.1526(3)	4.7(2)
C(1)	-0.3530(5)	0.3632(6)	0.0207(4)	4.9(3)
C(2)	-0.387(1)	0.330(1)	-0.041(1)	9.6(7)
C(3)	-0.364(2)	0.358(3)	-0.047(2)	7(1)
C(4)	-0.3211(8)	0.437(1)	0.0256(8)	7.1(5)
C(5)	-0.348(2)	0.433(3)	0.053(2)	8(1)
C(6)	-0.3945(8)	0.369(1)	0.0481(8)	6.0(4)
C(7)	-0.408(2)	0.322(3)	0.028(2)	6.4(10)

Atomic coordinates and B_{iso}/B_{eq} for the structure of $Fe[OSi(O^tBu)_3]_3(THF)$. (continued)

atom	x	y	z	B_{eq}
C(8)	-0.3339(6)	0.1380(8)	0.1105(7)	7.8(5)
C(9)	-0.367(1)	0.144(1)	0.1451(9)	13.4(9)
C(10)	-0.276(1)	0.099(1)	0.154(1)	8.4(6)
C(11)	-0.292(2)	0.080(2)	0.112(2)	8.5(10)
C(12)	-0.368(2)	0.074(2)	0.056(2)	10(1)
C(13)	-0.388(2)	0.130(2)	0.049(2)	10.9(10)
C(14)	-0.2384(6)	0.3461(10)	0.2100(5)	7.0(4)
C(15)	-0.2866(6)	0.3663(9)	0.2283(7)	9.2(5)
C(16)	-0.1986(6)	0.2789(8)	0.2475(5)	8.2(4)
C(17)	-0.206(2)	0.399(2)	0.193(2)	10(1)
C(18)	-0.192(1)	0.424(2)	0.226(1)	8.3(8)
C(19)	-0.0738(5)	0.0905(6)	0.2921(5)	4.7(3)
C(20)	-0.1111(6)	0.0388(8)	0.2437(6)	8.4(4)
C(21)	-0.0101(6)	0.0575(8)	0.3345(6)	2.3(4)
C(22)	-0.1154(10)	0.109(1)	0.3172(10)	6.3(5)
C(23)	-0.088(1)	0.127(2)	0.342(1)	5.5(7)
C(24)	0.0113(5)	0.3057(6)	0.2821(5)	5.5(3)
C(25)	0.0339(6)	0.3708(7)	0.2591(6)	8.0(4)
C(26)	0.0622(5)	0.2583(7)	0.3251(5)	7.1(3)
C(27)	-0.0267(6)	0.3302(8)	0.3081(6)	8.2(4)
C(28)	0.0436(4)	0.1090(6)	0.2026(4)	4.5(3)
C(29)	0.1036(5)	0.0787(8)	0.2488(6)	7.4(4)
C(30)	0.0512(5)	0.1786(7)	0.1747(6)	7.0(4)
C(31)	0.0080(6)	0.0503(7)	0.1552(6)	7.3(4)
C(32)	-0.1616(5)	-0.0353(6)	0.0331(5)	4.8(3)
C(33)	-0.1124(6)	-0.0936(7)	0.0405(7)	7.5(4)
C(34)	-0.2228(5)	-0.0666(7)	-0.0083(7)	8.1(4)
C(35)	-0.1555(8)	-0.0166(8)	0.0909(6)	8.3(5)
C(36)	-0.0973(5)	0.1400(7)	-0.0527(4)	4.4(3)
C(37)	-0.1292(6)	0.0836(7)	-0.1022(5)	7.3(4)
C(38)	-0.0923(6)	0.2150(7)	-0.0780(5)	6.7(4)
C(39)	-0.0375(5)	0.1117(8)	-0.0064(6)	7.4(4)
C(40)	-0.2919(4)	0.1416(6)	-0.0933(4)	4.1(3)
C(41)	-0.3311(5)	0.1002(7)	-0.1498(5)	5.7(3)
C(42)	-0.2738(6)	0.2172(6)	-0.1030(6)	7.7(4)
C(43)	-0.3226(5)	0.1419(7)	-0.0549(5)	6.1(3)
C(44)	-0.171(1)	0.365(2)	0.053(1)	7.2(6)
C(45)	-0.138(1)	0.368(2)	0.112(1)	7.4(7)
C(46)	-0.131(1)	0.427(2)	0.050(1)	7.7(7)
C(47)	-0.111(1)	0.427(1)	0.092(1)	6.4(6)
C(48)	-0.089(1)	0.381(1)	0.039(1)	6.5(6)
C(49)	-0.067(1)	0.384(2)	0.081(2)	9.1(8)
C(50)	-0.100(2)	0.303(2)	0.049(2)	8.8(9)
C(51)	-0.078(1)	0.308(1)	0.078(1)	5.2(6)
C(52)	0.4097(5)	0.1385(7)	0.0631(5)	5.7(3)
C(53)	0.3658(9)	0.183(1)	0.0173(8)	14.3(8)
C(54)	0.4674(8)	0.130(1)	0.0635(10)	7.1(9)
C(55)	0.394(1)	0.052(2)	0.060(1)	8.4(9)

