

Synthesis and characterization of $(\text{PPr}^i)_2(\text{Cl})_2(\text{CO})\text{Ru}=\text{CHCH}=\text{CMe}_2$

95.9 μL of 3-chloro-3-methyl-1-butyne (0.85 mmol) was added to a solution of 0.415 g of $\text{Ru}(\text{H})(\text{CO})(\text{Cl})(\text{PPr}^i)_2$ (0.85 mmol) in 10 mL dichloromethane. The reaction was stirred for 15 min, and then the solvent was removed. Pentane was added to the resulting puffy oil, which produced an orange precipitate. This material was isolated by filtration, washed with pentane until the washings were colorless, and dried under vacuum to provide 0.486 g of the desired product (97%). ^1H NMR (CD_2Cl_2): 17.26 (d, $\text{Ru}=\text{CH}$, $J = 14$), 8.00 (d, RuCHCH , $J = 14$), 2.85 (m, PCH, 6H), 1.45 (m, $J = 7$, Me on PPr^i , 36H), 1.30 (s, Me, 3H), 1.04 (s, Me, 3H). ^{31}P NMR (CD_2Cl_2): 40.30 (s). IR (Nujol): 1936 (ν_{CO}). IR (CH_2Cl_2): 1950 (ν_{CO}). These data are similar to those for similar compounds, such as $(\text{PPr}^i)_2(\text{Cl})_2(\text{CO})\text{Ru}=\text{CHCH}=\text{CPh}_2$ and $(\text{PPr}^i)_2(\text{Cl})_2(\text{CO})\text{Ru}=\text{CHCH}=\text{CHPh}$ (Esteruelas, M. A.; Lahoz, F. J.; Onate, E.; Oro, L. A.; Zeier, B. *Organometallics* **1994**, *13*, 4258-4265). The starting material $\text{Ru}(\text{H})(\text{CO})(\text{Cl})(\text{PPr}^i)_2$ was prepared by the method in Esteruelas, M. A.; Werner, H. *J. Organomet. Chem.* **1986**, *303*, 221-231.

Modified synthesis of $[\text{H}_2\text{IMes}(\text{H})][\text{Cl}]$

Our procedure is similar to that reported by Arduengo and co-workers (Arduengo, A. J.; Krafczyk, R.; Schmutzler, R.; Craig, H. A.; Goerlich, J. R.; Marshall, W. J.; Unverzagt, M. *Tetrahedron* **1999**, *55*, 14523-14534.) This paper also includes ^1H and ^{13}C NMR characterization data.

Dimesityl ethylenediimine $[\text{CH}(\text{=NMe}_2)]_2$: Prepare a solution of glyoxal (9 mL, 79 mmol, 40% wt in H_2O) in isopropanol (100 mL) and water (200 mL) at 0°C . Add mesitylamine (25 mL, 2.2 equiv.); a yellow precipitate forms immediately. Stir rapidly for 24 hours at room temperature. Collect the yellow precipitate on a coarse frit, and wash with water (1 \times 100 mL) and hexanes (3 \times 100 mL). Add 50 mL acetone to the wet solid and pump down the resulting suspension. Dry the solid under high vacuum for one day to obtain the diimine as a yellow solid in 89% yield (20.6 g).

Diamine dichloride salt $[\text{CH}_2(\text{NHMe}_2)]_2[\text{Cl}]_2$: Prepare a solution of the diimine (8.0 g, 27.3 mmol) in THF (100 mL) at 0°C (some diimine will precipitate). Add NaBH_4 (4.24 g, 112.1 mmol) in one portion, and then add conc. HCl (4.5 mL, 2 equiv.) dropwise over 30 min. Stir the reaction mixture at 0°C for 20 minutes. Next add 3 M HCl (250 mL) carefully to the flask, still at 0°C . Stir the mixture for 1 hr while it warms to room temperature. Collect the white precipitate on a coarse frit, and wash with water

(200 mL) and 5% acetone-ether (150 mL). Dry the solid under high vacuum for one day to obtain the dichloride salt as a colorless powder in 93% yield (9.4 g).

[H₂IMes(H)][Cl]: Add two drops of HCO₂H (~ 1 mol%) to a suspension of the dichloride salt (8.5 g, 23 mmol) in HC(OEt)₃ (35 mL, 162 mmol). Heat the reaction mixture at 120°C for 5 hr under an inert atmosphere, during which time most of the HCl salt dissolves. Then cool the reaction mixture to room temperature and add hexane (200 mL). Stir this mixture for one hour. Collect the white precipitate on a coarse frit and wash it with hexane (~ 200 mL). Dry the solid under high vacuum for one day to obtain [H₂IMes(H)][Cl] as an off-white powder in 96% yield (7.6 g). If necessary, the product can be further purified by washing with THF. Heat the salt at 60°C under high vacuum overnight before using it in the synthesis of organometallic complexes.

Crystal Structure of $(PCy_3)_2(CO)(Cl)(H)Ru$ (3b) and Comparison with Other Determinations of this Structure

An irregular wedge was hacked from a larger orange-tinted deep yellow crystal and mounted on a glass fiber with Paratone-N oil. Five runs of data were collected with 10 second (nominal) long, -0.3° wide ω -scans at five values of φ (0, 72, 144, 216, and 288°) with the detector 5 cm (nominal) distant at a θ of -28° using SMART v5.606. The initial cell for data reduction was calculated from 999 centered reflections (two discarded in least-squares). For data processing with SAINT v6.02, all defaults were used, except: a fixed box size of $1.8 \times 1.8 \times 0.8$ was used, periodic orientation matrix updating was disabled, the instrument error was set to zero, no Laue class integration restraints were used, and for the post-integration global least squares refinement, no constraints were applied. No decay correction was needed. The faces could not be easily measured and a face-indexed absorption correction was initially applied but subsequently not used. SADABS 2.03beta with $g = 0.0615$ was used with all other default values to produce a slight improvement in the refinement.

No outlier reflections were omitted from the final data set; 0 of 13967 reflections were rejected, with zero space group-absence violations and zero inconsistent equivalents. Refinement of F^2 was against all reflections. The weighted R-factor (wR) and goodness of fit are based on F^2 , conventional R-factors (R) are based on F , with F set to zero for negative F^2 . The threshold expression of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating R-factors(gt) etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement.

The molecule lies on a center of symmetry and consequently is disordered. The Cl and CO ligands are interchanged by the center, and the hydride is split above and below the plane of the other ligands. At a preliminary stage, population parameters were refined for the disordered ligands. The Cl/CO relative population refined to 0.547(15):0.453(15) and the H population to 0.98(8). For the final model these populations were all fixed at a chemically reasonable 1/2.

Crystallographic data (excluding structure factors) for this structure have been deposited with the Cambridge Crystallographic Data Centre as supplementary publication no. 150276. These data can be obtained free of charge via <http://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html> (or from the CCDC, 12 Union Road, Cambridge CB2 1EZ, UK; fax: +44 1223 336033; or e-mail: deposit@ccdc.cam.ac.uk). Structure factors are available from the authors via e-mail: xray@caltech.edu.

Figure S1: Displacement ellipsoid plot (50% probability) of $(\text{PCy}_3)_2(\text{CO})(\text{Cl})(\text{H})\text{Ru}$ (**3b**) with atom labels; hydrogens atoms are drawn at arbitrary scale.

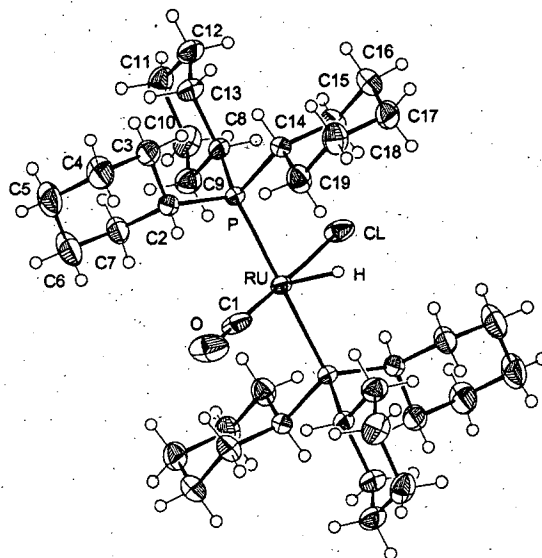


Figure S2: Crystal packing viewed along the a-axis, with the unit cell boundaries indicated. Unlabeled molecules of $(\text{PCy}_3)_2(\text{CO})(\text{Cl})(\text{H})\text{Ru}$ show both sites for the disordered carbonyl/chloride and hydride ligands.

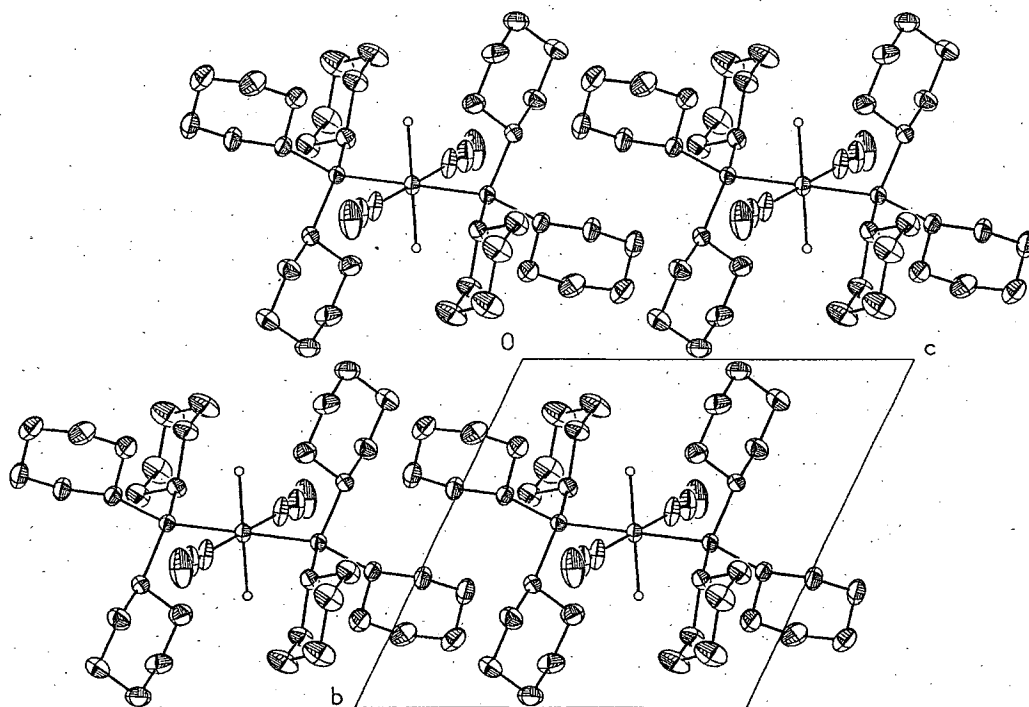


Table S1: Comparison of three crystal structure determinations of (PCy₃)₂(CO)(Cl)(H)Ru.

	(PCy ₃) ₂ (CO)(Cl)(H)Ru reference (a)	(PCy ₃) ₂ (CO)(Cl)(H)Ru reference (b)	(PCy ₃) ₂ (CO)(Cl)(H)Ru (3b) this work
crystallization solvent	not reported	benzene	toluene/methanol
crystal shape	not reported	roughly triangular block	flat wedge
crystal color	not reported	light orange	orange-tinted yellow
crystal size (mm³)	0.10 × 0.15 × 0.50	0.19 × 0.30 × 0.30	0.19 × 0.26 × 0.26
a (Å)	9.7838(6)	9.8521(12)	9.8362(7)
b (Å)	10.2458(6)	10.2242(12)	10.2260(7)
c (Å)	10.8180(6)	10.8316(13)	10.8212(8)
α (deg)	114.308(2)	114.072(2)	114.171(1)
β (deg)	108.158(2)	108.518(2)	108.499(1)
γ (deg)	91.524(2)	91.270(2)	91.328(1)
V (Å³)	923.93(9)	929.98(19)	926.85(11)
Z	1	1	1
crystal system	triclinic	triclinic	triclinic
space group	P-1 (#2)	P-1 (#2)	P-1 (#2)
wavelength	0.71073 Å MoKα	0.71073 Å MoKα	0.71073 Å MoKα
θ range for data collection (deg)	2.21 to 32.74	2.2 to 28.4	2.2 to 28.4
data collection temperature (K)	150	98	98
absorption coefficient (MoKα) (mm⁻¹)	0.610	0.606	0.608
reflections collected	6984	19037	13967
independent reflections	5709	4321	4294
no. restraints	228	0	0
no. parameters	336	341	341
refinement method	full-matrix least-squares on F ²	full-matrix least-squares on F ²	full-matrix least-squares on F ²
final R₁, wR₂ indices [I > 2σ(I)]	0.0372, 0.0665	0.0261, 0.0575	0.0303, 0.0627
R₁, wR₂ indices (all data)	0.0632, 0.0694	0.0286, 0.0581	0.0353, 0.0638
GOF on F²	0.839	1.897	1.523
largest diff. peak and hole (e.Å⁻³)	0.708 and -0.733	0.64 and -0.33	0.87 and -0.36

Table S1 (continued): Comparison of bond lengths (Å) and angles (deg).

