

SUPPLEMENTARY MATERIAL FOR DEPOSIT

Synthesis, Structure and Catalytic Study of Chloro-Bridged Two-Core Ruthenium Carbene Complexes

Weixia Qiao^a, Mingbo Shao^a, and Jianhui Wang^{a,*}

*^a Department of Chemistry, College of Science, Tianjin University, Tianjin, 300072, PR
China*

1. Crystallographic data of 8 and 9

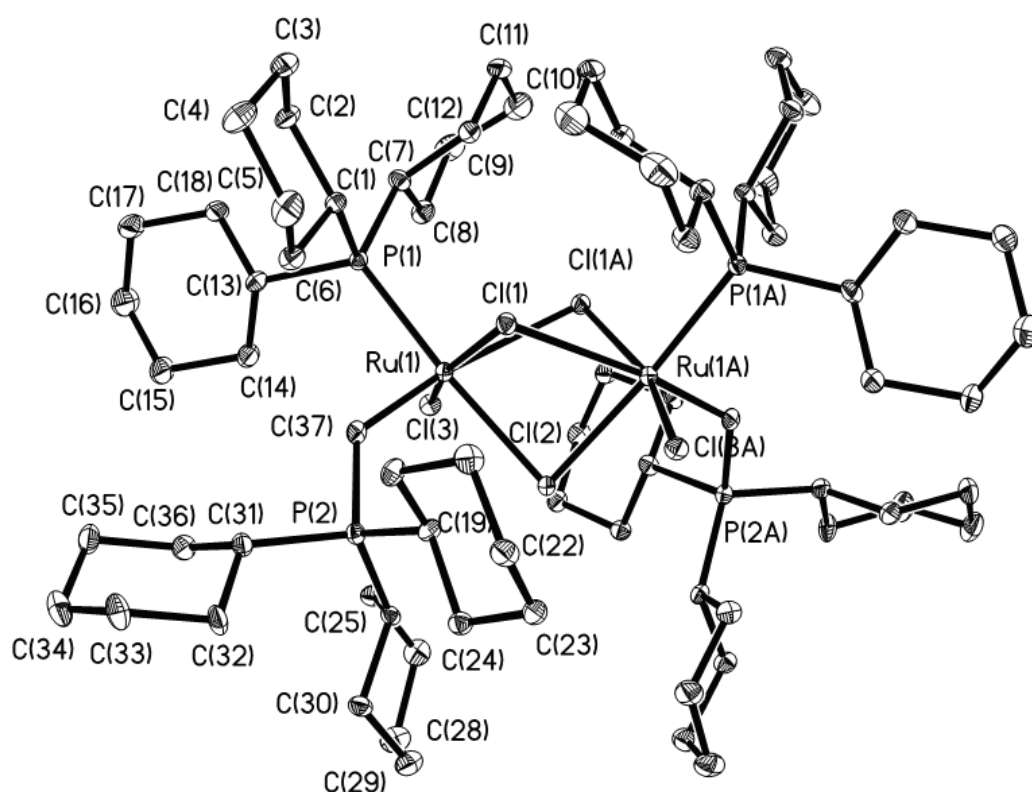


Fig. 1 Perspective view of **8** with thermal ellipsoids drawn at the 50% probability level. For clarity, the $[\text{BF}_4]^-$ and the CH_2Cl_2 molecules of the crystallization are omitted

Table **8-1**. Crystal data and structure refinement for r91106g.

Identification code	r91106g
Empirical formula	$\text{C}_{77} \text{H}_{140} \text{B} \text{Cl}_{11} \text{F}_4 \text{P}_4 \text{Ru}_2$
Formula weight	1868.67
Temperature	113(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, C2/c
Unit cell dimensions	$a = 31.088(6)$ Å $\alpha = 90^\circ$. $b = 17.516(4)$ Å $\beta = 119.49(3)^\circ$. $c = 18.588(4)$ Å $\gamma = 90^\circ$.
Volume	$8811(3)$ Å ³
Z	4
Calculated density	1.409 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.797 mm^{-1}
F(000)	3912
Crystal size	0.20 x 0.18 x 0.12 mm

Theta range for data collection	2.11 to 25.02°.
Limiting indices	-36<=h<=36, -18<=k<=20, -20<=l<=22
Reflections collected / unique	31681 / 7718 [R(int) = 0.1045]
Completeness to theta = 25.02	99.3 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	0.9104 and 0.8568
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	7718 / 49 / 471
Goodness-of-fit on F ²	1.043
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0796, wR2 = 0.2103
R indices (all data)	R1 = 0.1050, wR2 = 0.2306
Extinction coefficient	0.0018(2)
Largest diff. peak and hole	2.120 and -1.081 e.Å ⁻³

Table 8-2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for r91106g. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Ru(1)	5341(1)	2981(1)	2009(1)	16(1)
Cl(1)	5534(1)	2420(1)	3295(1)	20(1)
Cl(2)	5000	4031(1)	2500	18(1)
Cl(3)	4888(1)	3462(1)	670(1)	22(1)
P(1)	5617(1)	1946(1)	1566(1)	17(1)
P(2)	6219(1)	4291(1)	3029(1)	18(1)
C(1)	6066(2)	1353(4)	2448(4)	20(1)
C(2)	6227(3)	582(4)	2246(4)	27(2)
C(3)	6523(3)	113(4)	3027(5)	33(2)
C(4)	6973(3)	541(5)	3647(5)	37(2)
C(5)	6830(3)	1317(5)	3857(5)	41(2)
C(6)	6527(3)	1790(4)	3076(4)	26(2)
C(7)	5134(3)	1239(4)	917(4)	23(2)
C(8)	4703(3)	1594(4)	145(4)	28(2)
C(9)	4330(3)	986(5)	-388(5)	41(2)
C(10)	4136(3)	567(5)	113(6)	46(2)
C(11)	4558(3)	188(4)	880(5)	37(2)
C(12)	4951(3)	772(4)	1425(5)	27(2)
C(13)	5947(3)	2167(4)	978(4)	26(2)
C(14)	5838(3)	2920(4)	524(5)	29(2)
C(15)	6194(4)	3070(4)	191(6)	41(2)
C(16)	6203(4)	2436(5)	-347(5)	43(2)
C(17)	6296(3)	1668(4)	77(5)	37(2)
C(18)	5951(3)	1522(4)	420(5)	29(2)
C(19)	6229(3)	4122(4)	4012(4)	19(1)
C(20)	6609(3)	3517(4)	4539(4)	24(2)
C(21)	6543(3)	3324(4)	5286(4)	29(2)
C(22)	6589(3)	4029(4)	5796(4)	28(2)
C(23)	6229(3)	4644(4)	5266(4)	25(2)
C(24)	6286(3)	4857(4)	4522(4)	22(1)
C(25)	5862(2)	5161(3)	2550(4)	18(1)
C(26)	5587(3)	5153(4)	1600(4)	24(2)
C(27)	5227(3)	5808(4)	1285(4)	31(2)
C(28)	5477(3)	6582(4)	1593(4)	34(2)
C(29)	5776(3)	6576(4)	2541(4)	32(2)
C(30)	6152(3)	5921(4)	2869(4)	24(2)
C(31)	6848(3)	4309(4)	3179(4)	22(2)
C(32)	7222(3)	4833(4)	3866(4)	28(2)

C(33)	7741(3)	4680(5)	3997(5)	36(2)
C(34)	7757(3)	4782(5)	3196(5)	39(2)
C(35)	7379(3)	4300(4)	2510(5)	32(2)
C(36)	6858(3)	4449(4)	2374(4)	26(2)
C(37)	5952(3)	3466(4)	2368(4)	19(1)
Cl(4)	7493(1)	2031(2)	2356(2)	92(1)
Cl(6)	4590(2)	8729(2)	2668(3)	132(2)
Cl(5)	8383(2)	2861(2)	2829(4)	137(2)
C(38)	7827(6)	2505(8)	1992(10)	107(5)
C(39)	5000	8279(11)	2500	122(9)
B(1)	7512(5)	3380(7)	182(8)	33(4)
F(1)	7309(6)	3717(7)	566(10)	119(6)
F(2)	7968(6)	3636(11)	476(16)	249(14)
F(3)	7256(9)	3518(12)	-619(8)	284(17)
F(4)	7528(6)	2627(6)	291(8)	100(5)

Table 8-3. Bond lengths [$\text{\AA}$] and angles [$^\circ$] for r91106g.

Ru(1)-C(37)	1.876(7)	C(10)-H(10A)	0.9900
Ru(1)-P(1)	2.3228(17)	C(10)-H(10B)	0.9900
Ru(1)-Cl(3)	2.3332(18)	C(11)-C(12)	1.532(10)
Ru(1)-Cl(1)	2.3719(16)	C(11)-H(11A)	0.9900
Ru(1)-Cl(2)	2.5088(16)	C(11)-H(11B)	0.9900
Ru(1)-Cl(1)#1	2.6791(18)	C(12)-H(12A)	0.9900
Cl(1)-Ru(1)#1	2.6791(18)	C(12)-H(12B)	0.9900
Cl(2)-Ru(1)#1	2.5088(16)	C(13)-C(14)	1.512(9)
P(1)-C(1)	1.860(7)	C(13)-C(18)	1.538(9)
P(1)-C(7)	1.860(7)	C(13)-H(13)	1.0000
P(1)-C(13)	1.869(7)	C(14)-C(15)	1.533(10)
P(2)-C(37)	1.813(7)	C(14)-H(14A)	0.9900
P(2)-C(31)	1.835(7)	C(14)-H(14B)	0.9900
P(2)-C(25)	1.836(7)	C(15)-C(16)	1.504(11)
P(2)-C(19)	1.837(6)	C(15)-H(15A)	0.9900
C(1)-C(6)	1.536(9)	C(15)-H(15B)	0.9900
C(1)-C(2)	1.549(9)	C(16)-C(17)	1.514(11)
C(1)-H(1)	1.0000	C(16)-H(16A)	0.9900
C(2)-C(3)	1.523(10)	C(16)-H(16B)	0.9900
C(2)-H(2A)	0.9900	C(17)-C(18)	1.517(10)
C(2)-H(2B)	0.9900	C(17)-H(17A)	0.9900
C(3)-C(4)	1.503(11)	C(17)-H(17B)	0.9900
C(3)-H(3A)	0.9900	C(18)-H(18A)	0.9900
C(3)-H(3B)	0.9900	C(18)-H(18B)	0.9900
C(4)-C(5)	1.538(11)	C(19)-C(20)	1.529(9)
C(4)-H(4A)	0.9900	C(19)-C(24)	1.556(8)
C(4)-H(4B)	0.9900	C(19)-H(19)	1.0000
C(5)-C(6)	1.528(10)	C(20)-C(21)	1.538(9)
C(5)-H(5A)	0.9900	C(20)-H(20A)	0.9900
C(5)-H(5B)	0.9900	C(20)-H(20B)	0.9900
C(6)-H(6A)	0.9900	C(21)-C(22)	1.520(9)
C(6)-H(6B)	0.9900	C(21)-H(21A)	0.9900
C(7)-C(8)	1.532(10)	C(21)-H(21B)	0.9900
C(7)-C(12)	1.554(9)	C(22)-C(23)	1.517(10)
C(7)-H(7)	1.0000	C(22)-H(22A)	0.9900
C(8)-C(9)	1.525(10)	C(22)-H(22B)	0.9900
C(8)-H(8A)	0.9900	C(23)-C(24)	1.524(9)
C(8)-H(8B)	0.9900	C(23)-H(23A)	0.9900
C(9)-C(10)	1.526(12)	C(23)-H(23B)	0.9900
C(9)-H(9A)	0.9900	C(24)-H(24A)	0.9900
C(9)-H(9B)	0.9900	C(24)-H(24B)	0.9900
C(10)-C(11)	1.534(12)	C(25)-C(26)	1.537(8)

C(25)-C(30)	1.553(8)	B(1)-F(4)	1.331(9)
C(25)-H(25)	1.0000	B(1)-F(4)#2	1.95(2)
C(26)-C(27)	1.506(9)	F(4)-F(4)#2	1.10(2)
C(26)-H(26A)	0.9900	F(4)-B(1)#2	1.95(2)
C(26)-H(26B)	0.9900	C(37)-Ru(1)-P(1)	89.6(2)
C(27)-C(28)	1.526(10)	C(37)-Ru(1)-Cl(3)	100.92(19)
C(27)-H(27A)	0.9900	P(1)-Ru(1)-Cl(3)	92.17(6)
C(27)-H(27B)	0.9900	C(37)-Ru(1)-Cl(1)	96.91(19)
C(28)-C(29)	1.536(10)	P(1)-Ru(1)-Cl(1)	94.57(6)
C(28)-H(28A)	0.9900	Cl(3)-Ru(1)-Cl(1)	160.96(6)
C(28)-H(28B)	0.9900	C(37)-Ru(1)-Cl(2)	94.2(2)
C(29)-C(30)	1.536(10)	P(1)-Ru(1)-Cl(2)	175.69(6)
C(29)-H(29A)	0.9900	Cl(3)-Ru(1)-Cl(2)	88.96(5)
C(29)-H(29B)	0.9900	Cl(1)-Ru(1)-Cl(2)	83.09(5)
C(30)-H(30A)	0.9900	C(37)-Ru(1)-Cl(1)#1	170.26(19)
C(30)-H(30B)	0.9900	P(1)-Ru(1)-Cl(1)#1	98.80(6)
C(31)-C(36)	1.531(9)	Cl(3)-Ru(1)-Cl(1)#1	83.71(6)
C(31)-C(32)	1.537(9)	Cl(1)-Ru(1)-Cl(1)#1	77.68(7)
C(31)-H(31)	1.0000	Cl(2)-Ru(1)-Cl(1)#1	77.18(5)
C(32)-C(33)	1.533(10)	Ru(1)-Cl(1)-Ru(1)#1	84.78(6)
C(32)-H(32A)	0.9900	Ru(1)-Cl(2)-Ru(1)#1	85.72(7)
C(32)-H(32B)	0.9900	C(1)-P(1)-C(7)	102.4(3)
C(33)-C(34)	1.524(10)	C(1)-P(1)-C(13)	104.0(3)
C(33)-H(33A)	0.9900	C(7)-P(1)-C(13)	105.0(3)
C(33)-H(33B)	0.9900	C(1)-P(1)-Ru(1)	111.8(2)
C(34)-C(35)	1.499(11)	C(7)-P(1)-Ru(1)	115.4(2)
C(34)-H(34A)	0.9900	C(13)-P(1)-Ru(1)	116.8(2)
C(34)-H(34B)	0.9900	C(37)-P(2)-C(31)	102.4(3)
C(35)-C(36)	1.534(10)	C(37)-P(2)-C(25)	111.5(3)
C(35)-H(35A)	0.9900	C(31)-P(2)-C(25)	113.8(3)
C(35)-H(35B)	0.9900	C(37)-P(2)-C(19)	108.9(3)
C(36)-H(36A)	0.9900	C(31)-P(2)-C(19)	110.9(3)
C(36)-H(36B)	0.9900	C(25)-P(2)-C(19)	109.0(3)
C(37)-H(37)	0.9500	C(6)-C(1)-C(2)	109.1(6)
Cl(4)-C(38)	1.707(14)	C(6)-C(1)-P(1)	113.9(4)
Cl(6)-C(39)	1.654(10)	C(2)-C(1)-P(1)	117.7(5)
Cl(5)-C(38)	1.775(17)	C(6)-C(1)-H(1)	105.0
C(38)-H(38A)	0.9900	C(2)-C(1)-H(1)	105.0
C(38)-H(38B)	0.9900	P(1)-C(1)-H(1)	105.0
C(39)-Cl(6)#1	1.654(10)	C(3)-C(2)-C(1)	110.8(6)
C(39)-H(39A)	0.9599	C(3)-C(2)-H(2A)	109.5
B(1)-F(1)	1.305(9)	C(1)-C(2)-H(2A)	109.5
B(1)-F(3)	1.319(10)	C(3)-C(2)-H(2B)	109.5
B(1)-F(2)	1.322(10)	C(1)-C(2)-H(2B)	109.5