Atomic coordinates and B_{iso}/B_{eq} for the structure of $Fe[OSi(O^tBu)_3]_3(THF)$. (continued)

atom	x	y	z	B_{eq}
C(56)	0.385(1)	0.061(2)	0.082(1)	8.9(9)
C(57)	0.5217(6)	0.1582(8)	0.2537(5)	6.9(4)
C(58)	0.590(2)	0.162(2)	0.258(2)	11.1(10)
C(59)	0.556(2)	0.112(2)	0.232(2)	10.8(10)
C(60)	0.524(4)	0.073(5)	0.254(3)	15(2)
C(61)	0.482(1)	0.100(2)	0.252(1)	13.0(9)
C(62)	0.567(1)	0.185(2)	0.317(1)	9.5(9)
C(63)	0.525(2)	0.221(2)	0.302(2)	12(1)
C(64)	0.4837(5)	0.3650(7)	0.1415(6)	6.0(4)
C(65)	0.530(2)	0.324(2)	0.124(2)	8.4(10)
C(66)	0.545(1)	0.353(2)	0.158(1)	9.6(7)
C(67)	0.464(2)	0.392(2)	0.076(2)	8.4(9)
C(68)	0.4491(10)	0.427(1)	0.0987(10)	7.2(5)
C(69)	0.457(2)	0.408(3)	0.170(2)	12(1)
C(70)	0.504(1)	0.397(2)	0.204(1)	10.5(8)
C(71)	0.2204(5)	0.3606(6)	-0.0173(4)	4.3(3)
C(72)	0.2866(4)	0.3603(6)	0.0021(5)	5.2(3)
C(73)	0.1985(6)	0.2808(6)	-0.0197(5)	6.2(4)
C(74)	0.1867(6)	0.4003(7)	-0.0764(4)	6.4(4)
C(75)	0.2590(5)	0.5206(6)	0.1341(6)	5.8(3)
C(76)	0.3182(8)	0.498(1)	0.1343(8)	6.7(4)
C(77)	0.296(2)	0.537(2)	0.105(2)	6.3(10)
C(78)	0.228(1)	0.576(1)	0.079(1)	8.8(6)
C(79)	0.228(2)	0.597(2)	0.132(2)	8.2(9)
C(80)	0.263(1)	0.558(1)	0.186(1)	6.0(6)
C(81)	0.287(1)	0.511(2)	0.202(1)	7.6(7)
C(82)	0.0981(4)	0.3651(6)	0.0599(5)	4.5(3)
C(83)	0.0642(5)	0.2922(8)	0.0414(8)	8.9(5)
C(84)	0.0781(6)	0.4240(9)	0.0151(7)	9.5(5)
C(85)	0.0956(6)	0.390(1)	0.1165(7)	9.1(5)
C(86)	0.3775(6)	0.1360(6)	0.3651(5)	5.9(3)
C(87)	0.382(1)	0.175(1)	0.418(1)	7.1(6)
C(88)	0.416(2)	0.182(2)	0.424(2)	7.8(9)
C(89)	0.3154(10)	0.096(1)	0.3508(9)	7.4(5)
C(90)	0.350(2)	0.059(3)	0.343(2)	10(1)
C(91)	0.442(1)	0.110(2)	0.381(1)	7.7(7)
C(92)	0.412(1)	0.073(2)	0.358(1)	7.2(7)
C(93)	0.2484(5)	0.3276(7)	0.3097(6)	5.7(3)
C(94)	0.191(2)	0.314(3)	0.256(2)	12(1)
C(95)	0.211(1)	0.262(2)	0.279(1)	9.9(7)
C(96)	0.221(2)	0.307(2)	0.350(2)	8.7(10)
C(97)	0.254(1)	0.348(2)	0.366(1)	9.1(7)
C(98)	0.268(2)	0.398(3)	0.334(2)	7(1)
C(99)	0.2430(9)	0.393(1)	0.2695(9)	8.3(5)
C(100)	0.4428(4)	0.3720(6)	0.3586(4)	4.4(3)
C(101)	0.509(3)	0.362(4)	0.406(3)	12(1)
C(102)	0.463(1)	0.396(2)	0.422(1)	11.4(7)
C(103)	0.423(2)	0.431(3)	0.386(2)	9(1)