	(PCy ₃) ₂ (CO)(Cl)(H)Ru reference (a)	(PCy ₃) ₂ (CO)(Cl)(H)Ru reference (b)	(PCy ₃) ₂ (CO)(Cl)(H)Ru (3b) this work
Ru–P	2.387(1)	2.380(1)	2.380(1)
Ru–Cl	2.397(2)	2.402(2)	2.405(2)
Ru–H	not located	1.36(4)	1.68(4)
Ru–C(1)	1.822(6)	1.777(6)	1.796(6)
C(1)–O	1.141(6)	1.162(6)	1.154(7)
P–C(2/8/14)	1.856(2), 1.856(2), 1.853(2)	1.856(2), 1.859(2), 1.861(2)	1.860(2), 1.853(2), 1.855(2)
C(2/8/14)–C(3/7/9/13/15/19)	1.533(3), 1.534(3), 1.531(3), 1.533(3), 1.536(3), 1.534(3)	1.526(2), 1.527(2), 1.526(2), 1.529(2), 1.525(2), 1.536(2)	1.524(3), 1.530(3), 1.527(3), 1.533(3), 1.527(3), 1.536(3)
C(3/7/9/13/15/19)– C(4/6/9/12/16/18)	1.522(4), 1.531(3), 1.526(3), 1.532(3), 1.528(3), 1.526(3)	1.522(3), 1.527(3), 1.525(3), 1.525(2), 1.525(2), 1.526(3)	1.525(3), 1.527(3), 1.526(3), 1.522(3), 1.525(3), 1.520(3)
C(4/6/10/12/16/18)– C(5/11/17)	1.517(3), 1.521(3), 1.508(4), 1.519(4), 1.505(4), 1.514(4)	1.508(3), 1.508(3), 1.512(3), 1.502(3), 1.513(3), 1.505(3)	1.504(3), 1.508(4), 1.511(3), 1.512(3), 1.511(3), 1.507(3)
C(1)–Ru–Cl	not available	178.4(2)	178.1(3)
Ru–C(1)–O	not available	179.1(9)	179(1)
C(1)–Ru–P	not available	90.3(2), 89.7(2)	90.0(2), 90.0(2)
Cl–Ru–P	88.12(4), 91.88(4)	88.18(4), 91.82(4)	88.10(5), 91.90(5)
Ru–P–C(2/8/14)	113.70(7), 113.97(7), 113.27(7)	114.30(5), 113.20(5), 113.11(5)	114.27(6), 113.06(6), 113.32(6)
C(2/8)–P–C(8/14)	102.68(9), 109.5(1), 102.7(1)	103.15(7), 109.54(8), 102.51(7)	103.06(6), 109.66(9), 102.43(8)
P–C(2/8/14)– C(3/7/9/13/15/19)	111.1(2), 113.7(2), 113.4(2), 118.7(2), 115.1(2), 116.1(2)	118.5(1), 113.2(1), 114.7(1), 116.4(1), 114.0(1), 110.6(1)	118.5(1), 113.1(1), 114.9(1), 116.2(1), 113.9(1), 110.9(1)

References: (a) Lee, H. M.; Smith, D. C.; He, Z.; Stevens, E. D.; Yi, C. S.; Nolan, S. P. *Organometallics* **2001**, *20*, 794-797; (b) Louie, J.; Grubbs, R. H. *Organometallics*, **2002**, *21*, 2153-2164.

Crystal Structure Determination of $(\text{PCy}_3)(\text{Cl})(\text{CO})\text{Ru}[\eta^2-(\text{CH}_2-\text{C}_6\text{H}_2\text{Me}_2)(\text{N}_2\text{C}_3\text{H}_4)(\text{C}_6\text{H}_2\text{Me}_3)]$ (4)

Figure S3: Displacement ellipsoid plot (50% probability) of 4 with atom labels; hydrogens atoms are drawn at arbitrary scale.

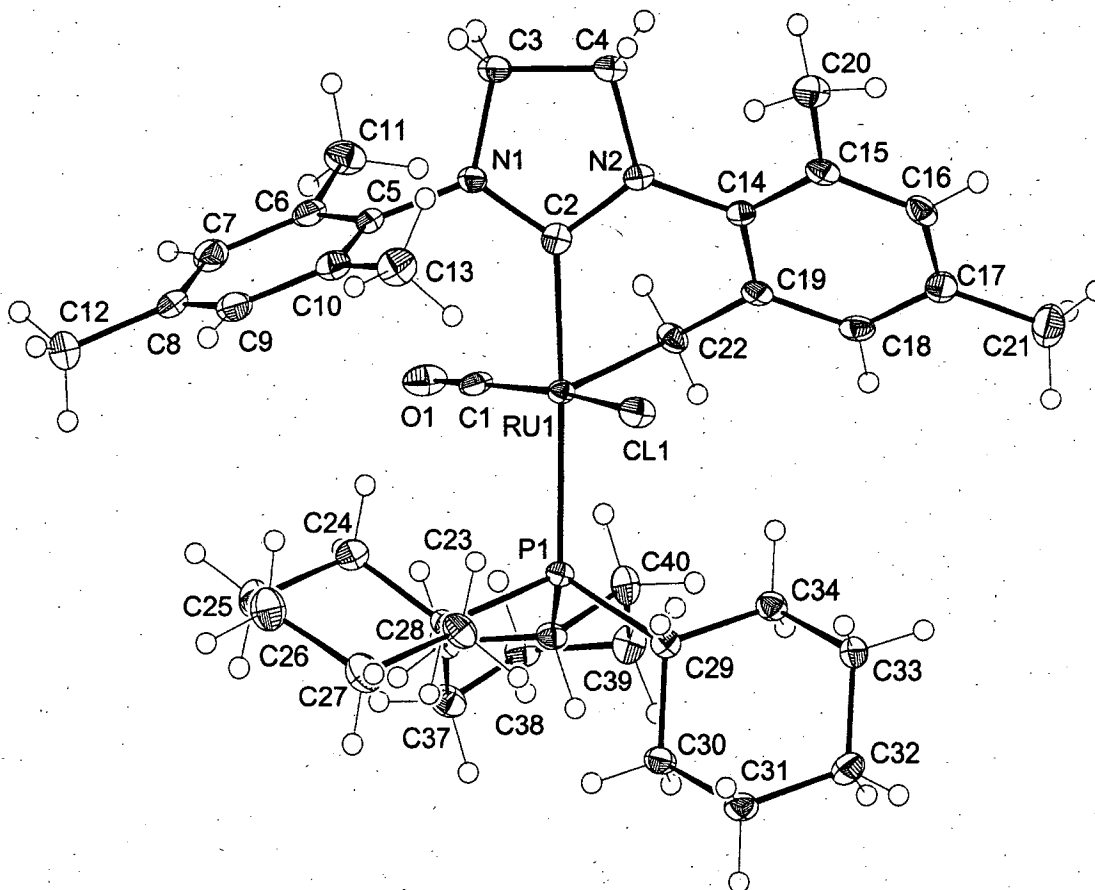


Table S2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 4. $U(\text{eq})$ is defined as the trace of the orthogonalized UU^{T} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
Ru(1)	7573(1)	7788(1)	7066(1)	12(1)
Cl(1)	9753(1)	8655(1)	7224(1)	20(1)
P(1)	8696(1)	6229(1)	7489(1)	12(1)
O(1)	5108(2)	6803(1)	7368(1)	25(1)
N(1)	6042(2)	9686(2)	7340(1)	15(1)
N(2)	6797(2)	9738(2)	6074(1)	14(1)
C(1)	6051(3)	7194(2)	7262(2)	18(1)
C(2)	6757(2)	9182(2)	6822(2)	14(1)
C(3)	5460(3)	10619(2)	6920(2)	19(1)
C(4)	6109(3)	10716(2)	6095(2)	20(1)
C(5)	5914(2)	9384(2)	8249(2)	16(1)
C(6)	4717(2)	8913(2)	8344(2)	18(1)
C(7)	4647(3)	8604(2)	9222(2)	22(1)
C(8)	5716(3)	8758(2)	9997(2)	22(1)
C(9)	6870(3)	9260(2)	9882(2)	22(1)
C(10)	6998(3)	9585(2)	9019(2)	19(1)
C(11)	3516(2)	8758(2)	7537(2)	24(1)
C(12)	5616(3)	8406(2)	10947(2)	32(1)
C(13)	8251(2)	10157(2)	8920(2)	24(1)
C(14)	7351(2)	9369(2)	5318(2)	13(1)
C(15)	7985(2)	10030(2)	4814(2)	15(1)
C(16)	8475(2)	9603(2)	4081(2)	18(1)
C(17)	8382(2)	8559(2)	3844(2)	19(1)
C(18)	7797(2)	7925(2)	4384(2)	17(1)
C(19)	7274(2)	8300(2)	5116(2)	14(1)
C(20)	8217(2)	11171(2)	5030(2)	21(1)
C(21)	8910(3)	8125(2)	3039(2)	27(1)
C(22)	6617(2)	7579(2)	5645(2)	16(1)
C(23)	9271(2)	6277(2)	8793(2)	15(1)
C(24)	8177(2)	6693(2)	9245(2)	19(1)
C(25)	8581(3)	6652(2)	10310(2)	24(1)
C(26)	9881(3)	7275(2)	10702(2)	28(1)
C(27)	10984(3)	6923(2)	10236(2)	23(1)
C(28)	10573(2)	6934(2)	9170(2)	20(1)
C(29)	10278(2)	6063(2)	7110(2)	14(1)
C(30)	11057(2)	5118(2)	7450(2)	17(1)
C(31)	12442(2)	5175(2)	7231(2)	18(1)
C(32)	12332(2)	5294(2)	6190(2)	20(1)
C(33)	11513(2)	6207(2)	5832(2)	17(1)
C(34)	10124(2)	6144(2)	6054(2)	16(1)
C(35)	7796(2)	4952(2)	7194(2)	14(1)
C(36)	6898(2)	4617(2)	7834(2)	17(1)
C(37)	6297(3)	3530(2)	7554(2)	21(1)
C(38)	5501(2)	3458(2)	6541(2)	17(1)
C(39)	6372(3)	3796(2)	5889(2)	21(1)
C(40)	6976(2)	4883(2)	6179(2)	18(1)
Cl(2)	3764(2)	5813(2)	9887(2)	42(1)
Cl(3)	5706(3)	4253(4)	10244(3)	112(2)
C(42)	4970(11)	5274(14)	9574(7)	144(7)

Table S3. Bond lengths [Å] and angles [°] for 4.

Ru(1)-C(1)	1.811(3)	C(21)-H(21A)	0.9800
Ru(1)-C(2)	2.037(3)	C(21)-H(21B)	0.9800
Ru(1)-C(22)	2.097(2)	C(21)-H(21C)	0.9800
Ru(1)-P(1)	2.4016(7)	C(22)-H(22A)	0.9900
Ru(1)-Cl(1)	2.4350(6)	C(22)-H(22B)	0.9900
P(1)-C(29)	1.853(2)	C(23)-C(24)	1.535(3)
P(1)-C(35)	1.863(2)	C(23)-C(28)	1.542(3)
P(1)-C(23)	1.871(2)	C(23)-H(23)	1.0000
O(1)-C(1)	1.126(3)	C(24)-C(25)	1.531(4)
N(1)-C(2)	1.343(3)	C(24)-H(24A)	0.9900
N(1)-C(5)	1.445(3)	C(24)-H(24B)	0.9900
N(1)-C(3)	1.468(3)	C(25)-C(26)	1.520(4)
N(2)-C(2)	1.350(3)	C(25)-H(25A)	0.9900
N(2)-C(14)	1.436(3)	C(25)-H(25B)	0.9900
N(2)-C(4)	1.481(3)	C(26)-C(27)	1.528(4)
C(3)-C(4)	1.523(4)	C(26)-H(26A)	0.9900
C(3)-H(3A)	0.9900	C(26)-H(26B)	0.9900
C(3)-H(3B)	0.9900	C(27)-C(28)	1.529(4)
C(4)-H(4A)	0.9900	C(27)-H(27A)	0.9900
C(4)-H(4B)	0.9900	C(27)-H(27B)	0.9900
C(5)-C(6)	1.395(3)	C(28)-H(28A)	0.9900
C(5)-C(10)	1.402(3)	C(28)-H(28B)	0.9900
C(6)-C(7)	1.387(4)	C(29)-C(30)	1.528(3)
C(6)-C(11)	1.503(4)	C(29)-C(34)	1.535(3)
C(7)-C(8)	1.390(4)	C(29)-H(29)	1.0000
C(7)-H(7)	0.9500	C(30)-C(31)	1.532(3)
C(8)-C(9)	1.385(4)	C(30)-H(30A)	0.9900
C(8)-C(12)	1.514(4)	C(30)-H(30B)	0.9900
C(9)-C(10)	1.389(4)	C(31)-C(32)	1.525(4)
C(9)-H(9)	0.9500	C(31)-H(31A)	0.9900
C(10)-C(13)	1.508(3)	C(31)-H(31B)	0.9900
C(11)-H(11A)	0.9800	C(32)-C(33)	1.521(4)
C(11)-H(11B)	0.9800	C(32)-H(32A)	0.9900
C(11)-H(11C)	0.9800	C(32)-H(32B)	0.9900
C(12)-H(12A)	0.9800	C(33)-C(34)	1.536(3)
C(12)-H(12B)	0.9800	C(33)-H(33A)	0.9900
C(12)-H(12C)	0.9800	C(33)-H(33B)	0.9900
C(13)-H(13A)	0.9800	C(34)-H(34A)	0.9900
C(13)-H(13B)	0.9800	C(34)-H(34B)	0.9900
C(13)-H(13C)	0.9800	C(35)-C(40)	1.532(3)
C(14)-C(15)	1.400(3)	C(35)-C(36)	1.531(3)
C(14)-C(19)	1.408(3)	C(35)-H(35)	1.0000
C(15)-C(16)	1.395(4)	C(36)-C(37)	1.531(3)
C(15)-C(20)	1.509(3)	C(36)-H(36A)	0.9900
C(16)-C(17)	1.386(4)	C(36)-H(36B)	0.9900
C(16)-H(16)	0.9500	C(37)-C(38)	1.523(3)
C(17)-C(18)	1.385(4)	C(37)-H(37A)	0.9900
C(17)-C(21)	1.511(4)	C(37)-H(37B)	0.9900
C(18)-C(19)	1.390(3)	C(38)-C(39)	1.524(4)
C(18)-H(18)	0.9500	C(38)-H(38A)	0.9900
C(19)-C(22)	1.487(3)	C(38)-H(38B)	0.9900
C(20)-H(20A)	0.9800	C(39)-C(40)	1.532(3)
C(20)-H(20B)	0.9800	C(39)-H(39A)	0.9900
C(20)-H(20C)	0.9800	C(39)-H(39B)	0.9900