H(2A)-C(2)-H(2B)	108.1	C(9)-C(10)-H(10A)	109.4
C(4)-C(3)-C(2)	111.1(6)	C(11)-C(10)-H(10A)	109.4
C(4)-C(3)-H(3A)	109.4	C(9)-C(10)-H(10B)	109.4
C(2)-C(3)-H(3A)	109.4	C(11)-C(10)-H(10B)	109.4
C(4)-C(3)-H(3B)	109.4	H(10A)-C(10)-H(10B)	108.0
C(2)-C(3)-H(3B)	109.4	C(12)-C(11)-C(10)	111.4(6)
H(3A)-C(3)-H(3B)	108.0	C(12)-C(11)-H(11A)	109.3
C(3)-C(4)-C(5)	111.0(7)	C(10)-C(11)-H(11A)	109.3
C(3)-C(4)-H(4A)	109.4	C(12)-C(11)-H(11B)	109.3
C(5)-C(4)-H(4A)	109.4	C(10)-C(11)-H(11B)	109.3
C(3)-C(4)-H(4B)	109.4	H(11A)-C(11)-H(11B)	108.0
C(5)-C(4)-H(4B)	109.4	C(11)-C(12)-C(7)	111.2(6)
H(4A)-C(4)-H(4B)	108.0	C(11)-C(12)-H(12A)	109.4
C(6)-C(5)-C(4)	111.0(6)	C(7)-C(12)-H(12A)	109.4
C(6)-C(5)-H(5A)	109.4	C(11)-C(12)-H(12B)	109.4
C(4)-C(5)-H(5A)	109.4	C(7)-C(12)-H(12B)	109.4
C(6)-C(5)-H(5B)	109.4	H(12A)-C(12)-H(12B)	108.0
C(4)-C(5)-H(5B)	109.4	C(14)-C(13)-C(18)	109.7(6)
H(5A)-C(5)-H(5B)	108.0	C(14)-C(13)-P(1)	118.2(5)
C(5)-C(6)-C(1)	111.1(6)	C(18)-C(13)-P(1)	115.5(5)
C(5)-C(6)-H(6A)	109.4	C(14)-C(13)-H(13)	103.8
C(1)-C(6)-H(6A)	109.4	C(18)-C(13)-H(13)	103.8
C(5)-C(6)-H(6B)	109.4	P(1)-C(13)-H(13)	103.8
C(1)-C(6)-H(6B)	109.4	C(13)-C(14)-C(15)	111.7(6)
H(6A)-C(6)-H(6B)	108.0	C(13)-C(14)-H(14A)	109.3
C(8)-C(7)-C(12)	111.6(6)	C(15)-C(14)-H(14A)	109.3
C(8)-C(7)-P(1)	113.1(5)	C(13)-C(14)-H(14B)	109.3
C(12)-C(7)-P(1)	112.1(5)	C(15)-C(14)-H(14B)	109.3
C(8)-C(7)-H(7)	106.5	H(14A)-C(14)-H(14B)	107.9
C(12)-C(7)-H(7)	106.5	C(16)-C(15)-C(14)	113.2(7)
P(1)-C(7)-H(7)	106.5	C(16)-C(15)-H(15A)	108.9
C(9)-C(8)-C(7)	111.1(6)	C(14)-C(15)-H(15A)	108.9
C(9)-C(8)-H(8A)	109.4	C(16)-C(15)-H(15B)	108.9
C(7)-C(8)-H(8A)	109.4	C(14)-C(15)-H(15B)	108.9
C(9)-C(8)-H(8B)	109.4	H(15A)-C(15)-H(15B)	107.8
C(7)-C(8)-H(8B)	109.4	C(15)-C(16)-C(17)	111.8(6)
H(8A)-C(8)-H(8B)	108.0	C(15)-C(16)-H(16A)	109.2
C(8)-C(9)-C(10)	110.0(6)	C(17)-C(16)-H(16A)	109.2
C(8)-C(9)-H(9A)	109.7	C(15)-C(16)-H(16B)	109.3
C(10)-C(9)-H(9A)	109.7	C(17)-C(16)-H(16B)	109.2
C(8)-C(9)-H(9B)	109.7	H(16A)-C(16)-H(16B)	107.9
C(10)-C(9)-H(9B)	109.7	C(16)-C(17)-C(18)	112.0(7)
H(9A)-C(9)-H(9B)	108.2	C(16)-C(17)-H(17A)	109.2
C(9)-C(10)-C(11)	111.1(7)	C(18)-C(17)-H(17A)	109.2

C(16)-C(17)-H(17B)	109.2	H(24A)-C(24)-H(24B)	108.3
C(18)-C(17)-H(17B)	109.2	C(26)-C(25)-C(30)	109.7(5)
H(17A)-C(17)-H(17B)	107.9	C(26)-C(25)-P(2)	114.2(4)
C(17)-C(18)-C(13)	113.7(6)	C(30)-C(25)-P(2)	115.3(5)
C(17)-C(18)-H(18A)	108.8	C(26)-C(25)-H(25)	105.6
C(13)-C(18)-H(18A)	108.8	C(30)-C(25)-H(25)	105.6
C(17)-C(18)-H(18B)	108.8	P(2)-C(25)-H(25)	105.6
C(13)-C(18)-H(18B)	108.8	C(27)-C(26)-C(25)	109.1(5)
H(18A)-C(18)-H(18B)	107.7	C(27)-C(26)-H(26A)	109.9
C(20)-C(19)-C(24)	111.3(5)	C(25)-C(26)-H(26A)	109.9
C(20)-C(19)-P(2)	112.2(4)	C(27)-C(26)-H(26B)	109.9
C(24)-C(19)-P(2)	114.4(4)	C(25)-C(26)-H(26B)	109.9
C(20)-C(19)-H(19)	106.1	H(26A)-C(26)-H(26B)	108.3
C(24)-C(19)-H(19)	106.1	C(26)-C(27)-C(28)	112.8(7)
P(2)-C(19)-H(19)	106.1	C(26)-C(27)-H(27A)	109.0
C(19)-C(20)-C(21)	109.0(6)	C(28)-C(27)-H(27A)	109.0
C(19)-C(20)-H(20A)	109.9	C(26)-C(27)-H(27B)	109.0
C(21)-C(20)-H(20A)	109.9	C(28)-C(27)-H(27B)	109.0
C(19)-C(20)-H(20B)	109.9	H(27A)-C(27)-H(27B)	107.8
C(21)-C(20)-H(20B)	109.9	C(27)-C(28)-C(29)	109.5(6)
H(20A)-C(20)-H(20B)	108.3	C(27)-C(28)-H(28A)	109.8
C(22)-C(21)-C(20)	111.8(6)	C(29)-C(28)-H(28A)	109.8
C(22)-C(21)-H(21A)	109.3	C(27)-C(28)-H(28B)	109.8
C(20)-C(21)-H(21A)	109.3	C(29)-C(28)-H(28B)	109.8
C(22)-C(21)-H(21B)	109.3	H(28A)-C(28)-H(28B)	108.2
C(20)-C(21)-H(21B)	109.3	C(30)-C(29)-C(28)	111.9(6)
H(21A)-C(21)-H(21B)	107.9	C(30)-C(29)-H(29A)	109.2
C(23)-C(22)-C(21)	111.1(6)	C(28)-C(29)-H(29A)	109.2
C(23)-C(22)-H(22A)	109.4	C(30)-C(29)-H(29B)	109.2
C(21)-C(22)-H(22A)	109.4	C(28)-C(29)-H(29B)	109.2
C(23)-C(22)-H(22B)	109.4	H(29A)-C(29)-H(29B)	107.9
C(21)-C(22)-H(22B)	109.4	C(29)-C(30)-C(25)	107.7(6)
H(22A)-C(22)-H(22B)	108.0	C(29)-C(30)-H(30A)	110.2
C(22)-C(23)-C(24)	112.6(6)	C(25)-C(30)-H(30A)	110.2
C(22)-C(23)-H(23A)	109.1	C(29)-C(30)-H(30B)	110.2
C(24)-C(23)-H(23A)	109.1	C(25)-C(30)-H(30B)	110.2
C(22)-C(23)-H(23B)	109.1	H(30A)-C(30)-H(30B)	108.5
C(24)-C(23)-H(23B)	109.1	C(36)-C(31)-C(32)	110.3(6)
H(23A)-C(23)-H(23B)	107.8	C(36)-C(31)-P(2)	112.8(5)
C(23)-C(24)-C(19)	108.8(5)	C(32)-C(31)-P(2)	116.7(5)
C(23)-C(24)-H(24A)	109.9	C(36)-C(31)-H(31)	105.3
C(19)-C(24)-H(24A)	109.9	C(32)-C(31)-H(31)	105.3
C(23)-C(24)-H(24B)	109.9	P(2)-C(31)-H(31)	105.3
C(19)-C(24)-H(24B)	109.9	C(33)-C(32)-C(31)	109.5(6)

C(33)-C(32)-H(32A)	109.8	C(35)-C(36)-H(36B)	109.7
C(31)-C(32)-H(32A)	109.8	H(36A)-C(36)-H(36B)	108.2
C(33)-C(32)-H(32B)	109.8	P(2)-C(37)-Ru(1)	130.4(4)
C(31)-C(32)-H(32B)	109.8	P(2)-C(37)-H(37)	114.8
H(32A)-C(32)-H(32B)	108.2	Ru(1)-C(37)-H(37)	114.8
C(34)-C(33)-C(32)	111.3(7)	Cl(4)-C(38)-Cl(5)	110.1(9)
C(34)-C(33)-H(33A)	109.4	Cl(4)-C(38)-H(38A)	109.6
C(32)-C(33)-H(33A)	109.4	Cl(5)-C(38)-H(38A)	109.6
C(34)-C(33)-H(33B)	109.4	Cl(4)-C(38)-H(38B)	109.6
C(32)-C(33)-H(33B)	109.4	Cl(5)-C(38)-H(38B)	109.6
H(33A)-C(33)-H(33B)	108.0	H(38A)-C(38)-H(38B)	108.2
C(35)-C(34)-C(33)	112.2(6)	Cl(6)#1-C(39)-Cl(6)	123.2(12)
C(35)-C(34)-H(34A)	109.2	Cl(6)#1-C(39)-H(39A)	106.4
C(33)-C(34)-H(34A)	109.2	Cl(6)-C(39)-H(39A)	106.6
C(35)-C(34)-H(34B)	109.2	F(1)-B(1)-F(3)	110.4(8)
C(33)-C(34)-H(34B)	109.2	F(1)-B(1)-F(2)	109.2(8)
H(34A)-C(34)-H(34B)	107.9	F(3)-B(1)-F(2)	109.5(7)
C(34)-C(35)-C(36)	111.4(6)	F(1)-B(1)-F(4)	110.9(7)
C(34)-C(35)-H(35A)	109.3	F(3)-B(1)-F(4)	108.1(8)
C(36)-C(35)-H(35A)	109.3	F(2)-B(1)-F(4)	108.7(7)
C(34)-C(35)-H(35B)	109.3	F(1)-B(1)-F(4)#2	135.8(11)
C(36)-C(35)-H(35B)	109.3	F(3)-B(1)-F(4)#2	77.7(11)
H(35A)-C(35)-H(35B)	108.0	F(2)-B(1)-F(4)#2	108.2(12)
C(31)-C(36)-C(35)	109.9(6)	F(4)-B(1)-F(4)#2	33.0(9)
C(31)-C(36)-H(36A)	109.7	F(4)#2-F(4)-B(1)	105.9(16)
C(35)-C(36)-H(36A)	109.7	F(4)#2-F(4)-B(1)#2	41.1(9)
C(31)-C(36)-H(36B)	109.7	B(1)-F(4)-B(1)#2	147.0(9)