Atomic coordinates and B_{iso}/B_{eq} for the structure of $Fe[OSi(O^tBu)_3]_3(THF)$. (continued)

atom	x	y	z	B_{eq}
C(104)	0.4204(8)	0.433(1)	0.3154(8)	6.1(4)
C(105)	0.442(2)	0.397(3)	0.302(2)	8(1)
C(106)	0.489(1)	0.325(2)	0.350(1)	13.5(9)
C(107)	0.3034(5)	0.1079(6)	0.1796(5)	5.7(3)
C(108)	0.2557(7)	0.0581(7)	0.1740(7)	8.9(5)
C(109)	0.196(1)	0.106(2)	0.153(1)	7.4(8)
C(110)	0.218(1)	0.107(2)	0.183(1)	7.1(8)
C(111)	0.2117(5)	0.1791(7)	0.1420(8)	7.7(5)

$$B_{eq} = 8/3 \pi^2 (U_{11}(aa^*)^2 + U_{22}(bb^*)^2 + U_{33}(cc^*)^2 + 2U_{12}(aa*bb*)\cos \gamma + 2U_{13}(aa*cc*)\cos \beta + 2U_{23}(bb*cc*)\cos \alpha)$$

Anisotropic Displacement Parameters for the structure of Fe[OSi(O^tBu)₃]₃(THF).