C(40)-H(40A)	0.9900	C(8)-C(7)-H(7)	118.9
C(40)-H(40B)	0.9900	C(6)-C(7)-H(7)	118.9
Cl(2)-Cl(3)#1	0.626(3)	C(7)-C(8)-C(9)	118.2(3)
Cl(2)-C(42)	1.592(11)	C(7)-C(8)-C(12)	121.1(3)
Cl(2)-C(42)#1	2.015(14)	C(9)-C(8)-C(12)	120.6(3)
Cl(3)-Cl(2)#1	0.626(3)	C(10)-C(9)-C(8)	122.0(3)
Cl(3)-C(42)#1	1.017(12)	C(10)-C(9)-H(9)	119.0
Cl(3)-C(42)	1.773(14)	C(8)-C(9)-H(9)	119.0
C(42)-H(42A)	0.9900	C(9)-C(10)-C(5)	117.9(2)
C(42)-H(42B)	0.9900	C(9)-C(10)-C(13)	120.9(2)
		C(5)-C(10)-C(13)	121.1(2)
C(1)-Ru(1)-C(2)	93.69(10)	C(6)-C(11)-H(11A)	109.5
C(1)-Ru(1)-C(22)	84.72(11)	C(6)-C(11)-H(11B)	109.5
C(2)-Ru(1)-C(22)	79.27(10)	H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5
C(1)-Ru(1)-P(1)	89.12(8)	C(6)-C(11)-H(11C)	109.5
C(2)-Ru(1)-P(1)	174.14(7)	H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5
C(22)-Ru(1)-P(1)	106.14(7)	H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
C(1)-Ru(1)-Cl(1)	165.73(8)	C(8)-C(12)-H(12A)	109.5
C(2)-Ru(1)-Cl(1)	87.38(7)	C(8)-C(12)-H(12B)	109.5
C(22)-Ru(1)-Cl(1)	109.43(7)	H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
P(1)-Ru(1)-Cl(1)	88.64(2)	C(8)-C(12)-H(12C)	109.5
C(29)-P(1)-C(35)	103.73(11)	H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
C(29)-P(1)-C(23)	102.57(11)	H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
C(35)-P(1)-C(23)	104.08(11)	C(10)-C(13)-H(13A)	109.5
C(29)-P(1)-Ru(1)	116.06(8)	C(10)-C(13)-H(13B)	109.5
C(35)-P(1)-Ru(1)	120.98(8)	H(13A)-C(13)-H(13B)	109.5
C(23)-P(1)-Ru(1)	107.36(8)	C(10)-C(13)-H(13C)	109.5
C(2)-N(1)-C(5)	123.9(2)	H(13A)-C(13)-H(13C)	109.5
C(2)-N(1)-C(3)	113.5(2)	H(13B)-C(13)-H(13C)	109.5
C(5)-N(1)-C(3)	122.4(2)	C(15)-C(14)-C(19)	120.5(2)
C(2)-N(2)-C(14)	123.0(2)	C(15)-C(14)-N(2)	122.1(2)
C(2)-N(2)-C(4)	112.1(2)	C(19)-C(14)-N(2)	117.4(2)
C(14)-N(2)-C(4)	124.8(2)	C(14)-C(15)-C(16)	118.0(2)
O(1)-C(1)-Ru(1)	178.2(2)	C(14)-C(15)-C(20)	124.3(2)
N(1)-C(2)-N(2)	108.2(2)	C(16)-C(15)-C(20)	117.6(2)
N(1)-C(2)-Ru(1)	126.71(19)	C(17)-C(16)-C(15)	123.1(2)
N(2)-C(2)-Ru(1)	125.02(18)	C(17)-C(16)-H(16)	118.5
N(1)-C(3)-C(4)	102.2(2)	C(15)-C(16)-H(16)	118.5
N(1)-C(3)-H(3A)	111.3	C(16)-C(17)-C(18)	117.2(2)
C(4)-C(3)-H(3A)	111.3	C(16)-C(17)-C(21)	121.6(3)
N(1)-C(3)-H(3B)	111.3	C(18)-C(17)-C(21)	121.2(2)
C(4)-C(3)-H(3B)	111.3	C(19)-C(18)-C(17)	122.7(2)
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.2	C(19)-C(18)-H(18)	118.6
N(2)-C(4)-C(3)	103.2(2)	C(17)-C(18)-H(18)	118.6
N(2)-C(4)-H(4A)	111.1	C(18)-C(19)-C(14)	118.4(2)
C(3)-C(4)-H(4A)	111.1	C(18)-C(19)-C(22)	119.9(2)
N(2)-C(4)-H(4B)	111.1	C(14)-C(19)-C(22)	121.7(2)
C(3)-C(4)-H(4B)	111.1	C(15)-C(20)-H(20A)	109.5
H(4A)-C(4)-H(4B)	109.1	C(15)-C(20)-H(20B)	109.5
C(6)-C(5)-C(10)	121.7(2)	H(20A)-C(20)-H(20B)	109.5
C(6)-C(5)-N(1)	119.5(2)	C(15)-C(20)-H(20C)	109.5
C(10)-C(5)-N(1)	118.8(2)	H(20A)-C(20)-H(20C)	109.5
C(7)-C(6)-C(5)	117.9(2)	H(20B)-C(20)-H(20C)	109.5
C(7)-C(6)-C(11)	119.9(2)	C(17)-C(21)-H(21A)	109.5
C(5)-C(6)-C(11)	122.2(2)	C(17)-C(21)-H(21B)	109.5
C(8)-C(7)-C(6)	122.2(3)	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5

C(17)-C(21)-H(21C)	109.5	H(30A)-C(30)-H(30B)	108.1
H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5	C(32)-C(31)-C(30)	111.1(2)
H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5	C(32)-C(31)-H(31A)	109.4
C(19)-C(22)-Ru(1)	108.11(15)	C(30)-C(31)-H(31A)	109.4
C(19)-C(22)-H(22A)	110.1	C(32)-C(31)-H(31B)	109.4
Ru(1)-C(22)-H(22A)	110.1	C(30)-C(31)-H(31B)	109.4
C(19)-C(22)-H(22B)	110.1	H(31A)-C(31)-H(31B)	108.0
Ru(1)-C(22)-H(22B)	110.1	C(33)-C(32)-C(31)	111.8(2)
H(22A)-C(22)-H(22B)	108.4	C(33)-C(32)-H(32A)	109.3
C(24)-C(23)-C(28)	108.7(2)	C(31)-C(32)-H(32A)	109.3
C(24)-C(23)-P(1)	110.50(17)	C(33)-C(32)-H(32B)	109.3
C(28)-C(23)-P(1)	113.48(17)	C(31)-C(32)-H(32B)	109.3
C(24)-C(23)-H(23)	108.0	H(32A)-C(32)-H(32B)	107.9
C(28)-C(23)-H(23)	108.0	C(32)-C(33)-C(34)	111.5(2)
P(1)-C(23)-H(23)	108.0	C(32)-C(33)-H(33A)	109.3
C(23)-C(24)-C(25)	111.2(2)	C(34)-C(33)-H(33A)	109.3
C(23)-C(24)-H(24A)	109.4	C(32)-C(33)-H(33B)	109.3
C(25)-C(24)-H(24A)	109.4	C(34)-C(33)-H(33B)	109.3
C(23)-C(24)-H(24B)	109.4	H(33A)-C(33)-H(33B)	108.0
C(25)-C(24)-H(24B)	109.4	C(29)-C(34)-C(33)	109.73(19)
H(24A)-C(24)-H(24B)	108.0	C(29)-C(34)-H(34A)	109.7
C(26)-C(25)-C(24)	110.5(2)	C(33)-C(34)-H(34A)	109.7
C(26)-C(25)-H(25A)	109.5	C(29)-C(34)-H(34B)	109.7
C(24)-C(25)-H(25A)	109.5	C(33)-C(34)-H(34B)	109.7
C(26)-C(25)-H(25B)	109.5	H(34A)-C(34)-H(34B)	108.2
C(24)-C(25)-H(25B)	109.5	C(40)-C(35)-C(36)	108.99(19)
H(25A)-C(25)-H(25B)	108.1	C(40)-C(35)-P(1)	111.01(17)
C(25)-C(26)-C(27)	111.0(2)	C(36)-C(35)-P(1)	116.55(18)
C(25)-C(26)-H(26A)	109.4	C(40)-C(35)-H(35)	106.6
C(27)-C(26)-H(26A)	109.4	C(36)-C(35)-H(35)	106.6
C(25)-C(26)-H(26B)	109.4	P(1)-C(35)-H(35)	106.6
C(27)-C(26)-H(26B)	109.4	C(37)-C(36)-C(35)	111.1(2)
H(26A)-C(26)-H(26B)	108.0	C(37)-C(36)-H(36A)	109.4
C(28)-C(27)-C(26)	112.7(2)	C(35)-C(36)-H(36A)	109.4
C(28)-C(27)-H(27A)	109.1	C(37)-C(36)-H(36B)	109.4
C(26)-C(27)-H(27A)	109.1	C(35)-C(36)-H(36B)	109.4
C(28)-C(27)-H(27B)	109.1	H(36A)-C(36)-H(36B)	108.0
C(26)-C(27)-H(27B)	109.1	C(36)-C(37)-C(38)	111.0(2)
H(27A)-C(27)-H(27B)	107.8	C(36)-C(37)-H(37A)	109.4
C(27)-C(28)-C(23)	110.3(2)	C(38)-C(37)-H(37A)	109.4
C(27)-C(28)-H(28A)	109.6	C(36)-C(37)-H(37B)	109.4
C(23)-C(28)-H(28A)	109.6	C(38)-C(37)-H(37B)	109.4
C(27)-C(28)-H(28B)	109.6	H(37A)-C(37)-H(37B)	108.0
C(23)-C(28)-H(28B)	109.6	C(39)-C(38)-C(37)	110.8(2)
H(28A)-C(28)-H(28B)	108.1	C(39)-C(38)-H(38A)	109.5
C(30)-C(29)-C(34)	110.4(2)	C(37)-C(38)-H(38A)	109.5
C(30)-C(29)-P(1)	116.15(17)	C(39)-C(38)-H(38B)	109.5
C(34)-C(29)-P(1)	113.57(16)	C(37)-C(38)-H(38B)	109.5
C(30)-C(29)-H(29)	105.2	H(38A)-C(38)-H(38B)	108.1
C(34)-C(29)-H(29)	105.2	C(38)-C(39)-C(40)	110.5(2)
P(1)-C(29)-H(29)	105.2	C(38)-C(39)-H(39A)	109.5
C(29)-C(30)-C(31)	110.5(2)	C(40)-C(39)-H(39A)	109.5
C(29)-C(30)-H(30A)	109.6	C(38)-C(39)-H(39B)	109.5
C(31)-C(30)-H(30A)	109.6	C(40)-C(39)-H(39B)	109.5
C(29)-C(30)-H(30B)	109.6	H(39A)-C(39)-H(39B)	108.1
C(31)-C(30)-H(30B)	109.6	C(35)-C(40)-C(39)	111.6(2)

C(35)-C(40)-H(40A)	109.3	Cl(2)#1-Cl(3)-C(42)	103.7(8)
C(39)-C(40)-H(40A)	109.3	C(42)#1-Cl(3)-C(42)	55.4(8)
C(35)-C(40)-H(40B)	109.3	Cl(2)-C(42)-Cl(3)	117.1(6)
C(39)-C(40)-H(40B)	109.3	Cl(2)-C(42)-H(42A)	108.0
H(40A)-C(40)-H(40B)	108.0	Cl(3)-C(42)-H(42A)	108.0
Cl(3)#1-Cl(2)-C(42)	18.3(9)	Cl(2)-C(42)-H(42B)	108.0
Cl(3)#1-Cl(2)-C(42)#1	58.7(6)	Cl(3)-C(42)-H(42B)	108.0
C(42)-Cl(2)-C(42)#1	45.9(6)	H(42A)-C(42)-H(42B)	107.3
Cl(2)#1-Cl(3)-C(42)#1	150.6(14)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,-y+1,-z+2

Table S4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) for 4. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ru(1)	91(1)	122(1)	136(1)	19(1)	24(1)	9(1)
Cl(1)	150(3)	186(3)	260(4)	51(3)	37(3)	0(2)
P(1)	118(3)	115(3)	131(3)	17(3)	22(3)	6(2)
O(1)	192(10)	175(10)	361(12)	21(9)	38(9)	14(8)
N(1)	134(10)	152(11)	163(11)	42(9)	36(9)	39(8)
N(2)	125(10)	114(11)	172(11)	11(9)	29(9)	17(8)
C(1)	198(14)	157(14)	198(14)	9(11)	44(11)	87(11)
C(2)	124(12)	138(13)	154(13)	-17(10)	22(10)	-36(10)
C(3)	185(13)	166(14)	215(14)	48(11)	53(11)	53(10)
C(4)	245(14)	173(14)	200(14)	49(11)	54(11)	84(11)
C(5)	176(13)	152(13)	149(13)	9(10)	54(10)	60(10)
C(6)	173(13)	145(13)	250(15)	16(11)	81(11)	42(10)
C(7)	210(14)	196(15)	293(16)	44(12)	121(12)	34(11)
C(8)	302(15)	197(15)	213(15)	26(12)	123(12)	126(12)
C(9)	240(14)	230(15)	168(14)	-19(12)	8(11)	95(11)
C(10)	197(13)	146(13)	211(14)	-11(11)	42(11)	29(11)
C(11)	166(13)	249(16)	306(17)	66(13)	25(12)	7(11)
C(12)	429(18)	354(18)	233(16)	94(14)	167(14)	146(14)
C(13)	193(14)	265(16)	252(16)	-6(13)	19(12)	0(12)
C(14)	78(11)	175(13)	135(13)	22(10)	-5(10)	27(10)
C(15)	79(11)	178(13)	177(13)	50(11)	-17(10)	14(10)
C(16)	119(12)	241(15)	164(14)	83(11)	10(10)	13(10)
C(17)	132(12)	268(15)	153(14)	23(12)	6(10)	56(11)
C(18)	149(12)	162(13)	156(13)	8(11)	-31(10)	46(10)
C(19)	79(11)	171(13)	138(13)	34(10)	-25(10)	18(10)
C(20)	152(13)	200(15)	279(16)	55(12)	61(11)	-9(11)
C(21)	233(15)	387(18)	217(15)	7(13)	86(12)	34(13)
C(22)	226(13)	117(13)	137(13)	14(10)	22(11)	-8(10)
C(23)	185(13)	140(13)	119(13)	17(10)	18(10)	6(10)
C(24)	203(13)	172(14)	200(14)	3(11)	52(11)	22(11)
C(25)	251(15)	297(16)	165(14)	8(12)	60(12)	42(12)
C(26)	336(16)	334(18)	151(14)	-32(13)	24(12)	15(13)
C(27)	235(14)	266(16)	169(14)	2(12)	-9(11)	-24(12)
C(28)	196(13)	217(15)	161(14)	29(11)	-2(11)	-30(11)
C(29)	75(11)	170(13)	151(13)	19(11)	3(10)	-7(9)
C(30)	146(12)	173(14)	192(14)	59(11)	40(10)	30(10)