Table 8-4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for r91106g. 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)	16(1)	17(1)	16(1)	0(1)	8(1)	0(1)
Cl(1)	20(1)	21(1)	20(1)	2(1)	11(1)	1(1)
Cl(2)	18(1)	17(1)	23(1)	0	13(1)	0
Cl(3)	20(1)	23(1)	19(1)	3(1)	8(1)	3(1)
P(1)	17(1)	18(1)	17(1)	-2(1)	9(1)	-1(1)
P(2)	18(1)	20(1)	18(1)	0(1)	10(1)	-1(1)
C(1)	16(4)	18(3)	23(3)	6(3)	8(3)	5(3)
C(2)	31(4)	22(4)	30(4)	3(3)	17(4)	9(3)
C(3)	29(5)	24(4)	44(5)	6(3)	17(4)	9(3)
C(4)	36(5)	38(4)	29(4)	2(4)	9(4)	16(4)
C(5)	22(5)	52(5)	35(4)	4(4)	3(4)	10(4)
C(6)	23(4)	26(4)	25(4)	-3(3)	9(3)	1(3)
C(7)	23(4)	22(4)	22(4)	-3(3)	10(3)	-4(3)
C(8)	22(4)	30(4)	28(4)	-1(3)	9(3)	3(3)
C(9)	33(5)	41(5)	35(4)	-16(4)	6(4)	0(4)
C(10)	25(5)	41(5)	65(6)	-20(4)	15(4)	-8(4)
C(11)	35(5)	20(4)	64(6)	-10(4)	30(4)	-7(3)
C(12)	26(4)	23(4)	35(4)	4(3)	18(4)	3(3)
C(13)	31(4)	22(4)	31(4)	-8(3)	20(4)	-1(3)
C(14)	34(5)	27(4)	36(4)	6(3)	23(4)	7(3)
C(15)	61(6)	34(4)	54(5)	9(4)	48(5)	5(4)
C(16)	56(6)	42(5)	43(5)	4(4)	34(5)	2(4)
C(17)	55(6)	29(4)	41(5)	-6(4)	35(5)	-1(4)
C(18)	40(5)	22(4)	35(4)	-10(3)	26(4)	-6(3)
C(19)	23(4)	21(3)	12(3)	-5(3)	8(3)	0(3)
C(20)	27(4)	30(4)	18(3)	-2(3)	13(3)	3(3)
C(21)	40(5)	31(4)	19(4)	6(3)	17(3)	0(3)
C(22)	33(4)	28(4)	22(4)	-5(3)	15(3)	-7(3)
C(23)	32(4)	26(4)	22(4)	-6(3)	17(3)	-4(3)
C(24)	22(4)	21(3)	21(3)	-1(3)	10(3)	-1(3)
C(25)	22(4)	18(3)	17(3)	-2(3)	11(3)	-5(3)
C(26)	29(4)	23(4)	16(3)	-2(3)	9(3)	-2(3)
C(27)	33(5)	33(4)	25(4)	8(3)	12(4)	6(3)
C(28)	45(5)	31(4)	24(4)	7(3)	15(4)	8(4)
C(29)	40(5)	27(4)	32(4)	1(3)	20(4)	5(3)
C(30)	26(4)	21(3)	24(4)	-4(3)	12(3)	-5(3)
C(31)	20(4)	21(3)	27(4)	4(3)	13(3)	1(3)
C(32)	18(4)	40(4)	29(4)	-8(3)	14(3)	-10(3)
C(33)	19(4)	52(5)	34(4)	2(4)	11(3)	-5(4)

C(34)	29(5)	49(5)	44(5)	11(4)	21(4)	-3(4)
C(35)	27(4)	37(4)	39(4)	2(4)	22(4)	4(3)
C(36)	30(4)	26(4)	24(4)	3(3)	16(3)	1(3)
C(37)	25(4)	24(3)	14(3)	3(3)	13(3)	1(3)
Cl(4)	68(2)	89(2)	86(2)	15(2)	12(2)	-18(2)
Cl(6)	182(5)	61(2)	229(5)	-30(3)	159(5)	-26(2)
Cl(5)	77(3)	93(3)	254(6)	-44(3)	91(4)	-20(2)
C(38)	116(14)	87(10)	146(14)	-14(10)	87(12)	-11(9)
C(39)	120(20)	72(13)	220(30)	0	120(20)	0
B(1)	31(8)	40(8)	44(8)	24(6)	30(6)	9(6)
F(1)	121(10)	92(8)	129(9)	3(7)	51(7)	0(7)
F(2)	245(17)	231(16)	267(16)	-19(9)	123(11)	-9(10)
F(3)	295(19)	269(19)	280(18)	0(10)	135(12)	10(10)
F(4)	110(9)	101(8)	95(9)	-1(7)	55(7)	8(7)

Table 8-5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for r91106g.

	x	y	z	U(eq)
H(1)	5889	1212	2756	24
H(2A)	5930	292	1852	32
H(2B)	6430	679	1980	32
H(3A)	6313	-11	3274	39
H(3B)	6626	-373	2885	39
H(4A)	7198	623	3421	45
H(4B)	7151	233	4158	45
H(5A)	6635	1233	4140	49
H(5B)	7133	1600	4239	49
H(6A)	6734	1918	2824	31
H(6B)	6426	2274	3225	31
H(7)	5295	867	716	28
H(8A)	4537	1978	314	34
H(8B)	4831	1857	-182	34
H(9A)	4491	618	-586	49
H(9B)	4052	1230	-876	49
H(10A)	3896	172	-237	56
H(10B)	3961	932	286	56
H(11A)	4423	-61	1205	44
H(11B)	4712	-211	705	44
H(12A)	5234	504	1880	32
H(12B)	4811	1124	1672	32
H(13)	6301	2213	1418	31
H(14A)	5867	3338	903	35
H(14B)	5495	2916	58	35
H(15A)	6097	3551	-132	49
H(15B)	6532	3141	663	49
H(16A)	6464	2539	-491	51
H(16B)	5882	2422	-868	51
H(17A)	6642	1647	534	44
H(17B)	6252	1261	-323	44
H(18A)	6049	1040	741	35
H(18B)	5611	1452	-47	35
H(19)	5899	3904	3865	23
H(20A)	6947	3712	4732	29
H(20B)	6562	3052	4206	29
H(21A)	6214	3090	5089	35
H(21B)	6796	2945	5639	35
H(22A)	6523	3888	6248	33
H(22B)	6931	4228	6048	33
H(23A)	6282	5105	5608	30

H(23B)	5888	4464	5070	30
H(24A)	6615	5088	4710	26
H(24B)	6031	5235	4175	26
H(25)	5599	5177	2710	21
H(26A)	5827	5201	1398	28
H(26B)	5408	4664	1395	28
H(27A)	4978	5735	1462	38
H(27B)	5053	5805	673	38
H(28A)	5224	6989	1403	41
H(28B)	5699	6687	1364	41
H(29A)	5952	7069	2737	39
H(29B)	5547	6525	2765	39
H(30A)	6336	5926	3481	28
H(30B)	6392	5977	2669	28
H(31)	6979	3780	3353	26
H(32A)	7132	5374	3711	34
H(32B)	7217	4734	4386	34
H(33A)	7979	5036	4420	43
H(33B)	7842	4153	4204	43
H(34A)	7698	5325	3029	47
H(34B)	8090	4644	3293	47
H(35A)	7463	3754	2644	38
H(35B)	7386	4413	1993	38
H(36A)	6761	4982	2191	31
H(36B)	6619	4105	1937	31
H(37)	6153	3243	2171	23
H(38A)	7629	2933	1635	128
H(38B)	7905	2153	1655	128
H(39A)	4816	7953	2032	147

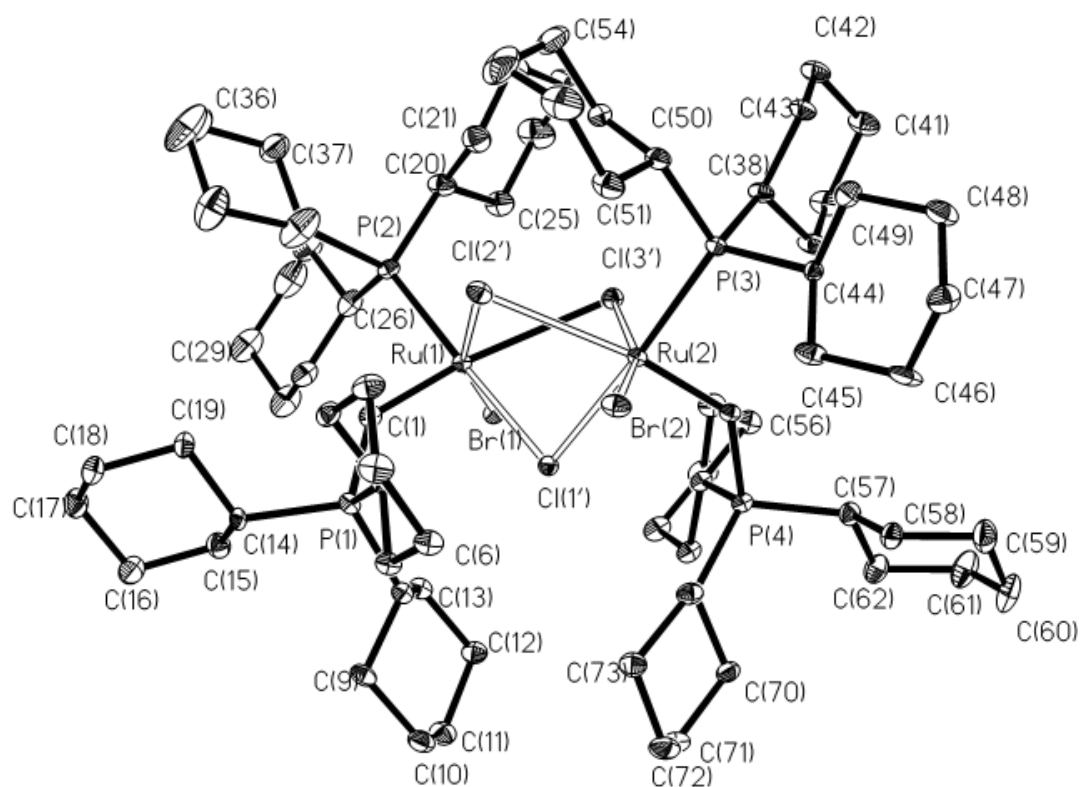


Fig. 2. Perspective view of **9** with thermal ellipsoids drawn at the 50% probability level. For clarity, the $[\text{BF}_4]^-$, cyclohexane and the CH_2Cl_2 molecules of the crystallization are omitted.

Table 9-1. Crystal data and structure refinement for shelx.

Identification code	shelx
Empirical formula	$\text{C}_{74} \text{H}_{134} \text{B Br}_2 \text{Cl}_3 \text{F}_4 \text{P}_4 \text{Ru}_2$
Formula weight	1702.80
Temperature	113(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P2(1)/n
Unit cell dimensions	$a = 18.368(4)$ Å $\alpha = 90^\circ$. $b = 25.572(5)$ Å $\beta = 111.316(4)^\circ$. $c = 21.431(5)$ Å $\gamma = 90^\circ$.
Volume	$9378(4)$ Å ³
Z, Calculated density	4, 1.206 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.369 mm^{-1}
F(000)	3552

Crystal size	0.24 x 0.18 x 0.16 mm
Theta range for data collection	1.29 to 25.02°.
Limiting indices	-21<=h<=21, -30<=k<=30, -25<=l<=19
Reflections collected / unique	70242 / 16554 [R(int) = 0.0508]
Completeness to theta = 25.02	99.9 %
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents
Max. and min. transmission	0.8010 and 0.7220
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	16554 / 150 / 924
Goodness-of-fit on F ²	1.037
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0433, wR2 = 0.1155
R indices (all data)	R1 = 0.0505, wR2 = 0.1198
Largest diff. peak and hole	1.479 and -0.952 e.Å ⁻³

Table 9-2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelx. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Ru(1)	6860(1)	1530(1)	10275(1)	17(1)
Ru(2)	7949(1)	1382(1)	9227(1)	16(1)
Br(1)	5545(1)	1156(1)	9716(1)	23(1)
Cl(1')	8105(1)	1945(1)	10396(1)	26(1)
Cl(3')	6662(1)	1806(1)	8937(1)	22(1)
Cl(2')	7427(1)	768(1)	9880(1)	19(1)
Br(2)	9296(1)	1103(1)	9868(1)	27(1)
P(1)	7793(1)	728(1)	11554(1)	20(1)
P(2)	6300(1)	2251(1)	10603(1)	21(1)
P(3)	8436(1)	1995(1)	8670(1)	18(1)
P(4)	7131(1)	323(1)	8315(1)	19(1)
C(1)	7141(2)	1269(1)	11138(2)	24(1)
C(2)	8764(2)	846(1)	11513(2)	19(1)
C(3)	9187(2)	1322(1)	11923(2)	26(1)
C(4)	9928(2)	1440(2)	11782(2)	32(1)
C(5)	10471(2)	965(2)	11942(2)	33(1)
C(6)	10052(2)	480(2)	11557(2)	26(1)
C(7)	9295(2)	366(1)	11686(2)	22(1)
C(8)	7445(2)	88(1)	11172(2)	21(1)
C(9)	7740(2)	-391(1)	11640(2)	26(1)
C(10)	7526(2)	-891(2)	11225(2)	32(1)
C(11)	6649(2)	-937(2)	10833(2)	34(1)
C(12)	6342(2)	-447(1)	10398(2)	28(1)
C(13)	6555(2)	57(1)	10810(2)	24(1)
C(14)	7847(8)	740(5)	12444(5)	20(7)
C(15)	7055(7)	569(6)	12481(5)	23(5)
C(16)	7137(6)	502(4)	13214(5)	36(3)
C(17)	7427(5)	1001(3)	13612(4)	35(2)
C(18)	8189(4)	1196(3)	13555(3)	30(2)
C(19)	8085(4)	1268(3)	12813(3)	24(2)