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Fe(1)	0.0348(7)	0.0448(8)	0.0398(8)	-0.0011(6)	0.0146(6)	-0.0019(6)
Fe(2)	0.0317(7)	0.0584(9)	0.0426(8)	0.0048(7)	0.0159(6)	0.0089(7)
Si(1)	0.040(1)	0.055(2)	0.040(2)	0.000(1)	0.019(1)	0.000(1)
Si(2)	0.038(1)	0.043(2)	0.038(2)	-0.004(1)	0.014(1)	0.000(1)
Si(3)	0.043(2)	0.046(2)	0.043(2)	-0.001(1)	0.021(1)	0.006(1)
Si(4)	0.036(1)	0.053(2)	0.045(2)	0.002(1)	0.021(1)	0.007(1)
Si(5)	0.033(1)	0.047(2)	0.041(2)	-0.008(1)	0.013(1)	-0.001(1)
Si(6)	0.046(1)	0.045(2)	0.041(2)	-0.002(1)	0.019(1)	0.003(1)
O(1)	0.054(4)	0.092(6)	0.086(6)	0.018(4)	0.044(4)	-0.003(5)
O(2)	0.110(6)	0.108(7)	0.083(6)	0.044(6)	0.064(5)	0.044(5)
O(7)	0.044(4)	0.068(5)	0.041(4)	0.001(3)	0.005(3)	-0.004(3)
O(8)	0.085(5)	0.049(4)	0.077(5)	0.010(4)	0.049(4)	0.014(4)
O(9)	0.084(5)	0.044(4)	0.068(5)	-0.027(4)	0.028(4)	-0.014(4)
O(10)	0.057(4)	0.060(5)	0.072(5)	0.014(4)	0.031(4)	0.010(4)
O(11)	0.064(4)	0.052(4)	0.046(4)	0.001(4)	0.022(4)	-0.010(3)
O(12)	0.066(4)	0.063(5)	0.063(5)	0.000(4)	0.030(4)	0.007(4)
O(13)	0.065(4)	0.066(5)	0.073(5)	-0.004(4)	0.040(4)	0.011(4)
O(14)	0.052(4)	0.062(5)	0.042(4)	0.005(4)	0.016(3)	-0.005(3)
O(15)	0.070(5)	0.043(4)	0.088(6)	-0.010(4)	0.042(4)	-0.002(4)
O(24)	0.039(4)	0.074(5)	0.051(4)	0.010(3)	0.013(3)	0.018(4)
O(25)	0.057(4)	0.050(4)	0.039(4)	0.005(3)	0.016(3)	0.002(3)
O(26)	0.047(4)	0.064(5)	0.079(5)	-0.023(4)	0.023(4)	-0.029(4)
O(27)	0.040(4)	0.056(4)	0.065(5)	-0.004(3)	0.021(3)	-0.002(4)
O(28)	0.098(5)	0.060(5)	0.045(4)	0.000(4)	0.028(4)	0.006(4)
O(29)	0.123(6)	0.058(5)	0.056(5)	0.015(5)	0.052(5)	0.012(4)
O(34)	0.064(5)	0.046(4)	0.072(5)	0.001(4)	0.027(4)	-0.006(4)
C(1)	0.075(7)	0.054(7)	0.038(6)	0.019(6)	0.011(6)	0.010(5)
C(8)	0.092(10)	0.10(1)	0.13(1)	-0.029(9)	0.05(1)	0.045(10)
C(9)	0.25(2)	0.22(2)	0.17(2)	-0.13(2)	0.16(2)	-0.07(2)
C(14)	0.078(9)	0.17(2)	0.044(7)	0.054(10)	0.004(7)	-0.049(9)
C(15)	0.10(1)	0.15(2)	0.12(1)	0.00(1)	0.06(1)	-0.07(1)
C(16)	0.12(1)	0.10(1)	0.067(9)	0.044(9)	-0.008(8)	-0.022(8)
C(19)	0.068(7)	0.053(7)	0.084(8)	-0.001(6)	0.051(7)	0.010(6)
C(20)	0.11(1)	0.09(1)	0.11(1)	-0.041(9)	0.040(10)	-0.010(9)
C(21)	0.088(10)	0.11(1)	0.13(1)	0.024(9)	0.036(9)	0.06(1)
C(24)	0.068(7)	0.056(7)	0.062(7)	-0.012(6)	0.017(6)	-0.019(6)
C(25)	0.11(1)	0.078(10)	0.13(1)	-0.053(9)	0.044(10)	-0.018(9)
C(26)	0.090(9)	0.080(9)	0.064(8)	-0.007(8)	-0.014(7)	-0.013(7)
C(27)	0.10(1)	0.11(1)	0.11(1)	-0.020(9)	0.059(10)	-0.046(9)
C(28)	0.048(6)	0.080(8)	0.066(7)	-0.005(6)	0.038(6)	0.000(6)
C(29)	0.069(8)	0.13(1)	0.10(1)	0.048(8)	0.036(8)	0.045(9)
C(30)	0.095(9)	0.072(8)	0.10(1)	-0.001(7)	0.061(8)	0.026(8)
C(31)	0.13(1)	0.068(9)	0.09(1)	-0.029(8)	0.064(9)	-0.032(8)
C(32)	0.091(8)	0.040(6)	0.066(8)	-0.022(6)	0.037(7)	-0.001(6)
C(33)	0.087(9)	0.058(8)	0.14(1)	0.019(7)	0.034(9)	0.019(8)
C(34)	0.062(8)	0.081(10)	0.17(1)	-0.021(7)	0.020(9)	0.012(10)
C(35)	0.22(2)	0.10(1)	0.09(1)	0.00(1)	0.11(1)	0.029(9)