C(31)	132(12)	205(14)	219(14)	50(11)	36(11)	43(10)
C(32)	160(13)	221(15)	226(15)	-4(12)	62(11)	40(11)
C(33)	171(13)	178(14)	166(14)	37(11)	68(10)	20(10)
C(34)	141(12)	178(14)	162(13)	27(11)	17(10)	16(10)
C(35)	148(12)	108(13)	174(13)	21(10)	38(10)	-6(10)
C(36)	169(13)	183(14)	158(13)	38(11)	33(10)	-13(10)
C(37)	201(14)	183(14)	239(15)	52(12)	43(11)	-23(11)
C(38)	150(12)	136(13)	223(14)	6(11)	32(11)	-18(10)
C(39)	190(13)	206(15)	215(15)	-37(12)	52(11)	-47(11)
C(40)	175(13)	207(14)	163(14)	-3(11)	48(11)	-58(11)
Cl(2)	376(13)	548(13)	351(11)	74(10)	125(10)	33(10)
Cl(3)	750(20)	1830(40)	710(20)	-190(20)	-28(18)	920(30)
C(42)	840(80)	3200(200)	520(60)	350(90)	450(60)	990(110)

Table S5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 4.

	x	y	z	U_{iso}
H(3A)	5697	11223	7365	22
H(3B)	4473	10538	6710	22
H(4A)	5426	10789	5506	24
H(4B)	6755	11312	6195	24
H(7)	3842	8276	9297	27
H(9)	7597	9386	10410	26
H(11A)	3000	9381	7477	37
H(11B)	2953	8178	7648	37
H(11C)	3812	8615	6960	37
H(12A)	4683	8424	10999	48
H(12B)	6179	8864	11436	48
H(12C)	5921	7703	11020	48
H(13A)	8753	9713	8584	36
H(13B)	8806	10359	9541	36
H(13C)	8007	10773	8568	36
H(16)	8891	10048	3728	21
H(18)	7750	7205	4247	20
H(20A)	7369	11512	4834	31
H(20B)	8862	11440	4693	31
H(20C)	8573	11301	5704	31
H(21A)	9334	8681	2767	41
H(21B)	8167	7801	2562	41
H(21C)	9570	7613	3266	41
H(22A)	6693	6862	5423	20
H(22B)	5655	7721	5550	20
H(23)	9438	5559	8992	18
H(24A)	7332	6281	9002	23
H(24B)	8015	7412	9073	23
H(25A)	7863	6930	10584	28
H(25B)	8697	5930	10484	28
H(26A)	10166	7195	11384	34
H(26B)	9732	8011	10597	34
H(27A)	11793	7379	10467	28
H(27B)	11219	6218	10419	28
H(28A)	11296	6660	8900	24

H(28B)	10435	7650	8979	24
H(29)	10875	6665	7405	16
H(30A)	10554	4490	7140	20
H(30B)	11157	5079	8133	20
H(31A)	12975	5766	7591	22
H(31B)	12915	4541	7426	22
H(32A)	13241	5385	6078	24
H(32B)	11907	4660	5838	24
H(33A)	11406	6227	5148	20
H(33B)	11997	6850	6125	20
H(34A)	9632	6765	5843	20
H(34B)	9603	5536	5716	20
H(35)	8499	4432	7237	17
H(36A)	7430	4639	8489	20
H(36B)	6167	5102	7799	20
H(37A)	5701	3341	7967	25
H(37B)	7024	3037	7636	25
H(38A)	5162	2741	6366	21
H(38B)	4721	3899	6471	21
H(39A)	5824	3784	5239	25
H(39B)	7100	3313	5909	25
H(40A)	7559	5081	5761	22
H(40B)	6247	5373	6109	22
H(42A)	5681	5807	9583	173
H(42B)	4644	5008	8918	173

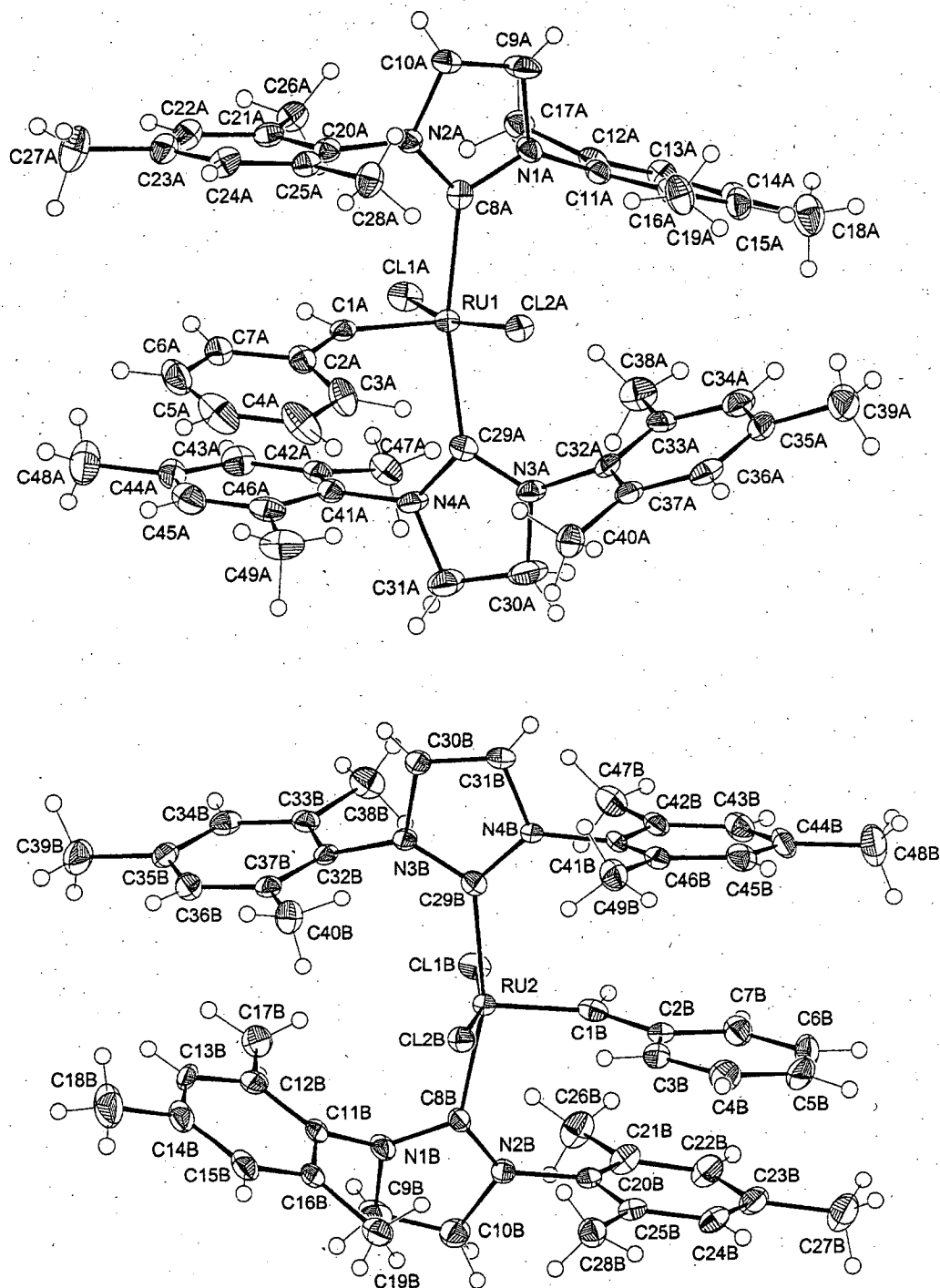
Crystal Structure Determination of $(\text{H}_2\text{IMes})(\text{IMes})(\text{Cl})_2\text{Ru}=\text{CHPh}$ (6a)**Figure S4:** Displacement ellipsoid plot (50% probability) of 6a with atom labels; hydrogens atoms are drawn at arbitrary scale. Both molecules A and B are shown.

Table S6. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6a. $U(\text{eq})$ is defined as the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U_{eq}
Ru(1)	4711(1)	3526(1)	7927(1)	15(1)
Cl(1A)	3649(1)	4848(1)	8149(1)	24(1)
Cl(2A)	5904(1)	2428(1)	7531(1)	21(1)
N(1A)	6746(2)	4737(2)	7669(1)	20(1)
N(2A)	7056(2)	4376(2)	8482(1)	17(1)
N(3A)	2981(2)	2350(2)	7118(1)	20(1)
N(4A)	2159(2)	2701(2)	7830(1)	22(1)
C(1A)	4696(2)	3187(2)	8604(1)	18(1)
C(2A)	4976(2)	2340(2)	8866(1)	22(1)
C(3A)	5250(3)	1521(2)	8587(1)	28(1)
C(4A)	5513(3)	748(3)	8854(2)	40(1)
C(5A)	5505(3)	770(3)	9401(2)	42(1)
C(6A)	5239(3)	1561(3)	9685(2)	37(1)
C(7A)	4962(3)	2343(3)	9417(1)	29(1)
C(8A)	6258(2)	4289(2)	8053(1)	17(1)
C(9A)	7846(3)	5110(2)	7857(2)	31(1)
C(10A)	8062(3)	4864(2)	8376(1)	30(1)
C(11A)	6213(2)	4977(2)	7164(1)	18(1)
C(12A)	5565(2)	5778(2)	7162(1)	20(1)
C(13A)	5120(3)	6054(2)	6669(1)	22(1)
C(14A)	5332(3)	5591(2)	6190(1)	25(1)
C(15A)	6033(3)	4836(2)	6212(1)	26(1)
C(16A)	6485(2)	4517(2)	6690(1)	20(1)
C(17A)	5449(3)	6353(2)	7668(1)	25(1)
C(18A)	4811(4)	5893(3)	5665(2)	38(1)
C(19A)	7291(4)	3722(3)	6690(2)	30(1)
C(20A)	6994(2)	4119(2)	9018(1)	19(1)
C(21A)	6503(2)	4730(2)	9377(1)	20(1)
C(22A)	6557(3)	4531(2)	9911(1)	23(1)
C(23A)	7088(3)	3757(2)	10086(1)	24(1)
C(24A)	7588(3)	3176(2)	9715(1)	24(1)
C(25A)	7544(2)	3342(2)	9178(1)	20(1)
C(26A)	5961(3)	5591(2)	9200(2)	25(1)
C(27A)	7133(4)	3547(3)	10664(2)	37(1)
C(28A)	8082(3)	2690(3)	8788(2)	27(1)
C(29A)	3171(2)	2798(2)	7610(1)	18(1)
C(30A)	1816(3)	2014(3)	6995(2)	38(1)
C(31A)	1320(3)	2151(3)	7487(2)	33(1)
C(32A)	3706(2)	2267(2)	6690(1)	20(1)
C(33A)	3833(2)	2996(2)	6385(1)	22(1)
C(34A)	4464(3)	2866(2)	5943(1)	29(1)
C(35A)	4963(3)	2043(2)	5811(1)	26(1)
C(36A)	4787(3)	1326(2)	6120(1)	25(1)
C(37A)	4158(2)	1410(2)	6560(1)	22(1)
C(38A)	3313(3)	3908(3)	6521(2)	32(1)
C(39A)	5687(3)	1921(3)	5347(2)	37(1)
C(40A)	3998(3)	623(2)	6893(2)	26(1)
C(41A)	1873(2)	3012(2)	8354(1)	19(1)
C(42A)	1312(2)	3838(2)	8420(1)	21(1)
C(43A)	1041(3)	4129(2)	8927(1)	26(1)

C(44A)	1250(2)	3592(2)	9359(1)	27(1)
C(45A)	1725(3)	2751(2)	9264(1)	31(1)
C(46A)	2026(2)	2432(2)	8765(1)	25(1)
C(47A)	928(3)	4372(3)	7947(2)	28(1)
C(48A)	925(4)	3922(4)	9904(2)	44(1)
C(49A)	2429(3)	1474(2)	8669(2)	36(1)
Ru(2)	9561(1)	8420(1)	7076(1)	15(1)
Cl(1B)	10861(1)	9712(1)	7147(1)	23(1)
Cl(2B)	8283(1)	7207(1)	7225(1)	20(1)
N(1B)	7917(2)	9776(2)	7534(1)	20(1)
N(2B)	7952(2)	10007(2)	6702(1)	18(1)
N(3B)	11378(2)	7449(2)	7830(1)	16(1)
N(4B)	11456(2)	6914(2)	7017(1)	17(1)
C(1B)	9630(3)	8284(2)	6354(1)	19(1)
C(2B)	9097(2)	7698(2)	5896(1)	19(1)
C(3B)	8319(3)	6973(2)	5921(1)	21(1)
C(4B)	7875(3)	6472(3)	5460(1)	30(1)
C(5B)	8177(3)	6671(2)	4964(1)	32(1)
C(6B)	8931(3)	7372(2)	4929(1)	31(1)
C(7B)	9392(3)	7881(2)	5388(1)	25(1)
C(8B)	8300(2)	9421(2)	7073(1)	16(1)
C(9B)	7369(3)	10635(2)	7476(2)	32(1)
C(10B)	7311(3)	10759(2)	6926(1)	26(1)
C(11B)	7758(2)	9317(2)	8006(1)	20(1)
C(12B)	8483(3)	9537(2)	8469(1)	24(1)
C(13B)	8202(3)	9150(2)	8926(1)	28(1)
C(14B)	7264(3)	8574(2)	8934(1)	28(1)
C(15B)	6556(3)	8396(2)	8465(1)	26(1)
C(16B)	6767(3)	8774(2)	7996(1)	20(1)
C(17B)	9488(3)	10175(3)	8480(2)	32(1)
C(18B)	7017(5)	8139(3)	9432(2)	49(1)
C(19B)	5950(3)	8629(3)	7502(2)	26(1)
C(20B)	7982(2)	9908(2)	6132(1)	18(1)
C(21B)	8679(3)	10511(2)	5898(1)	23(1)
C(22B)	8636(3)	10438(2)	5342(1)	28(1)
C(23B)	7919(3)	9820(2)	5023(1)	27(1)
C(24B)	7216(3)	9252(2)	5275(1)	24(1)
C(25B)	7230(2)	9291(2)	5825(1)	19(1)
C(26B)	9428(3)	11219(3)	6226(2)	32(1)
C(27B)	7894(4)	9767(3)	4424(2)	40(1)
C(28B)	6437(3)	8676(2)	6082(2)	24(1)
C(29B)	10922(2)	7555(2)	7320(1)	17(1)
C(30B)	12190(3)	6733(2)	7861(1)	21(1)
C(31B)	12246(3)	6391(2)	7330(1)	24(1)
C(32B)	11284(2)	8007(2)	8324(1)	17(1)
C(33B)	12136(2)	8677(2)	8477(1)	20(1)
C(34B)	12168(3)	9094(2)	8991(1)	23(1)
C(35B)	11407(3)	8861(2)	9351(1)	23(1)
C(36B)	10595(3)	8183(2)	9182(1)	23(1)
C(37B)	10515(2)	7735(2)	8672(1)	18(1)
C(38B)	13002(3)	8925(3)	8108(2)	31(1)
C(39B)	11466(4)	9344(3)	9897(2)	36(1)
C(40B)	9651(3)	6972(2)	8523(2)	25(1)
C(41B)	11429(2)	6787(2)	6447(1)	18(1)
C(42B)	12112(2)	7362(2)	6190(1)	20(1)
C(43B)	12140(3)	7183(2)	5643(1)	26(1)