C(14')	7814(7)	770(6)	12405(4)	30(9)
C(15')	7019(6)	643(7)	12457(5)	41(7)
C(16')	7028(5)	771(6)	13158(5)	58(4)
C(17')	7686(5)	472(6)	13694(4)	79(4)
C(18')	8479(5)	601(5)	13641(3)	59(3)
C(19')	8467(4)	462(4)	12941(3)	43(2)
C(20)	5988(2)	2783(2)	9977(2)	34(1)
C(21)	6651(2)	3015(2)	9827(2)	40(1)
C(22)	6376(3)	3503(2)	9355(2)	53(1)
C(23)	5699(3)	3336(3)	8714(3)	73(2)
C(24)	5054(3)	3098(2)	8861(3)	63(2)
C(25)	5308(2)	2628(2)	9333(2)	37(1)
C(26)	5379(2)	2086(2)	10743(2)	32(1)
C(27)	5456(2)	1636(2)	11234(2)	34(1)
C(28)	4660(3)	1473(2)	11259(3)	51(1)
C(29)	4255(3)	1931(2)	11445(3)	54(1)
C(30)	4161(3)	2369(2)	10948(3)	64(2)
C(31)	4962(3)	2550(2)	10931(3)	45(1)
C(32)	6924(2)	2595(2)	11385(2)	39(1)
C(33)	7759(3)	2552(2)	11602(3)	70(2)
C(34)	8199(3)	2739(2)	12346(3)	63(2)
C(35)	7980(3)	3288(3)	12403(3)	80(2)
C(36)	7114(4)	3370(3)	12168(3)	80(2)
C(37)	6705(3)	3165(2)	11471(2)	48(1)
C(38)	7630(2)	2319(1)	7980(2)	23(1)
C(39)	7117(2)	1946(2)	7441(2)	36(1)
C(40)	6372(2)	2232(2)	7000(2)	40(1)
C(41)	6565(2)	2717(2)	6678(2)	36(1)
C(42)	7101(2)	3076(2)	7209(2)	32(1)
C(43)	7849(2)	2792(1)	7642(2)	26(1)
C(44)	9042(5)	1734(3)	8207(5)	19(3)
C(45)	9517(5)	1236(3)	8497(5)	29(2)
C(46)	9873(9)	1022(3)	7999(8)	42(8)
C(47)	10426(6)	1430(4)	7884(6)	35(3)
C(48)	9986(6)	1938(4)	7622(5)	37(3)
C(49)	9590(9)	2145(3)	8087(9)	27(6)
C(44')	9274(5)	1764(3)	8418(5)	20(3)
C(45')	9188(5)	1217(3)	8102(5)	28(2)
C(46')	9947(8)	1045(4)	8026(8)	31(6)
C(47')	10219(6)	1437(4)	7618(5)	32(3)
C(48')	10313(5)	1980(4)	7945(5)	37(3)
C(49')	9537(9)	2154(3)	7994(9)	31(6)
C(50)	8935(2)	2568(1)	9172(2)	26(1)
C(51)	9656(2)	2418(2)	9797(2)	36(1)

C(52)	10050(3)	2919(2)	10154(2)	63(2)
C(53)	9509(4)	3238(2)	10372(3)	86(2)
C(54)	8808(4)	3403(2)	9767(2)	60(2)
C(55)	8378(3)	2928(2)	9367(2)	34(1)
C(56)	7699(2)	932(1)	8502(2)	18(1)
C(57)	7114(2)	142(2)	7483(2)	26(1)
C(58)	7938(2)	-3(2)	7503(2)	28(1)
C(59)	7944(3)	-92(2)	6802(2)	43(1)
C(60)	7358(3)	-525(2)	6442(2)	53(1)
C(61)	6533(3)	-375(2)	6408(2)	53(1)
C(62)	6514(2)	-280(2)	7105(2)	36(1)
C(63)	6139(2)	476(1)	8275(2)	20(1)
C(64)	5700(2)	822(2)	7660(2)	29(1)
C(65)	4895(2)	972(2)	7666(2)	34(1)
C(66)	4421(2)	483(2)	7672(2)	39(1)
C(67)	4850(2)	144(2)	8283(2)	32(1)
C(68)	5665(2)	-15(2)	8312(2)	27(1)
C(69)	7565(2)	-196(1)	8945(2)	20(1)
C(70)	7343(2)	-760(1)	8703(2)	26(1)
C(71)	7666(2)	-1136(2)	9298(2)	32(1)
C(72)	8540(2)	-1079(2)	9662(2)	34(1)
C(73)	8765(2)	-510(2)	9873(2)	29(1)
C(74)	8454(2)	-145(1)	9274(2)	25(1)
B(1)	269(4)	3661(3)	8331(4)	71(2)
F(1)	729(3)	3709(2)	8995(2)	125(2)
F(2)	265(2)	4159(1)	8038(2)	68(1)
F(3)	606(2)	3304(1)	7981(2)	83(1)
F(4)	-434(3)	3525(2)	8249(4)	149(2)

Table 9-3. Bond lengths [$\text{\AA}$] and angles [$^\circ$] for shelx.

Ru(1)-C(1)	1.855(4)	C(4)-H(4A)	0.9900
Ru(1)-P(2)	2.3407(10)	C(4)-H(4B)	0.9900
Ru(1)-Cl(1')	2.4468(8)	C(5)-C(6)	1.532(5)
Ru(1)-Br(1)	2.4657(7)	C(5)-H(5A)	0.9900
Ru(1)-Cl(2')	2.4983(9)	C(5)-H(5B)	0.9900
Ru(1)-Cl(3')	2.8445(9)	C(6)-C(7)	1.540(5)
Ru(2)-C(56)	1.852(3)	C(6)-H(6A)	0.9900
Ru(2)-P(3)	2.3357(9)	C(6)-H(6B)	0.9900
Ru(2)-Br(2)	2.4582(7)	C(7)-H(7A)	0.9900
Ru(2)-Cl(3')	2.4666(8)	C(7)-H(7B)	0.9900
Ru(2)-Cl(2')	2.5123(9)	C(8)-C(13)	1.536(5)
Ru(2)-Cl(1')	2.8109(9)	C(8)-C(9)	1.550(5)
P(1)-C(14')	1.812(9)	C(8)-H(8A)	1.0000
P(1)-C(1)	1.834(4)	C(9)-C(10)	1.527(5)
P(1)-C(8)	1.840(4)	C(9)-H(9A)	0.9900
P(1)-C(2)	1.843(3)	C(9)-H(9B)	0.9900
P(1)-C(14)	1.873(9)	C(10)-C(11)	1.527(6)
P(2)-C(20)	1.850(4)	C(10)-H(10A)	0.9900
P(2)-C(26)	1.871(4)	C(10)-H(10B)	0.9900
P(2)-C(32)	1.871(4)	C(11)-C(12)	1.540(5)
P(3)-C(50)	1.852(4)	C(11)-H(11A)	0.9900
P(3)-C(44)	1.864(8)	C(11)-H(11B)	0.9900
P(3)-C(38)	1.865(3)	C(12)-C(13)	1.530(5)
P(3)-C(44')	1.901(8)	C(12)-H(12A)	0.9900
P(4)-C(57)	1.832(4)	C(12)-H(12B)	0.9900
P(4)-C(63)	1.835(3)	C(13)-H(13A)	0.9900
P(4)-C(56)	1.838(3)	C(13)-H(13B)	0.9900
P(4)-C(69)	1.853(4)	C(14)-C(19)	1.547(9)
C(1)-H(1A)	0.9500	C(14)-C(15)	1.548(8)
C(2)-C(7)	1.528(5)	C(14)-H(14A)	1.0000
C(2)-C(3)	1.536(5)	C(15)-C(16)	1.532(8)
C(2)-H(2A)	1.0000	C(15)-H(15A)	0.9900
C(3)-C(4)	1.527(5)	C(15)-H(15B)	0.9900
C(3)-H(3A)	0.9900	C(16)-C(17)	1.520(7)
C(3)-H(3B)	0.9900	C(16)-H(16A)	0.9900
C(4)-C(5)	1.529(5)	C(16)-H(16B)	0.9900

C(17)-C(18)	1.531(7)	C(26)-H(26A)	1.0000
C(17)-H(17A)	0.9900	C(27)-C(28)	1.539(6)
C(17)-H(17B)	0.9900	C(27)-H(27A)	0.9900
C(18)-C(19)	1.542(7)	C(27)-H(27B)	0.9900
C(18)-H(18A)	0.9900	C(28)-C(29)	1.516(7)
C(18)-H(18B)	0.9900	C(28)-H(28A)	0.9900
C(19)-H(19A)	0.9900	C(28)-H(28B)	0.9900
C(19)-H(19B)	0.9900	C(29)-C(30)	1.511(8)
C(14')-C(15')	1.539(8)	C(29)-H(29A)	0.9900
C(14')-C(19')	1.542(9)	C(29)-H(29B)	0.9900
C(14')-H(14B)	1.0000	C(30)-C(31)	1.556(7)
C(15')-C(16')	1.532(8)	C(30)-H(30A)	0.9900
C(15')-H(15C)	0.9900	C(30)-H(30B)	0.9900
C(15')-H(15D)	0.9900	C(31)-H(31A)	0.9900
C(16')-C(17')	1.534(8)	C(31)-H(31B)	0.9900
C(16')-H(16C)	0.9900	C(32)-C(33)	1.437(7)
C(16')-H(16D)	0.9900	C(32)-C(37)	1.540(6)
C(17')-C(18')	1.536(8)	C(32)-H(32A)	1.0000
C(17')-H(17C)	0.9900	C(33)-C(34)	1.578(7)
C(17')-H(17D)	0.9900	C(33)-H(33A)	0.9900
C(18')-C(19')	1.536(7)	C(33)-H(33B)	0.9900
C(18')-H(18C)	0.9900	C(34)-C(35)	1.476(8)
C(18')-H(18D)	0.9900	C(34)-H(34A)	0.9900
C(19')-H(19C)	0.9900	C(34)-H(34B)	0.9900
C(19')-H(19D)	0.9900	C(35)-C(36)	1.498(8)
C(20)-C(21)	1.492(6)	C(35)-H(35A)	0.9900
C(20)-C(25)	1.539(5)	C(35)-H(35B)	0.9900
C(20)-H(20A)	1.0000	C(36)-C(37)	1.503(7)
C(21)-C(22)	1.568(6)	C(36)-H(36A)	0.9900
C(21)-H(21A)	0.9900	C(36)-H(36B)	0.9900
C(21)-H(21B)	0.9900	C(37)-H(37A)	0.9900
C(22)-C(23)	1.540(7)	C(37)-H(37B)	0.9900
C(22)-H(22A)	0.9900	C(38)-C(39)	1.531(5)
C(22)-H(22B)	0.9900	C(38)-C(43)	1.536(5)
C(23)-C(24)	1.464(8)	C(38)-H(38A)	1.0000
C(23)-H(23A)	0.9900	C(39)-C(40)	1.536(5)
C(23)-H(23B)	0.9900	C(39)-H(39A)	0.9900
C(24)-C(25)	1.531(6)	C(39)-H(39B)	0.9900
C(24)-H(24A)	0.9900	C(40)-C(41)	1.524(6)
C(24)-H(24B)	0.9900	C(40)-H(40A)	0.9900
C(25)-H(25A)	0.9900	C(40)-H(40B)	0.9900
C(25)-H(25B)	0.9900	C(41)-C(42)	1.514(6)
C(26)-C(27)	1.530(6)	C(41)-H(41A)	0.9900
C(26)-C(31)	1.542(5)	C(41)-H(41B)	0.9900

C(42)-C(43)	1.533(5)	C(51)-H(51B)	0.9900
C(42)-H(42A)	0.9900	C(52)-C(53)	1.488(9)
C(42)-H(42B)	0.9900	C(52)-H(52A)	0.9900
C(43)-H(43A)	0.9900	C(52)-H(52B)	0.9900
C(43)-H(43B)	0.9900	C(53)-C(54)	1.517(7)
C(44)-C(49)	1.539(8)	C(53)-H(53A)	0.9900
C(44)-C(45)	1.541(8)	C(53)-H(53B)	0.9900
C(44)-H(44A)	1.0000	C(54)-C(55)	1.530(6)
C(45)-C(46)	1.540(9)	C(54)-H(54A)	0.9900
C(45)-H(45A)	0.9900	C(54)-H(54B)	0.9900
C(45)-H(45B)	0.9900	C(55)-H(55A)	0.9900
C(46)-C(47)	1.537(9)	C(55)-H(55B)	0.9900
C(46)-H(46A)	0.9900	C(56)-H(56A)	0.9500
C(46)-H(46B)	0.9900	C(57)-C(58)	1.543(5)
C(47)-C(48)	1.525(8)	C(57)-C(62)	1.546(5)
C(47)-H(47A)	0.9900	C(57)-H(57A)	1.0000
C(47)-H(47B)	0.9900	C(58)-C(59)	1.524(5)
C(48)-C(49)	1.525(9)	C(58)-H(58A)	0.9900
C(48)-H(48A)	0.9900	C(58)-H(58B)	0.9900
C(48)-H(48B)	0.9900	C(59)-C(60)	1.542(7)
C(49)-H(49A)	0.9900	C(59)-H(59A)	0.9900
C(49)-H(49B)	0.9900	C(59)-H(59B)	0.9900
C(44')-C(45')	1.537(8)	C(60)-C(61)	1.537(7)
C(44')-C(49')	1.539(8)	C(60)-H(60A)	0.9900
C(44')-H(44B)	1.0000	C(60)-H(60B)	0.9900
C(45')-C(46')	1.527(8)	C(61)-C(62)	1.527(6)
C(45')-H(45C)	0.9900	C(61)-H(61A)	0.9900
C(45')-H(45D)	0.9900	C(61)-H(61B)	0.9900
C(46')-C(47')	1.529(8)	C(62)-H(62A)	0.9900
C(46')-H(46C)	0.9900	C(62)-H(62B)	0.9900
C(46')-H(46D)	0.9900	C(63)-C(68)	1.545(5)
C(47')-C(48')	1.536(8)	C(63)-C(64)	1.548(5)
C(47')-H(47C)	0.9900	C(63)-H(63A)	1.0000
C(47')-H(47D)	0.9900	C(64)-C(65)	1.532(5)
C(48')-C(49')	1.534(9)	C(64)-H(64A)	0.9900
C(48')-H(48C)	0.9900	C(64)-H(64B)	0.9900
C(48')-H(48D)	0.9900	C(65)-C(66)	1.525(6)
C(49')-H(49C)	0.9900	C(65)-H(65A)	0.9900
C(49')-H(49D)	0.9900	C(65)-H(65B)	0.9900
C(50)-C(55)	1.543(5)	C(66)-C(67)	1.529(6)
C(50)-C(51)	1.550(5)	C(66)-H(66A)	0.9900
C(50)-H(50A)	1.0000	C(66)-H(66B)	0.9900
C(51)-C(52)	1.533(6)	C(67)-C(68)	1.531(5)
C(51)-H(51A)	0.9900	C(67)-H(67A)	0.9900