Anisotropic Displacement Parameters for the structure of Fe[OSi(O^tBu)₃]₃(THF).
(continued)

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
C(36)	0.062(7)	0.098(9)	0.047(7)	-0.024(7)	0.037(6)	-0.011(6)
C(37)	0.13(1)	0.084(9)	0.077(9)	-0.033(9)	0.051(9)	-0.021(8)
C(38)	0.12(1)	0.082(9)	0.064(8)	-0.028(8)	0.042(8)	0.011(7)
C(39)	0.067(8)	0.13(1)	0.10(1)	0.025(8)	0.034(8)	0.032(9)
C(40)	0.044(6)	0.057(7)	0.053(7)	0.013(5)	0.011(5)	0.007(5)
C(41)	0.060(7)	0.098(10)	0.054(7)	0.007(7)	0.010(6)	-0.004(7)
C(42)	0.107(10)	0.040(7)	0.13(1)	-0.001(7)	0.044(9)	0.024(7)
C(43)	0.053(7)	0.11(1)	0.074(8)	0.007(7)	0.032(6)	-0.019(8)
C(52)	0.064(7)	0.097(10)	0.047(7)	0.011(7)	0.016(6)	-0.018(7)
C(53)	0.19(2)	0.21(2)	0.13(2)	0.10(2)	0.00(1)	0.07(2)
C(54)	0.12(1)	0.33(3)	0.22(2)	0.08(2)	0.12(2)	0.06(2)
C(57)	0.081(9)	0.11(1)	0.066(8)	0.062(9)	0.027(7)	0.037(8)
C(64)	0.068(8)	0.069(8)	0.12(1)	-0.034(7)	0.056(8)	-0.019(8)
C(71)	0.067(7)	0.057(7)	0.044(6)	0.007(6)	0.023(6)	0.008(5)
C(72)	0.053(6)	0.083(8)	0.081(8)	-0.002(6)	0.037(6)	0.008(7)
C(73)	0.13(1)	0.052(7)	0.091(9)	-0.022(7)	0.063(9)	-0.023(7)
C(74)	0.14(1)	0.082(9)	0.039(7)	0.032(9)	0.031(8)	0.024(6)
C(75)	0.062(7)	0.059(8)	0.10(1)	-0.014(6)	0.029(7)	-0.031(7)
C(82)	0.031(6)	0.072(8)	0.101(10)	-0.006(5)	0.033(6)	-0.010(7)
C(83)	0.043(7)	0.11(1)	0.22(2)	-0.036(8)	0.045(10)	-0.04(1)
C(84)	0.069(9)	0.13(1)	0.18(2)	0.041(9)	0.03(1)	0.09(1)
C(85)	0.076(9)	0.20(2)	0.13(1)	-0.01(1)	0.062(9)	-0.07(1)
C(86)	0.12(1)	0.044(7)	0.084(9)	0.009(7)	0.062(8)	0.018(6)
C(93)	0.057(7)	0.072(8)	0.10(1)	-0.004(6)	0.046(7)	-0.022(7)
C(100)	0.046(6)	0.063(7)	0.057(7)	-0.014(5)	0.019(5)	-0.007(6)
C(107)	0.087(9)	0.042(7)	0.090(9)	0.021(7)	0.024(8)	0.011(6)
C(108)	0.15(1)	0.043(8)	0.15(1)	0.013(9)	0.07(1)	0.000(8)
C(111)	0.064(8)	0.076(10)	0.24(2)	-0.004(7)	0.09(1)	0.02(1)