C(44B)	11563(3)	6443(2)	5359(1)	25(1)
C(45B)	10929(3)	5869(2)	5637(1)	24(1)
C(46B)	10839(2)	6032(2)	6182(1)	19(1)
C(47B)	12807(3)	8140(2)	6490(2)	27(1)
C(48B)	11624(4)	6268(3)	4770(2)	39(1)
C(49B)	10132(3)	5404(2)	6472(2)	25(1)

Table S7. Bond lengths [Å] and angles [°] for 6a.

Ru(1)-C(1A)	1.814(3)	C(17A)-H(17A)	1.00(3)
Ru(1)-C(8A)	2.095(3)	C(17A)-H(17B)	1.00(3)
Ru(1)-C(29A)	2.131(3)	C(17A)-H(17C)	0.97(3)
Ru(1)-Cl(2A)	2.3658(8)	C(18A)-H(18A)	0.89(4)
Ru(1)-Cl(1A)	2.3739(9)	C(18A)-H(18B)	0.88(4)
N(1A)-C(8A)	1.375(3)	C(18A)-H(18C)	0.99(4)
N(1A)-C(9A)	1.411(4)	C(19A)-H(19A)	0.90(4)
N(1A)-C(11A)	1.431(3)	C(19A)-H(19B)	0.90(4)
N(2A)-C(8A)	1.352(3)	C(19A)-H(19C)	0.88(3)
N(2A)-C(10A)	1.425(4)	C(20A)-C(25A)	1.383(4)
N(2A)-C(20A)	1.438(3)	C(20A)-C(21A)	1.392(4)
N(3A)-C(29A)	1.353(3)	C(21A)-C(22A)	1.396(4)
N(3A)-C(32A)	1.432(3)	C(21A)-C(26A)	1.497(4)
N(3A)-C(30A)	1.436(4)	C(22A)-C(23A)	1.381(4)
N(4A)-C(29A)	1.363(3)	C(22A)-H(22A)	0.92(2)
N(4A)-C(31A)	1.434(4)	C(23A)-C(24A)	1.390(4)
N(4A)-C(41A)	1.436(3)	C(23A)-C(27A)	1.508(5)
C(1A)-C(2A)	1.478(4)	C(24A)-C(25A)	1.387(4)
C(1A)-H(1A)	0.92(3)	C(24A)-H(24A)	0.92(3)
C(2A)-C(7A)	1.388(4)	C(25A)-C(28A)	1.504(4)
C(2A)-C(3A)	1.400(4)	C(26A)-H(26A)	0.96(3)
C(3A)-C(4A)	1.386(4)	C(26A)-H(26B)	0.99(3)
C(3A)-H(3A)	1.02(3)	C(26A)-H(26C)	1.00(3)
C(4A)-C(5A)	1.375(5)	C(27A)-H(27A)	1.01(4)
C(4A)-H(4A)	1.04(4)	C(27A)-H(27B)	0.95(3)
C(5A)-C(6A)	1.370(5)	C(27A)-H(27C)	0.83(4)
C(5A)-H(5A)	1.04(4)	C(28A)-H(28A)	0.98(3)
C(6A)-C(7A)	1.401(5)	C(28A)-H(28B)	1.01(3)
C(6A)-H(6A)	0.92(3)	C(28A)-H(28C)	0.85(3)
C(7A)-H(7A)	0.97(3)	C(30A)-C(31A)	1.421(5)
C(9A)-C(10A)	1.382(5)	C(30A)-H(30A)	0.97(3)
C(9A)-H(9A)	0.79(3)	C(30A)-H(30B)	1.05(4)
C(10A)-H(10A)	0.85(4)	C(31A)-H(31A)	0.92(4)
C(11A)-C(16A)	1.392(4)	C(31A)-H(31B)	0.92(4)
C(11A)-C(12A)	1.404(4)	C(32A)-C(33A)	1.382(4)
C(12A)-C(13A)	1.387(4)	C(32A)-C(37A)	1.397(4)
C(12A)-C(17A)	1.491(4)	C(33A)-C(34A)	1.396(4)
C(13A)-C(14A)	1.383(4)	C(33A)-C(38A)	1.504(4)
C(13A)-H(13A)	0.97(3)	C(34A)-C(35A)	1.377(4)
C(14A)-C(15A)	1.386(4)	C(34A)-H(34A)	0.93(2)
C(14A)-C(18A)	1.502(5)	C(35A)-C(36A)	1.382(4)
C(15A)-C(16A)	1.383(4)	C(35A)-C(39A)	1.509(5)
C(15A)-H(15A)	0.88(2)	C(36A)-C(37A)	1.387(4)
C(16A)-C(19A)	1.507(4)	C(36A)-H(36A)	0.87(2)

C(37A)-C(40A)	1.502(4)	C(5B)-H(5B)	0.99(2)
C(38A)-H(38A)	1.00(3)	C(6B)-C(7B)	1.385(4)
C(38A)-H(38B)	0.92(3)	C(6B)-H(6B)	0.98(2)
C(38A)-H(38C)	0.97(4)	C(7B)-H(7B)	0.90(3)
C(39A)-H(39A)	0.85(4)	C(9B)-C(10B)	1.407(5)
C(39A)-H(39B)	1.02(4)	C(9B)-H(9B1)	1.03(5)
C(39A)-H(39C)	0.95(3)	C(9B)-H(9B2)	0.85(3)
C(40A)-H(40A)	0.96(3)	C(10B)-H(10B)	0.90(4)
C(40A)-H(40B)	1.02(3)	C(10B)-H(10C)	0.99(4)
C(40A)-H(40C)	0.98(3)	C(11B)-C(12B)	1.384(4)
C(41A)-C(46A)	1.390(4)	C(11B)-C(16B)	1.392(4)
C(41A)-C(42A)	1.391(4)	C(12B)-C(13B)	1.390(4)
C(42A)-C(43A)	1.383(4)	C(12B)-C(17B)	1.488(5)
C(42A)-C(47A)	1.510(4)	C(13B)-C(14B)	1.378(5)
C(43A)-C(44A)	1.395(4)	C(13B)-H(13B)	0.83(2)
C(43A)-H(43A)	0.99(3)	C(14B)-C(15B)	1.376(4)
C(44A)-C(45A)	1.373(4)	C(14B)-C(18B)	1.503(5)
C(44A)-C(48A)	1.506(5)	C(15B)-C(16B)	1.386(4)
C(45A)-C(46A)	1.383(4)	C(15B)-H(15B)	0.98(3)
C(45A)-H(45A)	0.89(2)	C(16B)-C(19B)	1.489(4)
C(46A)-C(49A)	1.497(5)	C(17B)-H(17D)	0.80(3)
C(47A)-H(47A)	1.04(3)	C(17B)-H(17E)	0.97(4)
C(47A)-H(47B)	0.90(3)	C(17B)-H(17F)	0.97(3)
C(47A)-H(47C)	0.96(3)	C(18B)-H(18D)	0.96(5)
C(48A)-H(48A)	0.86(4)	C(18B)-H(18E)	0.98(3)
C(48A)-H(48B)	0.91(5)	C(18B)-H(18F)	0.89(4)
C(48A)-H(48C)	0.87(3)	C(19B)-H(19D)	0.95(3)
C(49A)-H(49A)	0.94(3)	C(19B)-H(19E)	0.87(3)
C(49A)-H(49B)	0.93(3)	C(19B)-H(19F)	0.96(3)
C(49A)-H(49C)	1.03(3)	C(20B)-C(25B)	1.386(4)
Ru(2)-C(1B)	1.823(3)	C(20B)-C(21B)	1.398(4)
Ru(2)-C(8B)	2.090(3)	C(21B)-C(22B)	1.392(4)
Ru(2)-C(29B)	2.118(3)	C(21B)-C(26B)	1.492(4)
Ru(2)-Cl(2B)	2.3839(9)	C(22B)-C(23B)	1.378(4)
Ru(2)-Cl(1B)	2.3991(9)	C(22B)-H(22B)	0.93(3)
N(1B)-C(8B)	1.353(3)	C(23B)-C(24B)	1.394(4)
N(1B)-C(9B)	1.432(4)	C(23B)-C(27B)	1.500(4)
N(1B)-C(11B)	1.438(3)	C(24B)-C(25B)	1.381(4)
N(2B)-C(8B)	1.355(3)	C(24B)-H(24B)	0.91(3)
N(2B)-C(20B)	1.434(3)	C(25B)-C(28B)	1.510(4)
N(2B)-C(10B)	1.449(4)	C(26B)-H(26D)	1.02(4)
N(3B)-C(29B)	1.360(3)	C(26B)-H(26E)	0.95(3)
N(3B)-C(30B)	1.424(4)	C(26B)-H(26F)	0.96(3)
N(3B)-C(32B)	1.448(3)	C(27B)-H(27D)	0.90(4)
N(4B)-C(29B)	1.360(3)	C(27B)-H(27E)	1.00(3)
N(4B)-C(31B)	1.425(4)	C(27B)-H(27F)	0.99(4)
N(4B)-C(41B)	1.429(3)	C(28B)-H(28D)	0.87(3)
C(1B)-C(2B)	1.465(4)	C(28B)-H(28E)	0.95(3)
C(1B)-H(1B)	0.88(3)	C(28B)-H(28F)	1.01(3)
C(2B)-C(3B)	1.399(4)	C(30B)-C(31B)	1.397(4)
C(2B)-C(7B)	1.402(4)	C(30B)-H(30C)	0.78(3)
C(3B)-C(4B)	1.374(4)	C(31B)-H(31C)	0.77(3)
C(3B)-H(3B)	0.97(3)	C(32B)-C(37B)	1.393(4)
C(4B)-C(5B)	1.381(5)	C(32B)-C(33B)	1.394(4)
C(4B)-H(4B)	0.85(3)	C(33B)-C(34B)	1.383(4)
C(5B)-C(6B)	1.361(5)	C(33B)-C(38B)	1.500(4)