C(67)-H(67B)	0.9900	C(72)-H(72A)	0.9900
C(68)-H(68A)	0.9900	C(72)-H(72B)	0.9900
C(68)-H(68B)	0.9900	C(73)-C(74)	1.520(5)
C(69)-C(74)	1.531(5)	C(73)-H(73A)	0.9900
C(69)-C(70)	1.537(5)	C(73)-H(73B)	0.9900
C(69)-H(69A)	1.0000	C(74)-H(74A)	0.9900
C(70)-C(71)	1.535(5)	C(74)-H(74B)	0.9900
C(70)-H(70A)	0.9900	B(1)-F(4)	1.286(8)
C(70)-H(70B)	0.9900	B(1)-F(1)	1.370(9)
C(71)-C(72)	1.516(6)	B(1)-F(2)	1.418(8)
C(71)-H(71A)	0.9900	B(1)-F(3)	1.455(9)
C(71)-H(71B)	0.9900		
C(72)-C(73)	1.534(5)		
C(1)-Ru(1)-P(2)	88.64(12)	Ru(2)-Cl(3')-Ru(1)	82.932(18)
C(1)-Ru(1)-Cl(1')	98.02(11)	Ru(1)-Cl(2')-Ru(2)	89.52(3)
P(2)-Ru(1)-Cl(1')	97.06(3)	C(14')-P(1)-C(1)	102.5(4)
C(1)-Ru(1)-Br(1)	102.35(11)	C(14')-P(1)-C(8)	112.1(5)
P(2)-Ru(1)-Br(1)	89.49(3)	C(1)-P(1)-C(8)	113.32(16)
Cl(1')-Ru(1)-Br(1)	158.74(2)	C(14')-P(1)-C(2)	111.8(4)
C(1)-Ru(1)-Cl(2')	93.38(12)	C(1)-P(1)-C(2)	109.00(16)
P(2)-Ru(1)-Cl(2')	177.84(3)	C(8)-P(1)-C(2)	108.05(16)
Cl(1')-Ru(1)-Cl(2')	83.41(3)	C(14')-P(1)-C(14)	3.0(8)
Br(1)-Ru(1)-Cl(2')	89.35(3)	C(1)-P(1)-C(14)	105.5(5)
C(1)-Ru(1)-Cl(3')	169.08(11)	C(8)-P(1)-C(14)	110.4(4)
P(2)-Ru(1)-Cl(3')	101.45(3)	C(2)-P(1)-C(14)	110.6(4)
Cl(1')-Ru(1)-Cl(3')	76.789(19)	C(20)-P(2)-C(26)	102.91(19)
Br(1)-Ru(1)-Cl(3')	82.099(18)	C(20)-P(2)-C(32)	103.39(19)
Cl(2')-Ru(1)-Cl(3')	76.59(2)	C(26)-P(2)-C(32)	104.9(2)
C(56)-Ru(2)-P(3)	90.67(11)	C(20)-P(2)-Ru(1)	114.49(15)
C(56)-Ru(2)-Br(2)	100.42(10)	C(26)-P(2)-Ru(1)	113.11(13)
P(3)-Ru(2)-Br(2)	89.15(3)	C(32)-P(2)-Ru(1)	116.52(13)
C(56)-Ru(2)-Cl(3')	97.99(10)	C(50)-P(3)-C(44)	109.1(3)
P(3)-Ru(2)-Cl(3')	94.96(3)	C(50)-P(3)-C(38)	101.02(16)
Br(2)-Ru(2)-Cl(3')	161.09(2)	C(44)-P(3)-C(38)	101.0(3)
C(56)-Ru(2)-Cl(2')	92.90(11)	C(50)-P(3)-C(44')	97.4(3)
P(3)-Ru(2)-Cl(2')	176.33(3)	C(44)-P(3)-C(44')	15.3(3)
Br(2)-Ru(2)-Cl(2')	91.04(3)	C(38)-P(3)-C(44')	113.8(3)
Cl(3')-Ru(2)-Cl(2')	83.71(3)	C(50)-P(3)-Ru(2)	115.77(12)
C(56)-Ru(2)-Cl(1')	168.33(11)	C(44)-P(3)-Ru(2)	116.5(3)
P(3)-Ru(2)-Cl(1')	100.25(3)	C(38)-P(3)-Ru(2)	111.28(12)
Br(2)-Ru(2)-Cl(1')	83.97(2)	C(44')-P(3)-Ru(2)	116.0(3)
Cl(3')-Ru(2)-Cl(1')	77.13(2)	C(57)-P(4)-C(63)	110.10(16)
Cl(2')-Ru(2)-Cl(1')	76.12(3)	C(57)-P(4)-C(56)	103.50(17)
Ru(1)-Cl(1')-Ru(2)	83.99(2)	C(63)-P(4)-C(56)	107.77(15)

C(57)-P(4)-C(69)	112.29(17)	C(9)-C(8)-P(1)	115.6(2)
C(63)-P(4)-C(69)	110.13(16)	C(13)-C(8)-H(8A)	105.4
C(56)-P(4)-C(69)	112.79(15)	C(9)-C(8)-H(8A)	105.4
P(1)-C(1)-Ru(1)	130.7(2)	P(1)-C(8)-H(8A)	105.4
P(1)-C(1)-H(1A)	114.7	C(10)-C(9)-C(8)	109.2(3)
Ru(1)-C(1)-H(1A)	114.7	C(10)-C(9)-H(9A)	109.8
C(7)-C(2)-C(3)	110.7(3)	C(8)-C(9)-H(9A)	109.8
C(7)-C(2)-P(1)	113.6(2)	C(10)-C(9)-H(9B)	109.8
C(3)-C(2)-P(1)	113.5(2)	C(8)-C(9)-H(9B)	109.8
C(7)-C(2)-H(2A)	106.1	H(9A)-C(9)-H(9B)	108.3
C(3)-C(2)-H(2A)	106.1	C(11)-C(10)-C(9)	112.4(3)
P(1)-C(2)-H(2A)	106.1	C(11)-C(10)-H(10A)	109.1
C(4)-C(3)-C(2)	110.2(3)	C(9)-C(10)-H(10A)	109.1
C(4)-C(3)-H(3A)	109.6	C(11)-C(10)-H(10B)	109.1
C(2)-C(3)-H(3A)	109.6	C(9)-C(10)-H(10B)	109.1
C(4)-C(3)-H(3B)	109.6	H(10A)-C(10)-H(10B)	107.9
C(2)-C(3)-H(3B)	109.6	C(10)-C(11)-C(12)	110.6(3)
H(3A)-C(3)-H(3B)	108.1	C(10)-C(11)-H(11A)	109.5
C(3)-C(4)-C(5)	110.8(3)	C(12)-C(11)-H(11A)	109.5
C(3)-C(4)-H(4A)	109.5	C(10)-C(11)-H(11B)	109.5
C(5)-C(4)-H(4A)	109.5	C(12)-C(11)-H(11B)	109.5
C(3)-C(4)-H(4B)	109.5	H(11A)-C(11)-H(11B)	108.1
C(5)-C(4)-H(4B)	109.5	C(13)-C(12)-C(11)	112.0(3)
H(4A)-C(4)-H(4B)	108.1	C(13)-C(12)-H(12A)	109.2
C(4)-C(5)-C(6)	111.3(3)	C(11)-C(12)-H(12A)	109.2
C(4)-C(5)-H(5A)	109.4	C(13)-C(12)-H(12B)	109.2
C(6)-C(5)-H(5A)	109.4	C(11)-C(12)-H(12B)	109.2
C(4)-C(5)-H(5B)	109.4	H(12A)-C(12)-H(12B)	107.9
C(6)-C(5)-H(5B)	109.4	C(12)-C(13)-C(8)	109.6(3)
H(5A)-C(5)-H(5B)	108.0	C(12)-C(13)-H(13A)	109.7
C(5)-C(6)-C(7)	111.5(3)	C(8)-C(13)-H(13A)	109.7
C(5)-C(6)-H(6A)	109.3	C(12)-C(13)-H(13B)	109.7
C(7)-C(6)-H(6A)	109.3	C(8)-C(13)-H(13B)	109.7
C(5)-C(6)-H(6B)	109.3	H(13A)-C(13)-H(13B)	108.2
C(7)-C(6)-H(6B)	109.3	C(19)-C(14)-C(15)	108.5(7)
H(6A)-C(6)-H(6B)	108.0	C(19)-C(14)-P(1)	115.8(7)
C(2)-C(7)-C(6)	110.0(3)	C(15)-C(14)-P(1)	110.1(7)
C(2)-C(7)-H(7A)	109.7	C(19)-C(14)-H(14A)	107.4
C(6)-C(7)-H(7A)	109.7	C(15)-C(14)-H(14A)	107.4
C(2)-C(7)-H(7B)	109.7	P(1)-C(14)-H(14A)	107.4
C(6)-C(7)-H(7B)	109.7	C(16)-C(15)-C(14)	109.8(6)
H(7A)-C(7)-H(7B)	108.2	C(16)-C(15)-H(15A)	109.7
C(13)-C(8)-C(9)	110.1(3)	C(14)-C(15)-H(15A)	109.7
C(13)-C(8)-P(1)	113.9(2)	C(16)-C(15)-H(15B)	109.7

C(14)-C(15)-H(15B)	109.7	C(16')-C(17')-C(18')	110.4(7)
H(15A)-C(15)-H(15B)	108.2	C(16')-C(17')-H(17C)	109.6
C(17)-C(16)-C(15)	111.5(7)	C(18')-C(17')-H(17C)	109.6
C(17)-C(16)-H(16A)	109.3	C(16')-C(17')-H(17D)	109.6
C(15)-C(16)-H(16A)	109.3	C(18')-C(17')-H(17D)	109.6
C(17)-C(16)-H(16B)	109.3	H(17C)-C(17')-H(17D)	108.1
C(15)-C(16)-H(16B)	109.3	C(17')-C(18')-C(19')	110.2(6)
H(16A)-C(16)-H(16B)	108.0	C(17')-C(18')-H(18C)	109.6
C(16)-C(17)-C(18)	111.8(6)	C(19')-C(18')-H(18C)	109.6
C(16)-C(17)-H(17A)	109.3	C(17')-C(18')-H(18D)	109.6
C(18)-C(17)-H(17A)	109.3	C(19')-C(18')-H(18D)	109.6
C(16)-C(17)-H(17B)	109.3	H(18C)-C(18')-H(18D)	108.1
C(18)-C(17)-H(17B)	109.3	C(18')-C(19')-C(14')	109.9(6)
H(17A)-C(17)-H(17B)	107.9	C(18')-C(19')-H(19C)	109.7
C(17)-C(18)-C(19)	110.3(5)	C(14')-C(19')-H(19C)	109.7
C(17)-C(18)-H(18A)	109.6	C(18')-C(19')-H(19D)	109.7
C(19)-C(18)-H(18A)	109.6	C(14')-C(19')-H(19D)	109.7
C(17)-C(18)-H(18B)	109.6	H(19C)-C(19')-H(19D)	108.2
C(19)-C(18)-H(18B)	109.6	C(21)-C(20)-C(25)	111.8(4)
H(18A)-C(18)-H(18B)	108.1	C(21)-C(20)-P(2)	112.8(3)
C(18)-C(19)-C(14)	109.2(6)	C(25)-C(20)-P(2)	113.4(3)
C(18)-C(19)-H(19A)	109.8	C(21)-C(20)-H(20A)	106.0
C(14)-C(19)-H(19A)	109.8	C(25)-C(20)-H(20A)	106.0
C(18)-C(19)-H(19B)	109.8	P(2)-C(20)-H(20A)	106.0
C(14)-C(19)-H(19B)	109.8	C(20)-C(21)-C(22)	111.0(4)
H(19A)-C(19)-H(19B)	108.3	C(20)-C(21)-H(21A)	109.4
C(15')-C(14')-C(19')	109.9(7)	C(22)-C(21)-H(21A)	109.4
C(15')-C(14')-P(1)	112.8(7)	C(20)-C(21)-H(21B)	109.4
C(19')-C(14')-P(1)	116.5(7)	C(22)-C(21)-H(21B)	109.4
C(15')-C(14')-H(14B)	105.6	H(21A)-C(21)-H(21B)	108.0
C(19')-C(14')-H(14B)	105.6	C(23)-C(22)-C(21)	108.7(4)
P(1)-C(14')-H(14B)	105.6	C(23)-C(22)-H(22A)	109.9
C(16')-C(15')-C(14')	110.7(7)	C(21)-C(22)-H(22A)	109.9
C(16')-C(15')-H(15C)	109.5	C(23)-C(22)-H(22B)	109.9
C(14')-C(15')-H(15C)	109.5	C(21)-C(22)-H(22B)	109.9
C(16')-C(15')-H(15D)	109.5	H(22A)-C(22)-H(22B)	108.3
C(14')-C(15')-H(15D)	109.5	C(24)-C(23)-C(22)	112.2(5)
H(15C)-C(15')-H(15D)	108.1	C(24)-C(23)-H(23A)	109.2
C(15')-C(16')-C(17')	110.7(7)	C(22)-C(23)-H(23A)	109.2
C(15')-C(16')-H(16C)	109.5	C(24)-C(23)-H(23B)	109.2
C(17')-C(16')-H(16C)	109.5	C(22)-C(23)-H(23B)	109.2
C(15')-C(16')-H(16D)	109.5	H(23A)-C(23)-H(23B)	107.9
C(17')-C(16')-H(16D)	109.5	C(23)-C(24)-C(25)	113.1(4)
H(16C)-C(16')-H(16D)	108.1	C(23)-C(24)-H(24A)	109.0

