

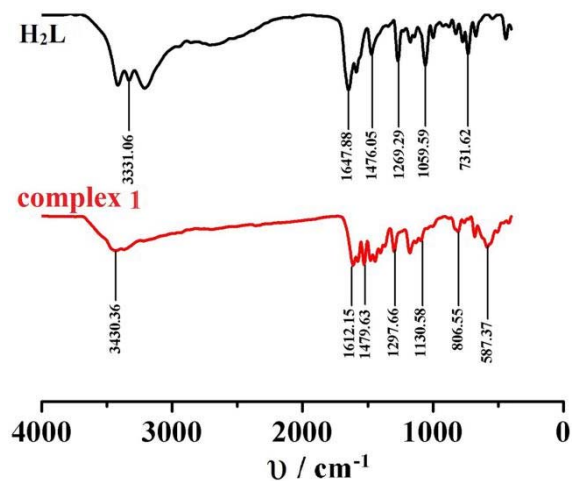
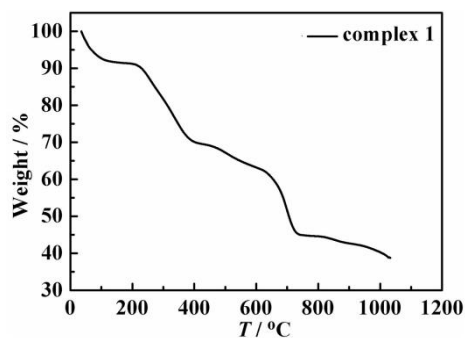


Volume 76 (2020)

Supporting information for article:

Synthesis, structure and magnetism of a new ion type pentanuclear iron cluster

Qianjun Deng, Jiming Wang, Guangzhao Li and Shuhua Zhang

Figure S1. IR curves of **1** and **H₂L**.Figure S2. Thermogravimetric analysis of **1**.Table S1. Selected bond lengths (Å) and angles (°) for **1**.

Fe1 - O1	1.903(3)	Fe2 - O3	1.891(4)	Fe3 - O4	1.890(3)
Fe1 - O2	1.922(3)	Fe2 - O2	1.912(3)	Fe3 - O2	1.872(3)
Fe1 - N21	2.164(5)	Fe2 - N26	2.138(4)	Fe3 - N12	2.135(4)
Fe1 - N29	2.098(4)	Fe2 - N24	2.114(4)	Fe3 - N17	2.123(4)
Fe1 - N18	2.151(4)	Fe2 - N13	2.179(4)	Fe3 - N2	2.095(4)
Fe1 - N1	2.186(4)	Fe2 - N6	2.207(4)	Fe3 - N7	2.118(4)
Fe4 - O5	1.909(3)	Fe4 - N3	2.183(4)	Fe5 - N36	2.135(4)
Fe4 - O4	1.901(3)	Fe4 - N11	2.212(4)	Fe5 - N34	2.095(4)
Fe4 - N31	2.153(4)	Fe5 - O6	1.908(3)	Fe5 - N8	2.160(4)
Fe4 - N39	2.107(4)	Fe5 - O4	1.923(3)	Fe5 - N16	2.212(4)
O1 - Fe1 - O2	174.4(2)	O3 - Fe2 - O2	171.0(2)	O4 - Fe3 - O2	178.8(1)
O1 - Fe1 - N21	95.5(2)	O3 - Fe2 - N26	96.0(2)	O4 - Fe3 - N12	93.5(1)

O2 - Fe1 - N21	83.1(2)	O2 - Fe2 - N26	82.6(2)	O2 - Fe3 - N12	85.4(1)
O1 - Fe1 - N29	90.9(2)	O3 - Fe2 - N24	86.8(2)	O4 - Fe3 - N17	93.7(2)
O2 - Fe1 - N29	83.6(2)	O2 - Fe2 - N24	84.3(2)	O2 - Fe3 - N17	87.5(2)
N21 - Fe1 - N29	86.7(2)	N26 - Fe2 - N24	89.2(2)	N12 - Fe3 - N17	172.9(2)
O1 - Fe1 - N18	96.2(2)	O3 - Fe2 - N13	98.8(2)	O4 - Fe3 - N2	86.3(1)
O2 - Fe1 - N18	85.2(1)	O2 - Fe2 - N13	84.0(1)	O2 - Fe3 - N2	93.4(2)
N21 - Fe1 - N18	168.3(2)	N26 - Fe2 - N13	163.1(2)	N12 - Fe3 - N2	91.0(2)
N29 - Fe1 - N18	92.6(2)	N24 - Fe2 - N13	99.7(2)	N17 - Fe3 - N2	89.5(2)
O1 - Fe1 - N1	86.6(2)	O3 - Fe2 - N6	86.3(2)	O4 - Fe3 - N7	85.9(1)
O2 - Fe1 - N1	98.9(1)	O2 - Fe2 - N6	102.6(2)	O2 - Fe3 - N7	94.5(2)
N21 - Fe1 - N1	90.3(2)	N26 - Fe2 - N6	87.9(2)	N12 - Fe3 - N7	89.2(2)
N29 - Fe1 - N1	175.9(2)	N24 - Fe2 - N6	172.1(2)	N17 - Fe3 - N7	91.3(2)
N18 - Fe1 - N1	91.0(2)	N13 - Fe2 - N6	85.0(2)	N2 - Fe3 - N7	172.1(2)
O5 - Fe4 - O4	175.8(1)	O5 - Fe4 - N11	84.9(1)	N36 - Fe5 - N34	86.0(2)
O5 - Fe4 - N31	98.4(2)	O4 - Fe4 - N11	99.0(1)	O6 - Fe5 - N8	95.6(2)
O4 - Fe4 - N31	83.7(2)	N31 - Fe4 - N11	85.5(2)	O4 - Fe5 - N8	82.9(1)
O5 - Fe4 - N39	91.2(2)	N39 - Fe4 - N11	170.6(2)	N36 - Fe5 - N8	166.3(2)
O4 - Fe4 - N39	85.3(2)	N3 - Fe4 - N11	91.9(2)	N34 - Fe5 - N8	94.8(2)
N31 - Fe4 - N39	86.6(2)	O6 - Fe5 - O4	176.1(1)	O6 - Fe5 - N16	84.9(2)
O5 - Fe4 - N3	94.6(2)	O6 - Fe5 - N36	98.1(2)	O4 - Fe5 - N16	99.1(1)
O4 - Fe4 - N3	83.6(1)	O4 - Fe5 - N36	83.5(2)	N36 - Fe5 - N16	87.8(2)
N31 - Fe4 - N3	166.5(2)	O6 - Fe5 - N34	90.9(2)	N34 - Fe5 - N16	171.9(2)
N39 - Fe4 - N3	96.9(2)	O4 - Fe5 - N34	85.4(1)	N8 - Fe5 - N16	92.4(2)
Fe3 - O4 - Fe5	120.6(2)	Fe4 - O4 - Fe5	118.6(2)	Fe3 - O4 - Fe4	120.9(2)
Fe3 - O2 - Fe1	119.7(2)	Fe3 - O2 - Fe2	121.0(2)	Fe1 - O2 - Fe2	119.2(2)