C(34B)-C(35B)	1.389(4)	C(29A)-N(4A)-C(31A)	112.9(3)
C(34B)-H(34B)	0.93(3)	C(29A)-N(4A)-C(41A)	129.0(2)
C(35B)-C(36B)	1.379(4)	C(31A)-N(4A)-C(41A)	117.9(3)
C(35B)-C(39B)	1.491(4)	C(2A)-C(1A)-Ru(1)	134.5(2)
C(36B)-C(37B)	1.389(4)	C(2A)-C(1A)-H(1A)	109.4(17)
C(36B)-H(36B)	0.81(3)	Ru(1)-C(1A)-H(1A)	116.0(17)
C(37B)-C(40B)	1.498(4)	C(7A)-C(2A)-C(3A)	117.5(3)
C(38B)-H(38D)	0.91(3)	C(7A)-C(2A)-C(1A)	119.1(3)
C(38B)-H(38E)	0.98(4)	C(3A)-C(2A)-C(1A)	123.4(3)
C(38B)-H(38F)	0.84(4)	C(4A)-C(3A)-C(2A)	121.0(3)
C(39B)-H(39D)	0.97(4)	C(4A)-C(3A)-H(3A)	120.1(15)
C(39B)-H(39E)	0.98(4)	C(2A)-C(3A)-H(3A)	118.7(15)
C(39B)-H(39F)	1.02(4)	C(5A)-C(4A)-C(3A)	120.5(4)
C(40B)-H(40D)	0.89(4)	C(5A)-C(4A)-H(4A)	120(2)
C(40B)-H(40E)	0.98(4)	C(3A)-C(4A)-H(4A)	120(2)
C(40B)-H(40F)	0.85(4)	C(6A)-C(5A)-C(4A)	119.9(4)
C(41B)-C(46B)	1.385(4)	C(6A)-C(5A)-H(5A)	115.1(19)
C(41B)-C(42B)	1.390(4)	C(4A)-C(5A)-H(5A)	124.8(19)
C(42B)-C(43B)	1.386(4)	C(5A)-C(6A)-C(7A)	119.9(4)
C(42B)-C(47B)	1.501(4)	C(5A)-C(6A)-H(6A)	123(2)
C(43B)-C(44B)	1.382(4)	C(7A)-C(6A)-H(6A)	117(2)
C(43B)-H(43B)	0.91(3)	C(2A)-C(7A)-C(6A)	121.2(4)
C(44B)-C(45B)	1.389(4)	C(2A)-C(7A)-H(7A)	116.2(18)
C(44B)-C(48B)	1.493(5)	C(6A)-C(7A)-H(7A)	122.6(18)
C(45B)-C(46B)	1.390(4)	N(2A)-C(8A)-N(1A)	104.2(2)
C(45B)-H(45B)	0.93(3)	N(2A)-C(8A)-Ru(1)	130.3(2)
C(46B)-C(49B)	1.507(4)	N(1A)-C(8A)-Ru(1)	125.2(2)
C(47B)-H(47D)	0.94(3)	C(10A)-C(9A)-N(1A)	105.6(3)
C(47B)-H(47E)	0.90(3)	C(10A)-C(9A)-H(9A)	135(3)
C(47B)-H(47F)	1.04(3)	N(1A)-C(9A)-H(9A)	117(3)
C(48B)-H(48D)	0.98(4)	C(9A)-C(10A)-N(2A)	105.9(3)
C(48B)-H(48E)	0.87(4)	C(9A)-C(10A)-H(10A)	131(3)
C(48B)-H(48F)	0.92(4)	N(2A)-C(10A)-H(10A)	122(3)
C(49B)-H(49D)	0.98(3)	C(16A)-C(11A)-C(12A)	121.3(3)
C(49B)-H(49E)	1.00(3)	C(16A)-C(11A)-N(1A)	120.4(3)
C(49B)-H(49F)	0.95(3)	C(12A)-C(11A)-N(1A)	117.5(3)
		C(13A)-C(12A)-C(11A)	117.8(3)
C(1A)-Ru(1)-C(8A)	97.26(12)	C(13A)-C(12A)-C(17A)	121.2(3)
C(1A)-Ru(1)-C(29A)	95.77(12)	C(11A)-C(12A)-C(17A)	120.8(3)
C(8A)-Ru(1)-C(29A)	166.82(11)	C(14A)-C(13A)-C(12A)	122.3(3)
C(1A)-Ru(1)-Cl(2A)	103.06(10)	C(14A)-C(13A)-H(13A)	118.5(16)
C(8A)-Ru(1)-Cl(2A)	82.27(8)	C(12A)-C(13A)-H(13A)	119.2(16)
C(29A)-Ru(1)-Cl(2A)	92.84(8)	C(13A)-C(14A)-C(15A)	117.7(3)
C(1A)-Ru(1)-Cl(1A)	90.35(10)	C(13A)-C(14A)-C(18A)	121.0(3)
C(8A)-Ru(1)-Cl(1A)	90.81(8)	C(15A)-C(14A)-C(18A)	121.3(3)
C(29A)-Ru(1)-Cl(1A)	91.12(8)	C(16A)-C(15A)-C(14A)	122.7(3)
Cl(2A)-Ru(1)-Cl(1A)	165.54(3)	C(16A)-C(15A)-H(15A)	122.1(17)
C(8A)-N(1A)-C(9A)	112.3(3)	C(14A)-C(15A)-H(15A)	115.1(17)
C(8A)-N(1A)-C(11A)	128.1(2)	C(15A)-C(16A)-C(11A)	117.9(3)
C(9A)-N(1A)-C(11A)	118.8(2)	C(15A)-C(16A)-C(19A)	120.3(3)
C(8A)-N(2A)-C(10A)	112.1(2)	C(11A)-C(16A)-C(19A)	121.7(3)
C(8A)-N(2A)-C(20A)	129.9(2)	C(12A)-C(17A)-H(17A)	108.5(16)
C(10A)-N(2A)-C(20A)	117.7(2)	C(12A)-C(17A)-H(17B)	114.2(17)
C(29A)-N(3A)-C(32A)	130.1(2)	H(17A)-C(17A)-H(17B)	107(2)
C(29A)-N(3A)-C(30A)	113.0(3)	C(12A)-C(17A)-H(17C)	110.5(18)
C(32A)-N(3A)-C(30A)	116.4(3)	H(17A)-C(17A)-H(17C)	112(2)

H(17B)-C(17A)-H(17C)	105(2)	N(3A)-C(30A)-H(30B)	105(2)
C(14A)-C(18A)-H(18A)	114(3)	H(30A)-C(30A)-H(30B)	98(3)
C(14A)-C(18A)-H(18B)	111(3)	C(30A)-C(31A)-N(4A)	104.3(3)
H(18A)-C(18A)-H(18B)	101(3)	C(30A)-C(31A)-H(31A)	123(3)
C(14A)-C(18A)-H(18C)	116(2)	N(4A)-C(31A)-H(31A)	108(3)
H(18A)-C(18A)-H(18C)	111(3)	C(30A)-C(31A)-H(31B)	119(3)
H(18B)-C(18A)-H(18C)	103(3)	N(4A)-C(31A)-H(31B)	118(3)
C(16A)-C(19A)-H(19A)	111(3)	H(31A)-C(31A)-H(31B)	85(3)
C(16A)-C(19A)-H(19B)	112(2)	C(33A)-C(32A)-C(37A)	122.0(3)
H(19A)-C(19A)-H(19B)	86(3)	C(33A)-C(32A)-N(3A)	119.5(3)
C(16A)-C(19A)-H(19C)	112(2)	C(37A)-C(32A)-N(3A)	118.0(3)
H(19A)-C(19A)-H(19C)	115(3)	C(32A)-C(33A)-C(34A)	118.0(3)
H(19B)-C(19A)-H(19C)	117(3)	C(32A)-C(33A)-C(38A)	121.5(3)
C(25A)-C(20A)-C(21A)	122.1(3)	C(34A)-C(33A)-C(38A)	120.5(3)
C(25A)-C(20A)-N(2A)	119.6(3)	C(35A)-C(34A)-C(33A)	122.0(3)
C(21A)-C(20A)-N(2A)	117.8(3)	C(35A)-C(34A)-H(34A)	118.5(16)
C(20A)-C(21A)-C(22A)	118.0(3)	C(33A)-C(34A)-H(34A)	119.4(16)
C(20A)-C(21A)-C(26A)	121.2(3)	C(34A)-C(35A)-C(36A)	118.0(3)
C(22A)-C(21A)-C(26A)	120.8(3)	C(34A)-C(35A)-C(39A)	121.6(3)
C(23A)-C(22A)-C(21A)	121.6(3)	C(36A)-C(35A)-C(39A)	120.5(3)
C(23A)-C(22A)-H(22A)	120.9(16)	C(35A)-C(36A)-C(37A)	122.8(3)
C(21A)-C(22A)-H(22A)	117.5(16)	C(35A)-C(36A)-H(36A)	119.9(18)
C(22A)-C(23A)-C(24A)	118.3(3)	C(37A)-C(36A)-H(36A)	117.1(18)
C(22A)-C(23A)-C(27A)	121.0(3)	C(36A)-C(37A)-C(32A)	117.2(3)
C(24A)-C(23A)-C(27A)	120.7(3)	C(36A)-C(37A)-C(40A)	121.6(3)
C(25A)-C(24A)-C(23A)	122.0(3)	C(32A)-C(37A)-C(40A)	121.2(3)
C(25A)-C(24A)-H(24A)	119.6(17)	C(33A)-C(38A)-H(38A)	107.4(18)
C(23A)-C(24A)-H(24A)	118.2(17)	C(33A)-C(38A)-H(38B)	115.0(18)
C(20A)-C(25A)-C(24A)	117.9(3)	H(38A)-C(38A)-H(38B)	112(3)
C(20A)-C(25A)-C(28A)	121.7(3)	C(33A)-C(38A)-H(38C)	114(2)
C(24A)-C(25A)-C(28A)	120.4(3)	H(38A)-C(38A)-H(38C)	104(3)
C(21A)-C(26A)-H(26A)	112.5(18)	H(38B)-C(38A)-H(38C)	104(3)
C(21A)-C(26A)-H(26B)	109.6(15)	C(35A)-C(39A)-H(39A)	110(3)
H(26A)-C(26A)-H(26B)	106(2)	C(35A)-C(39A)-H(39B)	116(2)
C(21A)-C(26A)-H(26C)	109.6(15)	H(39A)-C(39A)-H(39B)	116(3)
H(26A)-C(26A)-H(26C)	107(2)	C(35A)-C(39A)-H(39C)	110(2)
H(26B)-C(26A)-H(26C)	112(2)	H(39A)-C(39A)-H(39C)	105(3)
C(23A)-C(27A)-H(27A)	107(2)	H(39B)-C(39A)-H(39C)	97(3)
C(23A)-C(27A)-H(27B)	114.7(18)	C(37A)-C(40A)-H(40A)	108(2)
H(27A)-C(27A)-H(27B)	101(3)	C(37A)-C(40A)-H(40B)	110.9(18)
C(23A)-C(27A)-H(27C)	116(3)	H(40A)-C(40A)-H(40B)	115(3)
H(27A)-C(27A)-H(27C)	106(4)	C(37A)-C(40A)-H(40C)	112.2(19)
H(27B)-C(27A)-H(27C)	112(3)	H(40A)-C(40A)-H(40C)	106(3)
C(25A)-C(28A)-H(28A)	115.3(18)	H(40B)-C(40A)-H(40C)	104(3)
C(25A)-C(28A)-H(28B)	112.1(16)	C(46A)-C(41A)-C(42A)	121.6(3)
H(28A)-C(28A)-H(28B)	107(2)	C(46A)-C(41A)-N(4A)	119.3(3)
C(25A)-C(28A)-H(28C)	113(2)	C(42A)-C(41A)-N(4A)	118.6(3)
H(28A)-C(28A)-H(28C)	103(3)	C(43A)-C(42A)-C(41A)	117.9(3)
H(28B)-C(28A)-H(28C)	106(3)	C(43A)-C(42A)-C(47A)	120.5(3)
N(3A)-C(29A)-N(4A)	104.4(2)	C(41A)-C(42A)-C(47A)	121.4(3)
N(3A)-C(29A)-Ru(1)	125.8(2)	C(42A)-C(43A)-C(44A)	121.9(3)
N(4A)-C(29A)-Ru(1)	129.8(2)	C(42A)-C(43A)-H(43A)	119.7(17)
C(31A)-C(30A)-N(3A)	104.3(3)	C(44A)-C(43A)-H(43A)	118.2(17)
C(31A)-C(30A)-H(30A)	123.2(19)	C(45A)-C(44A)-C(43A)	117.8(3)
N(3A)-C(30A)-H(30A)	113.6(19)	C(45A)-C(44A)-C(48A)	121.7(3)
C(31A)-C(30A)-H(30B)	111(2)	C(43A)-C(44A)-C(48A)	120.5(3)

C(44A)-C(45A)-C(46A)	122.7(3)	C(3B)-C(4B)-H(4B)	120(2)
C(44A)-C(45A)-H(45A)	121.1(17)	C(5B)-C(4B)-H(4B)	118(2)
C(46A)-C(45A)-H(45A)	116.1(17)	C(6B)-C(5B)-C(4B)	119.6(3)
C(45A)-C(46A)-C(41A)	117.7(3)	C(6B)-C(5B)-H(5B)	119.9(15)
C(45A)-C(46A)-C(49A)	120.6(3)	C(4B)-C(5B)-H(5B)	120.5(15)
C(41A)-C(46A)-C(49A)	121.7(3)	C(5B)-C(6B)-C(7B)	119.9(3)
C(42A)-C(47A)-H(47A)	108.2(18)	C(5B)-C(6B)-H(6B)	120.4(16)
C(42A)-C(47A)-H(47B)	113.1(17)	C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.7(16)
H(47A)-C(47A)-H(47B)	102(2)	C(6B)-C(7B)-C(2B)	121.6(3)
C(42A)-C(47A)-H(47C)	112(2)	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.7(19)
H(47A)-C(47A)-H(47C)	113(3)	C(2B)-C(7B)-H(7B)	118.6(19)
H(47B)-C(47A)-H(47C)	109(3)	N(1B)-C(8B)-N(2B)	105.2(2)
C(44A)-C(48A)-H(48A)	113(2)	N(1B)-C(8B)-Ru(2)	121.2(2)
C(44A)-C(48A)-H(48B)	113(3)	N(2B)-C(8B)-Ru(2)	131.1(2)
H(48A)-C(48A)-H(48B)	105(4)	C(10B)-C(9B)-N(1B)	105.1(3)
C(44A)-C(48A)-H(48C)	119(2)	C(10B)-C(9B)-H(9B1)	103(2)
H(48A)-C(48A)-H(48C)	110(3)	N(1B)-C(9B)-H(9B1)	103(2)
H(48B)-C(48A)-H(48C)	96(3)	C(10B)-C(9B)-H(9B2)	127(2)
C(46A)-C(49A)-H(49A)	114(2)	N(1B)-C(9B)-H(9B2)	117(2)
C(46A)-C(49A)-H(49B)	115(2)	H(9B1)-C(9B)-H(9B2)	98(3)
H(49A)-C(49A)-H(49B)	111(3)	C(9B)-C(10B)-N(2B)	104.6(3)
C(46A)-C(49A)-H(49C)	113.0(16)	C(9B)-C(10B)-H(10B)	122(3)
H(49A)-C(49A)-H(49C)	100(3)	N(2B)-C(10B)-H(10B)	106(3)
H(49B)-C(49A)-H(49C)	102(3)	C(9B)-C(10B)-H(10C)	124(2)
C(1B)-Ru(2)-C(8B)	96.85(12)	N(2B)-C(10B)-H(10C)	117(2)
C(1B)-Ru(2)-C(29B)	99.25(12)	H(10B)-C(10B)-H(10C)	82(3)
C(8B)-Ru(2)-C(29B)	163.04(11)	C(12B)-C(11B)-C(16B)	122.7(3)
C(1B)-Ru(2)-Cl(2B)	102.90(10)	C(12B)-C(11B)-N(1B)	119.2(3)
C(8B)-Ru(2)-Cl(2B)	94.88(8)	C(16B)-C(11B)-N(1B)	117.4(3)
C(29B)-Ru(2)-Cl(2B)	86.69(8)	C(11B)-C(12B)-C(13B)	116.3(3)
C(1B)-Ru(2)-Cl(1B)	90.42(10)	C(11B)-C(12B)-C(17B)	121.9(3)
C(8B)-Ru(2)-Cl(1B)	83.47(8)	C(13B)-C(12B)-C(17B)	121.8(3)
C(29B)-Ru(2)-Cl(1B)	91.11(8)	C(14B)-C(13B)-C(12B)	123.4(3)
Cl(2B)-Ru(2)-Cl(1B)	166.67(3)	C(14B)-C(13B)-H(13B)	120.1(18)
C(8B)-N(1B)-C(9B)	112.6(3)	C(12B)-C(13B)-H(13B)	116.5(18)
C(8B)-N(1B)-C(11B)	127.9(2)	C(15B)-C(14B)-C(13B)	117.8(3)
C(9B)-N(1B)-C(11B)	117.7(2)	C(15B)-C(14B)-C(18B)	120.5(4)
C(8B)-N(2B)-C(20B)	129.3(2)	C(13B)-C(14B)-C(18B)	121.7(4)
C(8B)-N(2B)-C(10B)	112.0(2)	C(14B)-C(15B)-C(16B)	122.0(3)
C(20B)-N(2B)-C(10B)	117.9(2)	C(14B)-C(15B)-H(15B)	120.7(16)
C(29B)-N(3B)-C(30B)	113.0(2)	C(16B)-C(15B)-H(15B)	117.3(16)
C(29B)-N(3B)-C(32B)	130.8(2)	C(15B)-C(16B)-C(11B)	117.7(3)
C(30B)-N(3B)-C(32B)	115.7(2)	C(15B)-C(16B)-C(19B)	121.4(3)
C(29B)-N(4B)-C(31B)	112.5(2)	C(11B)-C(16B)-C(19B)	120.9(3)
C(29B)-N(4B)-C(41B)	128.9(2)	C(12B)-C(17B)-H(17D)	114(3)
C(31B)-N(4B)-C(41B)	118.1(2)	C(12B)-C(17B)-H(17E)	110(2)
C(2B)-C(1B)-Ru(2)	137.6(2)	H(17D)-C(17B)-H(17E)	118(3)
C(2B)-C(1B)-H(1B)	112.2(18)	C(12B)-C(17B)-H(17F)	116(2)
Ru(2)-C(1B)-H(1B)	110.1(18)	H(17D)-C(17B)-H(17F)	94(3)
C(3B)-C(2B)-C(7B)	117.2(3)	H(17E)-C(17B)-H(17F)	103(3)
C(3B)-C(2B)-C(1B)	125.8(3)	C(14B)-C(18B)-H(18D)	112(3)
C(7B)-C(2B)-C(1B)	117.0(3)	C(14B)-C(18B)-H(18E)	109(2)
C(4B)-C(3B)-C(2B)	120.3(3)	H(18D)-C(18B)-H(18E)	108(3)
C(4B)-C(3B)-H(3B)	120.4(17)	C(14B)-C(18B)-H(18F)	114(2)
C(2B)-C(3B)-H(3B)	119.3(17)	H(18D)-C(18B)-H(18F)	112(4)
C(3B)-C(4B)-C(5B)	121.3(3)	H(18E)-C(18B)-H(18F)	101(3)