C(25)-C(24)-H(24A)	109.0	C(30)-C(31)-H(31B)	109.7
C(23)-C(24)-H(24B)	109.0	H(31A)-C(31)-H(31B)	108.2
C(25)-C(24)-H(24B)	109.0	C(33)-C(32)-C(37)	109.1(4)
H(24A)-C(24)-H(24B)	107.8	C(33)-C(32)-P(2)	119.2(3)
C(24)-C(25)-C(20)	110.1(4)	C(37)-C(32)-P(2)	116.8(3)
C(24)-C(25)-H(25A)	109.6	C(33)-C(32)-H(32A)	103.1
C(20)-C(25)-H(25A)	109.6	C(37)-C(32)-H(32A)	103.1
C(24)-C(25)-H(25B)	109.6	P(2)-C(32)-H(32A)	103.1
C(20)-C(25)-H(25B)	109.6	C(32)-C(33)-C(34)	113.5(5)
H(25A)-C(25)-H(25B)	108.2	C(32)-C(33)-H(33A)	108.9
C(27)-C(26)-C(31)	109.3(4)	C(34)-C(33)-H(33A)	108.9
C(27)-C(26)-P(2)	114.6(3)	C(32)-C(33)-H(33B)	108.9
C(31)-C(26)-P(2)	115.5(3)	C(34)-C(33)-H(33B)	108.9
C(27)-C(26)-H(26A)	105.5	H(33A)-C(33)-H(33B)	107.7
C(31)-C(26)-H(26A)	105.5	C(35)-C(34)-C(33)	108.5(5)
P(2)-C(26)-H(26A)	105.5	C(35)-C(34)-H(34A)	110.0
C(26)-C(27)-C(28)	112.1(4)	C(33)-C(34)-H(34A)	110.0
C(26)-C(27)-H(27A)	109.2	C(35)-C(34)-H(34B)	110.0
C(28)-C(27)-H(27A)	109.2	C(33)-C(34)-H(34B)	110.0
C(26)-C(27)-H(27B)	109.2	H(34A)-C(34)-H(34B)	108.4
C(28)-C(27)-H(27B)	109.2	C(34)-C(35)-C(36)	113.2(5)
H(27A)-C(27)-H(27B)	107.9	C(34)-C(35)-H(35A)	108.9
C(29)-C(28)-C(27)	111.3(4)	C(36)-C(35)-H(35A)	108.9
C(29)-C(28)-H(28A)	109.4	C(34)-C(35)-H(35B)	108.9
C(27)-C(28)-H(28A)	109.4	C(36)-C(35)-H(35B)	108.9
C(29)-C(28)-H(28B)	109.4	H(35A)-C(35)-H(35B)	107.7
C(27)-C(28)-H(28B)	109.4	C(35)-C(36)-C(37)	111.8(5)
H(28A)-C(28)-H(28B)	108.0	C(35)-C(36)-H(36A)	109.3
C(30)-C(29)-C(28)	109.2(4)	C(37)-C(36)-H(36A)	109.3
C(30)-C(29)-H(29A)	109.8	C(35)-C(36)-H(36B)	109.3
C(28)-C(29)-H(29A)	109.8	C(37)-C(36)-H(36B)	109.3
C(30)-C(29)-H(29B)	109.8	H(36A)-C(36)-H(36B)	107.9
C(28)-C(29)-H(29B)	109.8	C(36)-C(37)-C(32)	113.1(4)
H(29A)-C(29)-H(29B)	108.3	C(36)-C(37)-H(37A)	109.0
C(29)-C(30)-C(31)	111.7(4)	C(32)-C(37)-H(37A)	109.0
C(29)-C(30)-H(30A)	109.3	C(36)-C(37)-H(37B)	109.0
C(31)-C(30)-H(30A)	109.3	C(32)-C(37)-H(37B)	109.0
C(29)-C(30)-H(30B)	109.3	H(37A)-C(37)-H(37B)	107.8
C(31)-C(30)-H(30B)	109.3	C(39)-C(38)-C(43)	109.3(3)
H(30A)-C(30)-H(30B)	107.9	C(39)-C(38)-P(3)	114.5(3)
C(26)-C(31)-C(30)	110.0(4)	C(43)-C(38)-P(3)	117.1(2)
C(26)-C(31)-H(31A)	109.7	C(39)-C(38)-H(38A)	104.9
C(30)-C(31)-H(31A)	109.7	C(43)-C(38)-H(38A)	104.9
C(26)-C(31)-H(31B)	109.7	P(3)-C(38)-H(38A)	104.9

C(38)-C(39)-C(40)	109.5(3)	C(45)-C(46)-H(46A)	109.7
C(38)-C(39)-H(39A)	109.8	C(47)-C(46)-H(46B)	109.7
C(40)-C(39)-H(39A)	109.8	C(45)-C(46)-H(46B)	109.7
C(38)-C(39)-H(39B)	109.8	H(46A)-C(46)-H(46B)	108.2
C(40)-C(39)-H(39B)	109.8	C(48)-C(47)-C(46)	110.2(7)
H(39A)-C(39)-H(39B)	108.2	C(48)-C(47)-H(47A)	109.6
C(41)-C(40)-C(39)	111.4(3)	C(46)-C(47)-H(47A)	109.6
C(41)-C(40)-H(40A)	109.4	C(48)-C(47)-H(47B)	109.6
C(39)-C(40)-H(40A)	109.4	C(46)-C(47)-H(47B)	109.6
C(41)-C(40)-H(40B)	109.4	H(47A)-C(47)-H(47B)	108.1
C(39)-C(40)-H(40B)	109.4	C(47)-C(48)-C(49)	111.7(7)
H(40A)-C(40)-H(40B)	108.0	C(47)-C(48)-H(48A)	109.3
C(42)-C(41)-C(40)	110.4(3)	C(49)-C(48)-H(48A)	109.3
C(42)-C(41)-H(41A)	109.6	C(47)-C(48)-H(48B)	109.3
C(40)-C(41)-H(41A)	109.6	C(49)-C(48)-H(48B)	109.3
C(42)-C(41)-H(41B)	109.6	H(48A)-C(48)-H(48B)	107.9
C(40)-C(41)-H(41B)	109.6	C(48)-C(49)-C(44)	111.6(7)
H(41A)-C(41)-H(41B)	108.1	C(48)-C(49)-H(49A)	109.3
C(41)-C(42)-C(43)	111.3(3)	C(44)-C(49)-H(49A)	109.3
C(41)-C(42)-H(42A)	109.4	C(48)-C(49)-H(49B)	109.3
C(43)-C(42)-H(42A)	109.4	C(44)-C(49)-H(49B)	109.3
C(41)-C(42)-H(42B)	109.4	H(49A)-C(49)-H(49B)	108.0
C(43)-C(42)-H(42B)	109.4	C(45')-C(44')-C(49')	109.4(6)
H(42A)-C(42)-H(42B)	108.0	C(45')-C(44')-P(3)	116.3(6)
C(42)-C(43)-C(38)	109.1(3)	C(49')-C(44')-P(3)	115.3(6)
C(42)-C(43)-H(43A)	109.9	C(45')-C(44')-H(44B)	104.8
C(38)-C(43)-H(43A)	109.9	C(49')-C(44')-H(44B)	104.8
C(42)-C(43)-H(43B)	109.9	P(3)-C(44')-H(44B)	104.8
C(38)-C(43)-H(43B)	109.9	C(46')-C(45')-C(44')	111.0(6)
H(43A)-C(43)-H(43B)	108.3	C(46')-C(45')-H(45C)	109.4
C(49)-C(44)-C(45)	108.9(6)	C(44')-C(45')-H(45C)	109.4
C(49)-C(44)-P(3)	113.5(6)	C(46')-C(45')-H(45D)	109.4
C(45)-C(44)-P(3)	116.1(6)	C(44')-C(45')-H(45D)	109.4
C(49)-C(44)-H(44A)	105.8	H(45C)-C(45')-H(45D)	108.0
C(45)-C(44)-H(44A)	105.8	C(45')-C(46')-C(47')	111.9(7)
P(3)-C(44)-H(44A)	105.8	C(45')-C(46')-H(46C)	109.2
C(46)-C(45)-C(44)	109.5(6)	C(47')-C(46')-H(46C)	109.2
C(46)-C(45)-H(45A)	109.8	C(45')-C(46')-H(46D)	109.2
C(44)-C(45)-H(45A)	109.8	C(47')-C(46')-H(46D)	109.2
C(46)-C(45)-H(45B)	109.8	H(46C)-C(46')-H(46D)	107.9
C(44)-C(45)-H(45B)	109.8	C(46')-C(47')-C(48')	109.8(6)
H(45A)-C(45)-H(45B)	108.2	C(46')-C(47')-H(47C)	109.7
C(47)-C(46)-C(45)	110.0(8)	C(48')-C(47')-H(47C)	109.7
C(47)-C(46)-H(46A)	109.7	C(46')-C(47')-H(47D)	109.7

C(48')-C(47')-H(47D)	109.7	C(54)-C(55)-C(50)	111.6(4)
H(47C)-C(47')-H(47D)	108.2	C(54)-C(55)-H(55A)	109.3
C(49')-C(48')-C(47')	109.9(7)	C(50)-C(55)-H(55A)	109.3
C(49')-C(48')-H(48C)	109.7	C(54)-C(55)-H(55B)	109.3
C(47')-C(48')-H(48C)	109.7	C(50)-C(55)-H(55B)	109.3
C(49')-C(48')-H(48D)	109.7	H(55A)-C(55)-H(55B)	108.0
C(47')-C(48')-H(48D)	109.7	P(4)-C(56)-Ru(2)	131.1(2)
H(48C)-C(48')-H(48D)	108.2	P(4)-C(56)-H(56A)	114.4
C(48')-C(49')-C(44')	110.6(7)	Ru(2)-C(56)-H(56A)	114.4
C(48')-C(49')-H(49C)	109.5	C(58)-C(57)-C(62)	110.6(3)
C(44')-C(49')-H(49C)	109.5	C(58)-C(57)-P(4)	111.3(2)
C(48')-C(49')-H(49D)	109.5	C(62)-C(57)-P(4)	116.2(3)
C(44')-C(49')-H(49D)	109.5	C(58)-C(57)-H(57A)	105.9
H(49C)-C(49')-H(49D)	108.1	C(62)-C(57)-H(57A)	105.9
C(55)-C(50)-C(51)	110.9(3)	P(4)-C(57)-H(57A)	105.9
C(55)-C(50)-P(3)	113.1(3)	C(59)-C(58)-C(57)	111.5(3)
C(51)-C(50)-P(3)	113.1(3)	C(59)-C(58)-H(58A)	109.3
C(55)-C(50)-H(50A)	106.4	C(57)-C(58)-H(58A)	109.3
C(51)-C(50)-H(50A)	106.4	C(59)-C(58)-H(58B)	109.3
P(3)-C(50)-H(50A)	106.4	C(57)-C(58)-H(58B)	109.3
C(52)-C(51)-C(50)	109.0(3)	H(58A)-C(58)-H(58B)	108.0
C(52)-C(51)-H(51A)	109.9	C(58)-C(59)-C(60)	110.3(4)
C(50)-C(51)-H(51A)	109.9	C(58)-C(59)-H(59A)	109.6
C(52)-C(51)-H(51B)	109.9	C(60)-C(59)-H(59A)	109.6
C(50)-C(51)-H(51B)	109.9	C(58)-C(59)-H(59B)	109.6
H(51A)-C(51)-H(51B)	108.3	C(60)-C(59)-H(59B)	109.6
C(53)-C(52)-C(51)	111.6(5)	H(59A)-C(59)-H(59B)	108.1
C(53)-C(52)-H(52A)	109.3	C(61)-C(60)-C(59)	110.0(4)
C(51)-C(52)-H(52A)	109.3	C(61)-C(60)-H(60A)	109.7
C(53)-C(52)-H(52B)	109.3	C(59)-C(60)-H(60A)	109.7
C(51)-C(52)-H(52B)	109.3	C(61)-C(60)-H(60B)	109.7
H(52A)-C(52)-H(52B)	108.0	C(59)-C(60)-H(60B)	109.7
C(52)-C(53)-C(54)	109.9(5)	H(60A)-C(60)-H(60B)	108.2
C(52)-C(53)-H(53A)	109.7	C(62)-C(61)-C(60)	111.5(4)
C(54)-C(53)-H(53A)	109.7	C(62)-C(61)-H(61A)	109.3
C(52)-C(53)-H(53B)	109.7	C(60)-C(61)-H(61A)	109.3
C(54)-C(53)-H(53B)	109.7	C(62)-C(61)-H(61B)	109.3
H(53A)-C(53)-H(53B)	108.2	C(60)-C(61)-H(61B)	109.3
C(53)-C(54)-C(55)	111.3(4)	H(61A)-C(61)-H(61B)	108.0
C(53)-C(54)-H(54A)	109.4	C(61)-C(62)-C(57)	110.9(4)
C(55)-C(54)-H(54A)	109.4	C(61)-C(62)-H(62A)	109.5
C(53)-C(54)-H(54B)	109.4	C(57)-C(62)-H(62A)	109.5
C(55)-C(54)-H(54B)	109.4	C(61)-C(62)-H(62B)	109.5
H(54A)-C(54)-H(54B)	108.0	C(57)-C(62)-H(62B)	109.5