The general temperature factor expression:

$$\exp(-2\pi^2(a^2U_{11}h^2 + b^2U_{22}k^2 + c^2U_{33}l^2 + 2a*b*U_{12}hk + 2a*c*U_{13}hl + 2b*c*U_{23}kl))$$

Selected Interatomic Distances (Å) and Angles (deg) for Fe[OSi(O^tBu)₃]₃(THF).

Bond Distances

Fe(1)-O(1)	1.795(6)	Fe(1)-O(7)	1.814(6)
Fe(1)-O(11)	1.814(6)	Fe(1)-O(15)	1.994(7)
Fe(2)-O(16)	1.79(2)	Fe(2)-O(17)	1.86(1)
Fe(2)-O(24)	1.806(6)	Fe(2)-O(28)	1.793(7)
Fe(2)-O(34)	2.015(7)	Si(1)-O(1)	1.568(6)
Si(1)-O(2)	1.566(7)	Si(1)-O(3)	1.69(1)
Si(1)-O(4)	1.50(1)	Si(1)-O(5)	1.59(1)
Si(1)-O(6)	1.70(1)	Si(2)-O(7)	1.576(6)
Si(2)-O(8)	1.606(7)	Si(2)-O(9)	1.609(7)
Si(2)-O(10)	1.599(7)	Si(3)-O(11)	1.571(7)
Si(3)-O(12)	1.618(7)	Si(3)-O(13)	1.626(7)
Si(3)-O(14)	1.607(6)	Si(4)-O(16)	1.60(2)
Si(4)-O(17)	1.52(1)	Si(4)-O(18)	1.58(2)
Si(4)-O(19)	1.63(2)	Si(4)-O(20)	1.53(2)
Si(4)-O(21)	1.67(3)	Si(4)-O(22)	1.57(2)
Si(4)-O(23)	1.63(3)	Si(5)-O(24)	1.588(6)
Si(5)-O(25)	1.631(7)	Si(5)-O(26)	1.619(7)
Si(5)-O(27)	1.614(6)	Si(6)-O(28)	1.579(7)
Si(6)-O(29)	1.604(7)	Si(6)-O(30)	1.62(1)
Si(6)-O(31)	1.69(1)	Si(6)-O(32)	1.65(1)
Si(6)-O(33)	1.57(1)		

Bond Angles

O(1)-Fe(1)-O(7)	116.6(3)	O(1)-Fe(1)-O(11)	115.3(3)
O(1)-Fe(1)-O(15)	102.1(3)	O(7)-Fe(1)-O(11)	114.1(3)
O(7)-Fe(1)-O(15)	103.3(3)	O(11)-Fe(1)-O(15)	102.6(3)
O(16)-Fe(2)-O(17)	22.4(6)	O(16)-Fe(2)-O(24)	117.4(6)
O(16)-Fe(2)-O(28)	107.4(6)	O(16)-Fe(2)-O(34)	112.8(6)
O(17)-Fe(2)-O(24)	116.4(5)	O(17)-Fe(2)-O(28)	122.4(5)
O(17)-Fe(2)-O(34)	92.3(5)	O(24)-Fe(2)-O(28)	115.0(3)
O(24)-Fe(2)-O(34)	101.9(3)	O(28)-Fe(2)-O(34)	101.2(3)
Fe(1)-O(1)-Si(1)	157.9(5)	Fe(1)-O(7)-Si(2)	151.2(4)
Fe(1)-O(11)-Si(3)	156.2(4)	Fe(2)-O(16)-Si(4)	153(1)
Fe(2)-O(17)-Si(4)	154(1)	Fe(2)-O(24)-Si(5)	161.4(4)
Fe(2)-O(28)-Si(6)	157.4(5)		