C(16B)-C(19B)-H(19D)	111.1(18)	C(32B)-C(33B)-C(38B)	121.7(3)
C(16B)-C(19B)-H(19E)	110(2)	C(33B)-C(34B)-C(35B)	122.7(3)
H(19D)-C(19B)-H(19E)	108(3)	C(33B)-C(34B)-H(34B)	114.3(17)
C(16B)-C(19B)-H(19F)	111.8(19)	C(35B)-C(34B)-H(34B)	123.0(17)
H(19D)-C(19B)-H(19F)	108(3)	C(36B)-C(35B)-C(34B)	117.6(3)
H(19E)-C(19B)-H(19F)	108(3)	C(36B)-C(35B)-C(39B)	121.8(3)
C(25B)-C(20B)-C(21B)	121.7(3)	C(34B)-C(35B)-C(39B)	120.5(3)
C(25B)-C(20B)-N(2B)	119.3(3)	C(35B)-C(36B)-C(37B)	122.7(3)
C(21B)-C(20B)-N(2B)	118.6(3)	C(35B)-C(36B)-H(36B)	119(2)
C(22B)-C(21B)-C(20B)	117.4(3)	C(37B)-C(36B)-H(36B)	119(2)
C(22B)-C(21B)-C(26B)	120.9(3)	C(36B)-C(37B)-C(32B)	117.3(3)
C(20B)-C(21B)-C(26B)	121.8(3)	C(36B)-C(37B)-C(40B)	120.0(3)
C(23B)-C(22B)-C(21B)	122.7(3)	C(32B)-C(37B)-C(40B)	122.6(3)
C(23B)-C(22B)-H(22B)	118.8(17)	C(33B)-C(38B)-H(38D)	108.7(19)
C(21B)-C(22B)-H(22B)	118.5(17)	C(33B)-C(38B)-H(38E)	110(2)
C(22B)-C(23B)-C(24B)	117.8(3)	H(38D)-C(38B)-H(38E)	106(3)
C(22B)-C(23B)-C(27B)	121.0(3)	C(33B)-C(38B)-H(38F)	115(3)
C(24B)-C(23B)-C(27B)	121.2(3)	H(38D)-C(38B)-H(38F)	111(3)
C(25B)-C(24B)-C(23B)	122.0(3)	H(38E)-C(38B)-H(38F)	106(3)
C(25B)-C(24B)-H(24B)	117.5(18)	C(35B)-C(39B)-H(39D)	113(2)
C(23B)-C(24B)-H(24B)	120.4(18)	C(35B)-C(39B)-H(39E)	108(2)
C(24B)-C(25B)-C(20B)	118.4(3)	H(39D)-C(39B)-H(39E)	108(3)
C(24B)-C(25B)-C(28B)	120.3(3)	C(35B)-C(39B)-H(39F)	117(2)
C(20B)-C(25B)-C(28B)	121.3(3)	H(39D)-C(39B)-H(39F)	105(3)
C(21B)-C(26B)-H(26D)	115(2)	H(39E)-C(39B)-H(39F)	107(3)
C(21B)-C(26B)-H(26E)	109.0(18)	C(37B)-C(40B)-H(40D)	112(3)
H(26D)-C(26B)-H(26E)	106(3)	C(37B)-C(40B)-H(40E)	112(3)
C(21B)-C(26B)-H(26F)	112(2)	H(40D)-C(40B)-H(40E)	119(4)
H(26D)-C(26B)-H(26F)	103(3)	C(37B)-C(40B)-H(40F)	113(3)
H(26E)-C(26B)-H(26F)	111(3)	H(40D)-C(40B)-H(40F)	106(4)
C(23B)-C(27B)-H(27D)	110(2)	H(40E)-C(40B)-H(40F)	93(3)
C(23B)-C(27B)-H(27E)	114.9(19)	C(46B)-C(41B)-C(42B)	122.6(3)
H(27D)-C(27B)-H(27E)	103(3)	C(46B)-C(41B)-N(4B)	118.6(3)
C(23B)-C(27B)-H(27F)	110(2)	C(42B)-C(41B)-N(4B)	118.3(3)
H(27D)-C(27B)-H(27F)	111(3)	C(43B)-C(42B)-C(41B)	117.3(3)
H(27E)-C(27B)-H(27F)	108(3)	C(43B)-C(42B)-C(47B)	120.7(3)
C(25B)-C(28B)-H(28D)	111(2)	C(41B)-C(42B)-C(47B)	121.9(3)
C(25B)-C(28B)-H(28E)	117.7(18)	C(44B)-C(43B)-C(42B)	122.4(3)
H(28D)-C(28B)-H(28E)	102(3)	C(44B)-C(43B)-H(43B)	118.8(17)
C(25B)-C(28B)-H(28F)	107.2(18)	C(42B)-C(43B)-H(43B)	118.9(17)
H(28D)-C(28B)-H(28F)	110(3)	C(43B)-C(44B)-C(45B)	118.1(3)
H(28E)-C(28B)-H(28F)	108(2)	C(43B)-C(44B)-C(48B)	120.8(3)
N(4B)-C(29B)-N(3B)	104.1(2)	C(45B)-C(44B)-C(48B)	121.2(3)
N(4B)-C(29B)-Ru(2)	128.4(2)	C(44B)-C(45B)-C(46B)	122.0(3)
N(3B)-C(29B)-Ru(2)	127.1(2)	C(44B)-C(45B)-H(45B)	121.1(17)
C(31B)-C(30B)-N(3B)	104.8(3)	C(46B)-C(45B)-H(45B)	116.9(17)
C(31B)-C(30B)-H(30C)	130(2)	C(41B)-C(46B)-C(45B)	117.5(3)
N(3B)-C(30B)-H(30C)	126(2)	C(41B)-C(46B)-C(49B)	121.6(3)
C(30B)-C(31B)-N(4B)	105.6(3)	C(45B)-C(46B)-C(49B)	120.9(3)
C(30B)-C(31B)-H(31C)	136(3)	C(42B)-C(47B)-H(47D)	112.0(19)
N(4B)-C(31B)-H(31C)	119(3)	C(42B)-C(47B)-H(47E)	109.8(18)
C(37B)-C(32B)-C(33B)	122.3(3)	H(47D)-C(47B)-H(47E)	107(3)
C(37B)-C(32B)-N(3B)	118.9(3)	C(42B)-C(47B)-H(47F)	111.1(15)
C(33B)-C(32B)-N(3B)	117.4(3)	H(47D)-C(47B)-H(47F)	104(2)
C(34B)-C(33B)-C(32B)	117.3(3)	H(47E)-C(47B)-H(47F)	113(2)
C(34B)-C(33B)-C(38B)	121.0(3)	C(44B)-C(48B)-H(48D)	114(2)

C(44B)-C(48B)-H(48E)	111(3)	C(46B)-C(49B)-H(49E)	112.4(18)
H(48D)-C(48B)-H(48E)	106(3)	H(49D)-C(49B)-H(49E)	114(3)
C(44B)-C(48B)-H(48F)	113(2)	C(46B)-C(49B)-H(49F)	109.2(17)
H(48D)-C(48B)-H(48F)	99(3)	H(49D)-C(49B)-H(49F)	99(2)
H(48E)-C(48B)-H(48F)	113(3)	H(49E)-C(49B)-H(49F)	110(2)
C(46B)-C(49B)-H(49D)	111.8(18)		

Table S8. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) for 6a. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2}U^{11} + \dots + 2hka^*b^*U^{12}]$

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Ru(1)	130(1)	140(1)	183(1)	9(1)	8(1)	15(1)
Cl(1A)	183(4)	167(4)	364(5)	3(3)	39(3)	45(3)
Cl(2A)	184(4)	190(4)	241(4)	-13(3)	26(3)	33(3)
N(1A)	129(13)	259(15)	207(14)	59(12)	20(11)	-19(11)
N(2A)	149(13)	191(14)	179(14)	36(11)	-14(11)	-16(11)
N(3A)	132(13)	218(15)	249(15)	-51(12)	18(11)	-20(11)
N(4A)	146(13)	230(15)	270(16)	-71(12)	8(11)	-38(11)
C(1A)	121(15)	209(18)	203(18)	-40(14)	27(13)	-21(13)
C(2A)	148(16)	296(19)	225(18)	69(15)	5(13)	4(14)
C(3A)	305(19)	280(20)	290(20)	112(16)	107(16)	98(15)
C(4A)	350(20)	340(20)	570(30)	210(20)	220(20)	118(18)
C(5A)	240(20)	520(30)	540(30)	330(20)	45(18)	84(18)
C(6A)	280(20)	590(30)	270(20)	210(20)	-12(17)	-91(19)
C(7A)	269(19)	370(20)	220(20)	45(17)	9(15)	-79(17)
C(8A)	200(16)	117(15)	194(17)	32(13)	23(13)	82(13)
C(9A)	186(18)	330(20)	410(20)	134(19)	-70(16)	-100(16)
C(10A)	249(19)	370(20)	260(20)	50(17)	-7(16)	-146(16)
C(11A)	146(15)	221(17)	192(17)	58(14)	14(13)	-20(13)
C(12A)	143(15)	198(17)	255(18)	33(14)	48(13)	-8(13)
C(13A)	195(17)	221(18)	257(19)	67(15)	17(14)	35(14)
C(14A)	197(17)	330(20)	236(19)	95(15)	20(14)	2(15)
C(15A)	299(19)	280(20)	203(19)	8(16)	83(16)	5(15)
C(16A)	163(16)	217(17)	236(18)	52(14)	46(13)	12(13)
C(17A)	247(19)	207(19)	280(20)	-4(16)	57(16)	-9(16)
C(18A)	360(20)	500(30)	290(20)	140(20)	27(19)	90(20)
C(19A)	340(20)	310(20)	290(20)	64(19)	159(19)	123(17)
C(20A)	146(15)	213(17)	198(17)	32(14)	-37(13)	-12(13)
C(21A)	148(15)	191(17)	246(18)	11(14)	-28(13)	1(13)
C(22A)	211(17)	247(19)	227(19)	-27(15)	19(14)	42(14)
C(23A)	254(18)	267(19)	199(18)	22(15)	-13(14)	-5(15)
C(24A)	242(18)	219(19)	260(20)	35(15)	-55(15)	40(15)
C(25A)	174(16)	198(17)	231(18)	-12(14)	6(14)	0(13)
C(26A)	270(20)	215(19)	260(20)	8(16)	-3(17)	21(16)
C(27A)	480(30)	420(30)	210(20)	26(19)	-29(19)	160(20)
C(28A)	280(20)	310(20)	230(20)	4(17)	23(17)	77(17)
C(29A)	168(16)	121(16)	242(18)	24(13)	25(13)	23(12)
C(30A)	260(20)	380(20)	450(30)	-180(20)	47(18)	-129(18)
C(31A)	210(20)	360(20)	380(20)	-100(19)	20(17)	-63(18)
C(32A)	172(16)	252(18)	155(17)	-28(14)	-28(13)	-36(14)
C(33A)	155(16)	250(18)	244(18)	16(15)	-18(14)	-66(14)