H(62A)-C(62)-H(62B)	108.0	C(74)-C(69)-H(69A)	106.0
C(68)-C(63)-C(64)	112.3(3)	C(70)-C(69)-H(69A)	106.0
C(68)-C(63)-P(4)	113.1(2)	P(4)-C(69)-H(69A)	106.0
C(64)-C(63)-P(4)	111.3(2)	C(71)-C(70)-C(69)	109.4(3)
C(68)-C(63)-H(63A)	106.5	C(71)-C(70)-H(70A)	109.8
C(64)-C(63)-H(63A)	106.5	C(69)-C(70)-H(70A)	109.8
P(4)-C(63)-H(63A)	106.5	C(71)-C(70)-H(70B)	109.8
C(65)-C(64)-C(63)	110.0(3)	C(69)-C(70)-H(70B)	109.8
C(65)-C(64)-H(64A)	109.7	H(70A)-C(70)-H(70B)	108.2
C(63)-C(64)-H(64A)	109.7	C(72)-C(71)-C(70)	112.6(3)
C(65)-C(64)-H(64B)	109.7	C(72)-C(71)-H(71A)	109.1
C(63)-C(64)-H(64B)	109.7	C(70)-C(71)-H(71A)	109.1
H(64A)-C(64)-H(64B)	108.2	C(72)-C(71)-H(71B)	109.1
C(66)-C(65)-C(64)	110.5(3)	C(70)-C(71)-H(71B)	109.1
C(66)-C(65)-H(65A)	109.6	H(71A)-C(71)-H(71B)	107.8
C(64)-C(65)-H(65A)	109.6	C(71)-C(72)-C(73)	111.4(3)
C(66)-C(65)-H(65B)	109.6	C(71)-C(72)-H(72A)	109.4
C(64)-C(65)-H(65B)	109.6	C(73)-C(72)-H(72A)	109.4
H(65A)-C(65)-H(65B)	108.1	C(71)-C(72)-H(72B)	109.4
C(65)-C(66)-C(67)	110.8(3)	C(73)-C(72)-H(72B)	109.4
C(65)-C(66)-H(66A)	109.5	H(72A)-C(72)-H(72B)	108.0
C(67)-C(66)-H(66A)	109.5	C(74)-C(73)-C(72)	110.8(3)
C(65)-C(66)-H(66B)	109.5	C(74)-C(73)-H(73A)	109.5
C(67)-C(66)-H(66B)	109.5	C(72)-C(73)-H(73A)	109.5
H(66A)-C(66)-H(66B)	108.1	C(74)-C(73)-H(73B)	109.5
C(66)-C(67)-C(68)	112.1(3)	C(72)-C(73)-H(73B)	109.5
C(66)-C(67)-H(67A)	109.2	H(73A)-C(73)-H(73B)	108.1
C(68)-C(67)-H(67A)	109.2	C(73)-C(74)-C(69)	110.3(3)
C(66)-C(67)-H(67B)	109.2	C(73)-C(74)-H(74A)	109.6
C(68)-C(67)-H(67B)	109.2	C(69)-C(74)-H(74A)	109.6
H(67A)-C(67)-H(67B)	107.9	C(73)-C(74)-H(74B)	109.6
C(67)-C(68)-C(63)	110.1(3)	C(69)-C(74)-H(74B)	109.6
C(67)-C(68)-H(68A)	109.6	H(74A)-C(74)-H(74B)	108.1
C(63)-C(68)-H(68A)	109.6	F(4)-B(1)-F(1)	112.1(8)
C(67)-C(68)-H(68B)	109.6	F(4)-B(1)-F(2)	109.9(6)
C(63)-C(68)-H(68B)	109.6	F(1)-B(1)-F(2)	106.4(6)
H(68A)-C(68)-H(68B)	108.2	F(4)-B(1)-F(3)	110.7(6)
C(74)-C(69)-C(70)	110.1(3)	F(1)-B(1)-F(3)	111.9(6)
C(74)-C(69)-P(4)	112.3(2)	F(2)-B(1)-F(3)	105.6(6)
C(70)-C(69)-P(4)	115.7(2)		

Table 9-4. Anisotropic displacement parameters ($2\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelx. 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)	14(1)	17(1)	19(1)	0(1)	6(1)	0(1)
Ru(2)	13(1)	16(1)	18(1)	2(1)	5(1)	1(1)
Br(1)	18(1)	24(1)	27(1)	-3(1)	7(1)	-3(1)
Cl(1')	22(1)	26(1)	31(1)	5(1)	13(1)	1(1)
Cl(3')	22(1)	22(1)	26(1)	0(1)	11(1)	1(1)
Cl(2')	19(1)	19(1)	21(1)	1(1)	9(1)	1(1)
Br(2)	21(1)	23(1)	30(1)	6(1)	1(1)	1(1)
P(1)	16(1)	23(1)	21(1)	3(1)	8(1)	1(1)
P(2)	17(1)	19(1)	25(1)	-2(1)	5(1)	1(1)
P(3)	15(1)	17(1)	20(1)	3(1)	5(1)	0(1)
P(4)	16(1)	18(1)	23(1)	-2(1)	7(1)	0(1)
C(1)	20(2)	25(2)	28(2)	0(2)	11(2)	3(2)
C(2)	16(2)	22(2)	20(2)	0(1)	6(1)	-1(1)
C(3)	27(2)	22(2)	24(2)	-3(2)	4(2)	1(2)
C(4)	23(2)	27(2)	40(2)	-5(2)	5(2)	-7(2)
C(5)	15(2)	38(2)	41(2)	3(2)	5(2)	-5(2)
C(6)	18(2)	27(2)	31(2)	4(2)	7(2)	3(2)
C(7)	16(2)	22(2)	27(2)	3(1)	6(1)	1(1)
C(8)	18(2)	22(2)	24(2)	3(1)	10(1)	1(1)
C(9)	23(2)	25(2)	32(2)	9(2)	13(2)	0(2)
C(10)	36(2)	25(2)	38(2)	7(2)	19(2)	1(2)
C(11)	37(2)	27(2)	40(2)	2(2)	16(2)	-7(2)
C(12)	26(2)	25(2)	33(2)	0(2)	10(2)	-5(2)
C(13)	19(2)	25(2)	30(2)	4(2)	11(2)	-2(2)
C(14)	21(10)	23(9)	23(9)	-4(6)	15(6)	-4(6)
C(15)	19(7)	26(6)	26(8)	-3(4)	11(5)	-2(5)

C(16)	47(6)	36(6)	37(6)	-11(5)	28(5)	-15(5)
C(17)	41(4)	39(4)	32(4)	-5(4)	22(4)	-5(4)
C(18)	30(4)	35(4)	23(4)	-9(3)	7(3)	2(3)
C(19)	24(4)	29(4)	21(3)	-7(3)	10(3)	-11(3)
C(14')	24(11)	44(14)	16(9)	6(8)	-1(7)	2(8)
C(15')	43(12)	43(9)	39(10)	-2(6)	19(8)	-13(7)
C(16')	54(7)	82(11)	52(7)	-7(9)	37(6)	-13(8)
C(17')	77(9)	135(13)	32(6)	-2(7)	28(6)	-6(8)
C(18')	58(7)	94(9)	30(5)	1(5)	20(5)	6(6)
C(19')	30(5)	65(6)	34(5)	12(4)	11(4)	3(4)
C(20)	31(2)	25(2)	34(2)	6(2)	-2(2)	-1(2)
C(21)	38(2)	38(2)	38(2)	6(2)	8(2)	6(2)
C(22)	56(3)	50(3)	44(3)	18(2)	8(2)	-16(2)
C(23)	69(4)	84(4)	44(3)	37(3)	-6(3)	-10(3)
C(24)	54(3)	56(3)	55(3)	19(3)	-9(3)	6(3)
C(25)	27(2)	36(2)	37(2)	3(2)	-2(2)	3(2)
C(26)	18(2)	37(2)	41(2)	-10(2)	10(2)	4(2)
C(27)	30(2)	34(2)	47(2)	-10(2)	22(2)	-8(2)
C(28)	40(3)	56(3)	72(3)	-24(3)	38(3)	-20(2)
C(29)	32(3)	62(3)	76(4)	-22(3)	28(2)	-9(2)
C(30)	28(3)	83(4)	79(4)	-30(3)	19(2)	18(3)
C(31)	41(3)	40(3)	59(3)	-7(2)	24(2)	14(2)
C(32)	38(2)	27(2)	39(2)	-11(2)	-1(2)	4(2)
C(33)	52(3)	66(4)	78(4)	-35(3)	9(3)	1(3)
C(34)	36(3)	83(4)	60(3)	-25(3)	4(2)	5(3)
C(35)	46(3)	87(5)	108(5)	-71(4)	29(3)	-22(3)
C(36)	81(4)	62(4)	79(4)	-27(3)	9(3)	-4(3)
C(37)	57(3)	38(3)	47(3)	-6(2)	16(2)	4(2)
C(38)	21(2)	22(2)	22(2)	6(1)	2(2)	1(2)
C(39)	39(2)	23(2)	32(2)	8(2)	-6(2)	-7(2)
C(40)	32(2)	36(2)	36(2)	6(2)	-9(2)	-6(2)
C(41)	33(2)	31(2)	34(2)	14(2)	1(2)	2(2)
C(42)	33(2)	24(2)	33(2)	12(2)	6(2)	1(2)
C(43)	25(2)	21(2)	29(2)	7(2)	6(2)	-2(2)
C(44)	18(5)	22(4)	19(5)	-1(4)	7(4)	-1(4)
C(45)	23(5)	19(4)	47(5)	9(4)	15(4)	6(3)
C(46)	54(13)	17(9)	71(16)	22(9)	41(11)	4(8)
C(47)	29(6)	35(6)	45(8)	1(5)	18(6)	4(4)
C(48)	41(7)	27(5)	57(7)	15(5)	35(5)	9(5)
C(49)	23(8)	25(8)	38(7)	1(5)	16(5)	9(6)
C(44')	15(5)	29(5)	13(5)	5(4)	1(4)	3(4)
C(45')	24(5)	26(4)	39(5)	10(4)	19(4)	6(4)
C(46')	19(7)	38(12)	38(11)	-7(8)	14(7)	13(7)
C(47')	27(6)	45(6)	34(7)	10(5)	24(6)	5(5)

C(48')	33(6)	41(6)	49(7)	9(5)	28(5)	-3(5)
C(49')	33(10)	28(9)	38(8)	9(6)	21(6)	-9(7)
C(50)	30(2)	23(2)	24(2)	2(2)	7(2)	-4(2)
C(51)	31(2)	35(2)	30(2)	6(2)	-2(2)	-6(2)
C(52)	64(3)	54(3)	37(3)	7(2)	-22(2)	-23(3)
C(53)	134(6)	52(4)	37(3)	-16(3)	-10(3)	-3(4)
C(54)	101(4)	28(2)	36(3)	-7(2)	6(3)	2(3)
C(55)	52(3)	21(2)	30(2)	-1(2)	16(2)	0(2)
C(56)	14(2)	16(2)	25(2)	3(1)	9(1)	4(1)
C(57)	25(2)	26(2)	27(2)	-2(2)	11(2)	3(2)
C(58)	26(2)	33(2)	27(2)	-2(2)	12(2)	2(2)
C(59)	44(3)	58(3)	32(2)	2(2)	19(2)	15(2)
C(60)	59(3)	65(3)	37(3)	-21(2)	21(2)	4(3)
C(61)	49(3)	64(3)	45(3)	-25(2)	16(2)	-5(3)
C(62)	32(2)	39(2)	32(2)	-12(2)	7(2)	-5(2)
C(63)	12(2)	21(2)	28(2)	-3(1)	7(1)	0(1)
C(64)	20(2)	32(2)	34(2)	4(2)	9(2)	2(2)
C(65)	22(2)	33(2)	45(2)	3(2)	10(2)	5(2)
C(66)	18(2)	41(3)	58(3)	-4(2)	13(2)	-1(2)
C(67)	21(2)	31(2)	50(3)	-7(2)	19(2)	-6(2)
C(68)	22(2)	25(2)	35(2)	-4(2)	12(2)	-1(2)
C(69)	23(2)	16(2)	26(2)	0(1)	14(2)	1(1)
C(70)	28(2)	21(2)	33(2)	-2(2)	14(2)	2(2)
C(71)	34(2)	20(2)	41(2)	3(2)	14(2)	3(2)
C(72)	33(2)	24(2)	45(2)	9(2)	15(2)	7(2)
C(73)	28(2)	27(2)	31(2)	1(2)	8(2)	2(2)
C(74)	22(2)	20(2)	34(2)	2(2)	11(2)	3(2)
B(1)	55(4)	51(4)	98(6)	3(4)	16(4)	-12(3)
F(1)	145(4)	162(5)	76(3)	-14(3)	48(3)	-40(4)
F(2)	74(2)	44(2)	84(2)	16(2)	25(2)	-6(2)
F(3)	76(2)	62(2)	117(3)	-23(2)	42(2)	0(2)
F(4)	131(4)	56(3)	318(8)	-9(3)	151(5)	-21(3)

Table 9-5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for shelx.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	6910	1445	11410	28
H(2A)	8672	930	11034	23
H(3A)	8836	1630	11803	31
H(3B)	9325	1250	12406	31
H(4A)	10203	1740	12058	38
H(4B)	9786	1535	11305	38
H(5A)	10659	893	12429	40
H(5B)	10932	1043	11821	40
H(6A)	10405	174	11697	31
H(6B)	9925	535	11072	31
H(7A)	9020	66	11408	27
H(7B)	9424	272	12162	27
H(8A)	7669	45	10814	25
H(9A)	8313	-369	11872	31
H(9B)	7496	-393	11984	31
H(10A)	7806	-898	10908	38
H(10B)	7702	-1197	11526	38
H(11A)	6371	-978	11148	41
H(11B)	6543	-1250	10543	41
H(12A)	6565	-435	10041	34
H(12B)	5767	-471	10179	34
H(13A)	6295	62	11142	29
H(13B)	6370	363	10511	29
H(14A)	8246	475	12697	24
H(15A)	6652	835	12263	28
H(15B)	6887	234	12239	28
H(16A)	6625	405	13233	44
H(16B)	7509	215	13418	44

H(17A)	7514	935	14089	42
H(17B)	7022	1275	13447	42
H(18A)	8612	940	13767	36
H(18B)	8340	1533	13794	36
H(19A)	8580	1392	12781	29
H(19B)	7676	1533	12604	29
H(14B)	7915	1146	12534	36
H(15C)	6604	849	12120	49
H(15D)	6899	268	12360	49
H(16C)	6520	674	13187	69
H(16D)	7105	1152	13240	69
H(17C)	7588	92	13634	95
H(17D)	7696	570	14144	95
H(18C)	8897	401	13984	71
H(18D)	8592	979	13728	71
H(19C)	8377	82	12862	52
H(19D)	8978	549	12910	52
H(20A)	5784	3068	10187	41
H(21A)	6871	2750	9609	47
H(21B)	7068	3122	10251	47
H(22A)	6199	3783	9586	64
H(22B)	6815	3639	9239	64
H(23A)	5503	3646	8425	88
H(23B)	5896	3082	8464	88
H(24A)	4646	2984	8436	76
H(24B)	4820	3365	9066	76
H(25A)	5473	2339	9107	45
H(25B)	4861	2503	9448	45
H(26A)	5007	1958	10301	39
H(27A)	5807	1744	11687	41
H(27B)	5697	1331	11099	41
H(28A)	4324	1335	10816	61
H(28B)	4739	1190	11593	61
H(29A)	3736	1821	11438	65
H(29B)	4568	2053	11902	65
H(30A)	3900	2669	11072	76
H(30B)	3823	2250	10496	76
H(31A)	4880	2833	10598	54
H(31B)	5293	2688	11375	54
H(32A)	6802	2405	11744	46
H(33A)	7942	2763	11301	84
H(33B)	7899	2183	11562	84
H(34A)	8051	2516	12658	76
H(34B)	8771	2712	12464	76