C(34A)	281(19)	300(20)	260(20)	41(17)	-75(16)	-65(16)
C(35A)	216(17)	370(20)	185(18)	9(15)	-30(14)	-34(15)
C(36A)	171(17)	250(20)	280(20)	-85(16)	-42(14)	19(15)
C(37A)	216(17)	213(18)	206(18)	-12(14)	-31(14)	-52(14)
C(38A)	340(20)	240(20)	380(30)	44(19)	-10(19)	20(17)
C(39A)	270(20)	550(30)	290(20)	30(20)	48(18)	-20(20)
C(40A)	310(20)	260(20)	230(20)	-11(16)	50(17)	43(16)
C(41A)	130(15)	236(18)	213(18)	2(14)	17(13)	-6(13)
C(42A)	138(16)	228(18)	250(19)	32(15)	19(14)	-31(13)
C(43A)	171(17)	270(20)	340(20)	-24(16)	51(15)	39(15)
C(44A)	151(16)	430(20)	215(19)	23(16)	26(14)	-7(15)
C(45A)	242(19)	360(20)	320(20)	143(18)	-5(16)	-13(16)
C(46A)	126(16)	244(19)	390(20)	65(16)	-20(15)	-16(13)
C(47A)	250(20)	280(20)	340(20)	73(18)	75(17)	20(17)
C(48A)	300(20)	780(40)	240(20)	30(20)	34(19)	60(20)
C(49A)	270(20)	250(20)	550(30)	80(20)	-80(20)	7(17)
Ru(2)	143(1)	153(1)	158(1)	15(1)	13(1)	21(1)
Cl(1B)	194(4)	179(4)	322(5)	1(3)	23(3)	-6(3)
Cl(2B)	184(4)	200(4)	214(4)	44(3)	40(3)	-7(3)
N(1B)	241(14)	156(14)	210(15)	15(11)	60(11)	86(11)
N(2B)	205(14)	155(13)	175(14)	17(11)	16(11)	41(11)
N(3B)	170(13)	129(13)	167(14)	16(11)	7(11)	43(10)
N(4B)	149(13)	206(14)	157(14)	8(11)	7(10)	70(11)
C(1B)	137(16)	182(17)	272(19)	58(14)	56(14)	23(13)
C(2B)	146(15)	218(17)	206(17)	26(14)	4(13)	49(13)
C(3B)	182(17)	245(19)	212(19)	18(15)	18(14)	8(14)
C(4B)	243(19)	330(20)	290(20)	-49(17)	-7(16)	-23(17)
C(5B)	320(20)	390(20)	220(20)	-88(17)	-89(16)	42(17)
C(6B)	420(20)	370(20)	166(19)	47(16)	73(16)	85(18)
C(7B)	295(19)	235(19)	230(20)	55(16)	63(15)	44(16)
C(8B)	144(15)	187(17)	157(16)	-13(13)	32(13)	-2(13)
C(9B)	350(20)	260(20)	360(20)	65(17)	87(19)	188(18)
C(10B)	280(20)	220(20)	270(20)	8(16)	-2(16)	62(15)
C(11B)	247(17)	170(17)	165(17)	-33(13)	34(14)	112(14)
C(12B)	244(18)	226(18)	233(19)	-37(15)	4(14)	142(14)
C(13B)	360(20)	320(20)	112(18)	-61(16)	-66(16)	217(17)
C(14B)	420(20)	252(19)	195(19)	37(15)	93(16)	166(16)
C(15B)	287(19)	236(19)	250(20)	-33(15)	95(16)	72(16)
C(16B)	228(17)	195(17)	187(17)	-22(14)	42(14)	94(14)
C(17B)	350(20)	330(20)	270(20)	-60(19)	9(19)	72(18)
C(18B)	780(40)	500(30)	240(20)	130(20)	160(20)	290(30)
C(19B)	240(20)	260(20)	300(20)	37(17)	67(17)	60(17)
C(20B)	178(16)	195(17)	176(17)	41(13)	8(13)	71(13)
C(21B)	231(17)	215(18)	235(18)	56(14)	-33(14)	-35(14)
C(22B)	212(18)	390(20)	250(20)	135(17)	6(15)	-91(16)
C(23B)	204(17)	390(20)	207(18)	94(16)	-7(14)	-5(15)
C(24B)	202(17)	270(20)	230(19)	14(15)	-66(15)	-22(15)
C(25B)	148(15)	194(17)	227(18)	44(14)	-9(13)	8(13)
C(26B)	300(20)	380(20)	290(20)	69(19)	-23(18)	-130(18)
C(27B)	320(20)	650(30)	230(20)	100(20)	-19(18)	-100(20)
C(28B)	235(19)	240(20)	230(20)	16(17)	32(16)	-1(16)
C(29B)	138(15)	164(16)	206(17)	1(13)	28(13)	-28(12)
C(30B)	241(18)	189(18)	195(19)	-11(15)	0(15)	80(14)
C(31B)	212(18)	260(20)	260(20)	33(16)	13(15)	113(15)
C(32B)	185(16)	142(16)	170(17)	-25(13)	-39(13)	65(13)
C(33B)	177(16)	178(17)	234(18)	-12(14)	-4(14)	53(13)

C(34B)	189(17)	182(18)	290(20)	-28(15)	-61(15)	-5(14)
C(35B)	263(18)	230(18)	186(18)	-33(14)	-47(14)	91(15)
C(36B)	245(19)	241(19)	203(19)	28(15)	37(15)	49(15)
C(37B)	180(16)	172(17)	193(17)	15(13)	-13(13)	63(13)
C(38B)	230(20)	280(20)	400(20)	-35(19)	33(18)	-54(18)
C(39B)	430(20)	360(20)	250(20)	-80(18)	-50(19)	80(20)
C(40B)	300(20)	220(20)	220(20)	-20(16)	23(17)	-64(16)
C(41B)	165(16)	199(17)	164(17)	-32(13)	36(13)	83(13)
C(42B)	176(16)	203(17)	219(18)	-24(14)	44(13)	45(13)
C(43B)	228(18)	290(20)	280(20)	49(16)	106(15)	9(15)
C(44B)	245(18)	292(19)	209(18)	-34(15)	89(14)	31(15)
C(45B)	232(18)	204(19)	280(20)	-53(16)	21(15)	32(15)
C(46B)	171(16)	201(17)	209(18)	-2(14)	22(13)	50(13)
C(47B)	234(19)	260(20)	320(20)	19(17)	95(17)	4(16)
C(48B)	430(30)	520(30)	230(20)	-60(20)	120(20)	-60(20)
C(49B)	264(19)	260(20)	240(20)	27(17)	65(16)	10(16)

Table S9. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6a.

	x	y	z	U_{iso}
H(1A)	4490(20)	3630(19)	8854(11)	23(9)
H(3A)	5190(20)	1487(17)	8179(11)	19(8)
H(4A)	5760(30)	160(30)	8642(16)	97(16)
H(5A)	5760(30)	230(20)	9633(14)	66(12)
H(6A)	5200(30)	1600(20)	10048(13)	39(10)
H(7A)	4790(30)	2920(20)	9604(12)	37(10)
H(9A)	8090(30)	5490(20)	7693(14)	50(13)
H(10A)	8580(30)	5050(30)	8623(15)	72(14)
H(13A)	4650(20)	6598(18)	6659(10)	19(8)
H(15A)	6190(20)	4583(17)	5900(10)	7(7)
H(17A)	6200(30)	6686(19)	7781(11)	29(9)
H(17B)	5270(20)	6000(20)	7974(12)	35(9)
H(17C)	4820(30)	6770(20)	7619(12)	39(10)
H(18A)	5230(40)	5750(30)	5392(17)	85(16)
H(18B)	4810(30)	6500(30)	5668(15)	72(16)
H(18C)	3990(30)	5730(20)	5565(14)	64(13)
H(19A)	7960(40)	3870(30)	6565(16)	82(16)
H(19B)	7160(30)	3340(30)	6392(16)	70(15)
H(19C)	7360(30)	3470(20)	6999(13)	32(10)
H(22A)	6250(20)	4949(17)	10149(10)	6(7)
H(24A)	7920(20)	2650(19)	9830(11)	25(8)
H(26A)	6470(30)	5950(20)	9023(12)	32(9)
H(26B)	5770(20)	5979(18)	9516(11)	15(8)
H(26C)	5270(20)	5434(17)	8936(10)	17(8)
H(27A)	6470(30)	3110(30)	10690(15)	75(14)
H(27B)	6940(20)	4040(20)	10902(11)	25(9)
H(27C)	7720(40)	3280(30)	10783(16)	87(17)
H(28A)	7630(30)	2550(20)	8443(13)	37(10)
H(28B)	8260(20)	2090(20)	8938(11)	34(9)
H(28C)	8720(30)	2890(20)	8697(13)	43(11)
H(30A)	1750(30)	1440(20)	6772(13)	45(11)
H(30B)	1440(40)	2440(30)	6713(17)	102(17)

H(31A)	620(40)	2410(30)	7518(16)	95(17)
H(31B)	1000(40)	1660(30)	7625(16)	87(16)
H(34A)	4590(20)	3355(17)	5741(10)	11(7)
H(36A)	5030(20)	786(17)	6026(10)	10(8)
H(38A)	2490(30)	3790(20)	6590(12)	40(10)
H(38B)	3370(20)	4330(20)	6271(11)	22(9)
H(38C)	3650(30)	4220(20)	6853(14)	56(12)
H(39A)	5650(30)	2390(30)	5172(15)	61(15)
H(39B)	5600(30)	1300(30)	5126(15)	69(13)
H(39C)	6480(30)	1870(20)	5473(13)	50(11)
H(40A)	4430(30)	120(20)	6760(13)	50(11)
H(40B)	3150(30)	480(20)	6910(12)	49(11)
H(40C)	4300(30)	760(20)	7267(13)	46(11)
H(43A)	620(20)	4700(20)	8983(11)	33(9)
H(45A)	1840(20)	2372(18)	9521(10)	13(8)
H(47A)	180(30)	4060(20)	7750(13)	53(11)
H(47B)	1410(20)	4328(18)	7691(11)	15(8)
H(47C)	840(30)	5000(20)	8053(13)	54(12)
H(48A)	190(30)	3890(20)	9926(14)	57(13)
H(48B)	1130(40)	4520(30)	9998(18)	110(20)
H(48C)	1290(30)	3710(20)	10186(14)	45(12)
H(49A)	2830(30)	1250(20)	8970(13)	46(11)
H(49B)	2820(30)	1360(20)	8368(14)	59(14)
H(49C)	1760(30)	1000(20)	8595(11)	34(9)
H(1B)	10150(20)	8669(18)	6261(10)	16(8)
H(3B)	8090(20)	6833(18)	6266(11)	23(8)
H(4B)	7440(20)	6010(19)	5478(11)	23(9)
H(5B)	7840(20)	6314(17)	4635(10)	11(7)
H(6B)	9150(20)	7522(17)	4579(10)	13(7)
H(7B)	9860(20)	8360(20)	5362(11)	29(9)
H(9B1)	8010(40)	11100(30)	7638(17)	105(17)
H(9B2)	6870(30)	10790(20)	7689(12)	32(10)
H(10B)	6630(40)	10760(30)	6720(16)	90(16)
H(10C)	7410(30)	11360(30)	6779(15)	76(14)
H(13B)	8630(20)	9291(16)	9207(10)	1(7)
H(15B)	5880(20)	7984(18)	8450(10)	22(8)
H(17D)	9860(30)	10090(20)	8229(13)	38(12)
H(17E)	9900(30)	10240(30)	8836(17)	82(15)
H(17F)	9320(30)	10800(20)	8409(12)	44(11)
H(18D)	6250(40)	7880(30)	9401(18)	100(20)
H(18E)	7090(30)	8610(20)	9736(13)	40(10)
H(18F)	7540(30)	7740(20)	9543(14)	54(12)
H(19D)	5870(20)	9170(20)	7321(11)	29(9)
H(19E)	5270(30)	8470(20)	7583(13)	47(11)
H(19F)	6200(30)	8160(20)	7257(12)	43(10)
H(22B)	9140(20)	10795(18)	5181(10)	16(8)
H(24B)	6750(20)	8814(19)	5079(11)	24(9)
H(26D)	9030(30)	11820(30)	6333(14)	70(13)
H(26E)	10040(30)	11384(19)	6029(11)	28(9)
H(26F)	9720(30)	11020(20)	6566(14)	53(12)
H(27D)	7270(30)	10050(20)	4285(14)	61(13)
H(27E)	7800(30)	9130(20)	4243(13)	43(11)
H(27F)	8610(30)	10040(20)	4319(13)	61(12)
H(28D)	5980(30)	8990(20)	6273(13)	39(11)
H(28E)	6780(20)	8280(20)	6329(12)	29(9)
H(28F)	5980(30)	8290(20)	5785(13)	43(10)

H(30C)	12510(30)	6580(20)	8125(12)	42(12)
H(31C)	12610(30)	6030(20)	7187(14)	55(13)
H(34B)	12740(20)	9548(18)	9072(10)	20(8)
H(36B)	10170(20)	8018(18)	9395(11)	13(8)
H(38D)	13480(30)	9380(20)	8279(12)	31(10)
H(38E)	12610(30)	9180(20)	7794(15)	69(13)
H(38F)	13380(30)	8480(30)	7990(16)	78(16)
H(39D)	10930(30)	9100(20)	10118(15)	72(14)
H(39E)	11280(30)	9980(30)	9858(14)	65(13)
H(39F)	12240(40)	9350(30)	10123(16)	86(15)
H(40D)	9450(40)	6700(30)	8808(17)	88(16)
H(40E)	9850(40)	6590(30)	8208(18)	102(17)
H(40F)	9020(40)	7140(30)	8364(18)	94(18)
H(43B)	12550(20)	7566(17)	5465(10)	9(7)
H(45B)	10530(20)	5366(18)	5463(10)	16(8)
H(47D)	12340(30)	8600(20)	6623(12)	34(9)
H(47E)	13260(20)	8397(19)	6269(11)	23(9)
H(47F)	13270(20)	7929(18)	6832(11)	25(8)
H(48D)	11650(30)	5620(30)	4646(15)	75(15)
H(48E)	12240(30)	6520(30)	4672(15)	65(14)
H(48F)	10960(30)	6420(30)	4568(15)	65(14)
H(49D)	10610(30)	5070(20)	6730(12)	34(9)
H(49E)	9590(30)	5000(20)	6221(13)	49(11)
H(49F)	9710(20)	5761(19)	6716(11)	26(9)