H(35A)	8197	3512	12137	96
H(35B)	8219	3398	12877	96
H(36A)	7005	3749	12177	96
H(36B)	6906	3191	12478	96
H(37A)	6839	3389	11151	58
H(37B)	6133	3187	11358	58
H(38A)	7276	2463	8198	28
H(39A)	6977	1639	7655	44
H(39B)	7409	1821	7161	44
H(40A)	6047	1992	6645	49
H(40B)	6066	2334	7276	49
H(41A)	6822	2613	6363	43
H(41B)	6076	2905	6420	43
H(42A)	6824	3206	7498	38
H(42B)	7239	3382	6991	38
H(43A)	8188	3033	7987	32
H(43B)	8140	2674	7360	32
H(44A)	8666	1636	7753	23
H(45A)	9938	1318	8929	34
H(45B)	9172	969	8579	34
H(46A)	10166	697	8179	50
H(46B)	9451	938	7568	50
H(47A)	10866	1498	8309	42
H(47B)	10643	1294	7555	42
H(48A)	9585	1877	7172	44
H(48B)	10356	2204	7578	44
H(49A)	9286	2462	7888	32
H(49B)	9995	2244	8521	32
H(44B)	9731	1735	8849	24
H(45C)	9046	963	8388	33
H(45D)	8762	1222	7657	33
H(46C)	9867	700	7802	37
H(46D)	10359	1006	8475	37
H(47C)	9831	1454	7155	38
H(47D)	10724	1322	7597	38
H(48C)	10723	1967	8398	45
H(48D)	10477	2235	7674	45
H(49C)	9132	2176	7539	37
H(49D)	9599	2505	8200	37
H(50A)	9138	2780	8878	32
H(51A)	9491	2200	10104	43
H(51B)	10029	2212	9659	43
H(52A)	10515	2825	10550	75
H(52B)	10229	3128	9848	75

H(53A)	9785	3552	10615	103
H(53B)	9331	3032	10681	103
H(54A)	8985	3630	9476	72
H(54B)	8445	3608	9918	72
H(55A)	7954	3049	8956	41
H(55B)	8138	2728	9638	41
H(56A)	7900	1034	8170	21
H(57A)	6962	466	7204	31
H(58A)	8307	282	7723	34
H(58B)	8118	-324	7772	34
H(59A)	8476	-195	6832	52
H(59B)	7804	237	6541	52
H(60A)	7356	-573	5983	63
H(60B)	7517	-859	6687	63
H(61A)	6362	-54	6135	64
H(61B)	6164	-659	6185	64
H(62A)	6633	-611	7363	43
H(62B)	5983	-167	7064	43
H(63A)	6198	690	8681	24
H(64A)	6007	1142	7672	35
H(64B)	5637	630	7243	35
H(65A)	4959	1186	8068	41
H(65B)	4611	1184	7265	41
H(66A)	4333	279	7258	47
H(66B)	3906	586	7680	47
H(67A)	4539	-175	8268	39
H(67B)	4898	339	8695	39
H(68A)	5619	-251	7934	33
H(68B)	5942	-205	8735	33
H(69A)	7356	-137	9310	25
H(70A)	6767	-793	8500	31
H(70B)	7563	-849	8357	31
H(71A)	7398	-1069	9617	38
H(71B)	7548	-1500	9135	38
H(72A)	8814	-1197	9366	41
H(72B)	8710	-1305	10065	41
H(73A)	8548	-407	10215	35
H(73B)	9341	-480	10074	35
H(74A)	8698	-233	8944	30
H(74B)	8593	220	9422	30

2. Study of the catalytic mechanism of **8** by mass spectrometry

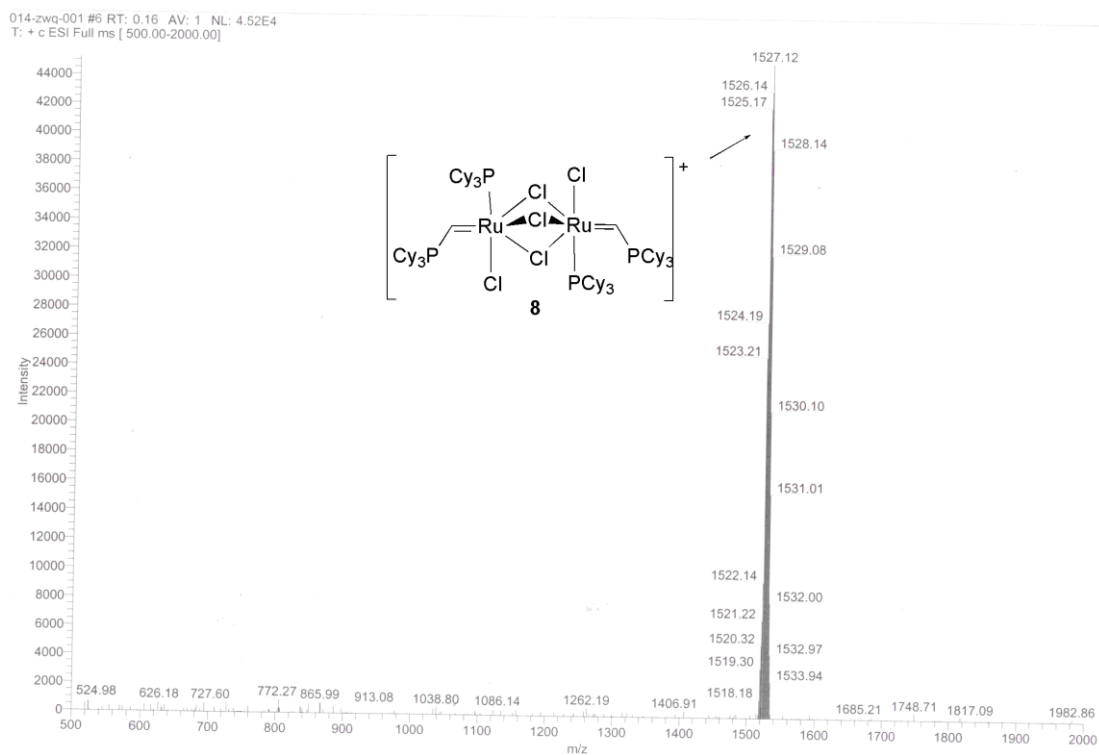


Figure 3 Identification of **8** with mass spectrometry

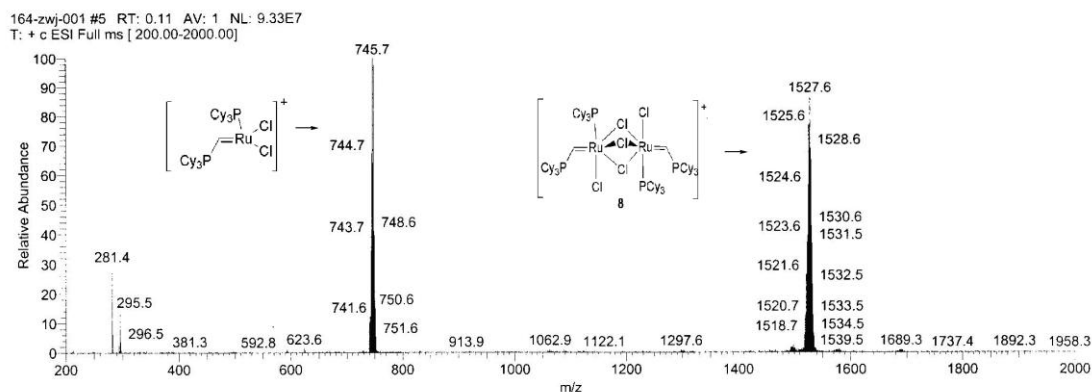


Figure 4 Study of the catalytic mechanism of **8** by mass spectrometry

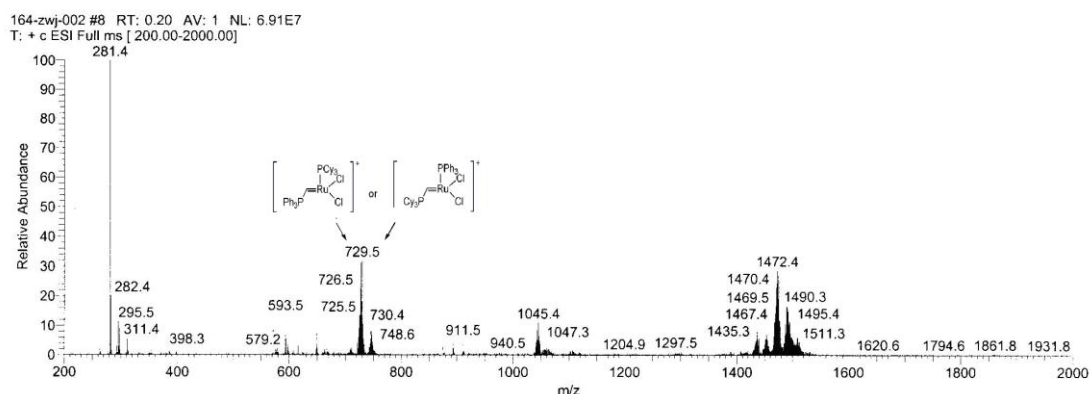


Figure 5

Figure 3 is the identification of **8** with mass spectrometry and Figure 4 shows the study of the catalytic mechanism of **8** by mass spectrometry. A comparison of Figures 3 and Figure 4, reveal the formation of the monometallic species $[\text{RuCl}_2(\text{=CHP}(\text{Cy}_3)_2)(\text{PCy}_3)]^+$.

The data shows the formation of the monometallic species $[\text{RuCl}_2(\text{=CHPPh}_3)(\text{PCy}_3)]^+$ or $[\text{RuCl}_2(\text{=CHPCy}_3)(\text{PPh}_3)]^+$ in Figure 4 and 5 respectively. A PPh_3 replaced the PCy_3 in $[\text{RuCl}_2(\text{=CHPCy}_3)(\text{PCy}_3)]^+$. We can confirm the existence of the monometallic species $[\text{RuCl}_2(\text{=CHPCy}_3)(\text{PCy}_3)]^+$.

Figure 6 is the identification of **10** with mass spectrometry, A comparison of Figure 3 and Figure 6, reveal the formation of the monometallic species $[\text{RuCl}(\equiv\text{C})(\text{PCy}_3)_2]^+$.

007-zwq-005 #23 RT: 0.64 AV: 1 NL: 1.34E7
T: + c ESI Full ms [200.00-2000.00]

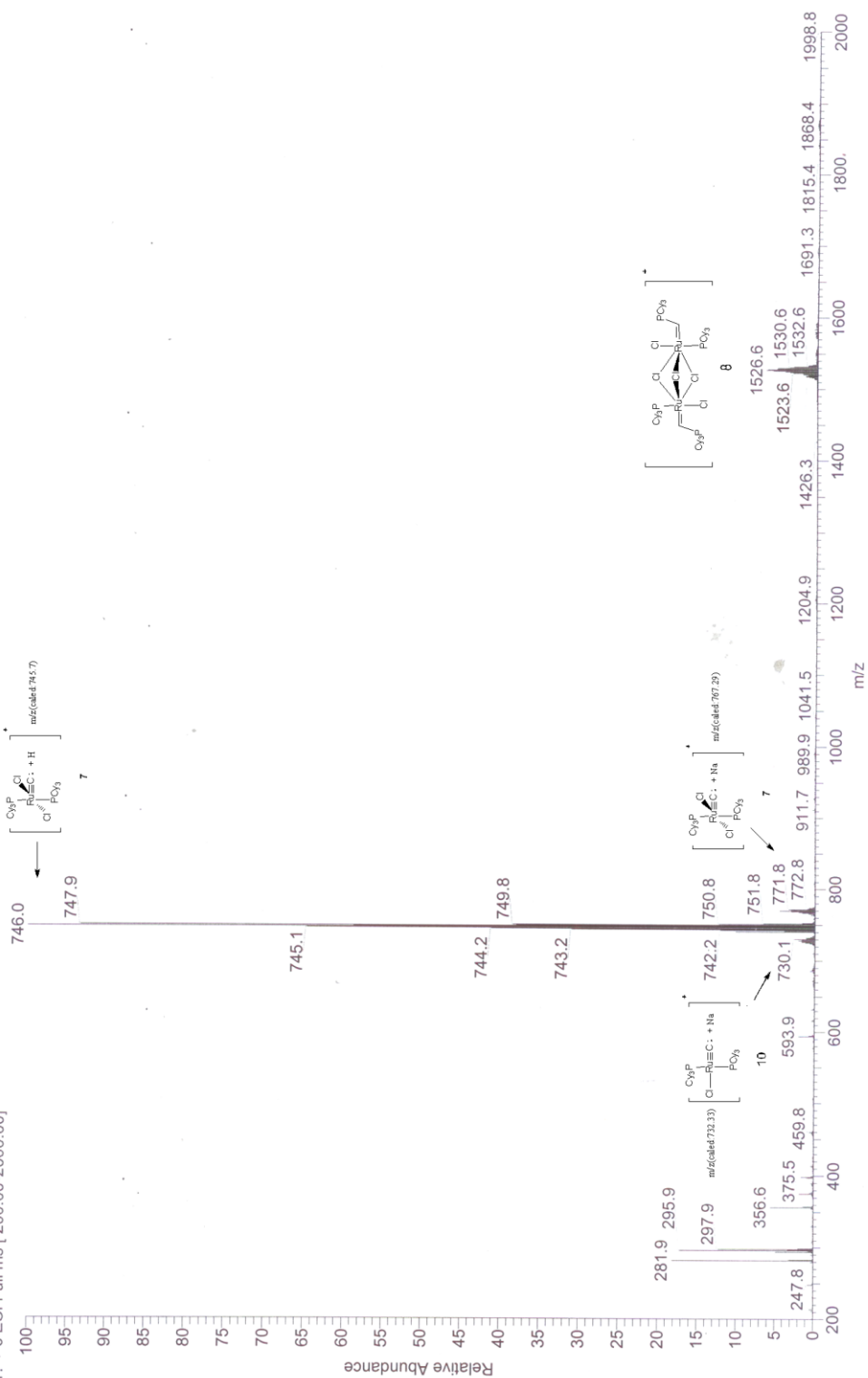


Figure 6 Identification of **10** with mass spectrometry