

Supporting Information

Synthesis of New Cationic Cp*Ir N-Heterocyclic Carbene Complexes and Their High Catalytic Activities in the Oppenauer-Type Oxidation of Primary and Secondary Alcohols

Fumihiro Hanasaki, Ken-ichi Fujita, and Ryohei Yamaguchi*

Graduate School of Human Environmental Studies, Kyoto University, Kyoto 606-8501, Japan

Table of Contents

Preparation of 1,3-dialkyl-4,5-Tetramethylimidazole-2(3H)-thione	S3
Preparation of 1,3-dimethyl-4,5-dihydroimidazolium tetrafluoroborate	S3
Formation of 1,3,4,5-tetramethylimidazol-2-ylidene	S3
Figure S1. ORTEP drawing of 6	S4
Figure S2. ORTEP drawing of the cation part of 7c	S4
Table S1. Crystal data and structure refinement parameters for 3a , 5a , 5d , 6 , 7c ·2(H ₂ O), and 8b ·C ₃ H ₆ O	S5
Table S2. Atomic coordinates and B _{iso} /B _{eq} for 3a	S6
Table S3. Anisotropic Displacement Parameters for 3a	S7
Table S4. Bond Lengths(Å) for 3a	S7
Table S5. Bond Angles(°) for 3a	S8

Table S6. Atomic coordinates and B _{iso} /B _{eq} for 5a	S10
Table S7. Anisotropic Displacement Parameters for 5a	S12
Table S8. Bond Lengths(Å) for 5a	S13
Table S9. Bond Angles(o) for 5a	S14
Table S10. Atomic coordinates and B _{iso} /B _{eq} for 5d	S16
Table S11. Anisotropic Displacement Parameters for 5d	S21
Table S12. Bond Lengths(Å) for 5d	S24
Table S13. Bond Angles(o) for 5d	S27
Table S14. Atomic coordinates and B _{iso} /B _{eq} and occupancy for 6	S32
Table S15. Anisotropic Displacement Parameters for 6	S33
Table S16. Bond Lengths(Å) for 6	S34
Table S17. Bond Angles(o) for 6	S34
Table S18. Atomic coordinates and B _{iso} /B _{eq} for 7c·2(H₂O)	S36
Table S19. Anisotropic Displacement Parameters for 7c·2(H₂O)	S38
Table S20. Bond Lengths(Å) for 7c·2(H₂O)	S39
Table S21. Bond Angles(o) for 7c·2(H₂O)	S40
Table S22. Atomic coordinates and B _{iso} /B _{eq} for 8b·C₃H₆O	S43
Table S23. Anisotropic Displacement Parameters for 8b·C₃H₆O	S45
Table S24. Bond Lengths(Å) for 8b·C₃H₆O	S47
Table S25. Bond Angles(o) for 8b·C₃H₆O	S48

Preparation of 1,3-dialkyl-4,5-Tetramethylimidazole-2(3H)-thione.¹

A 100 mL flask was charged with 3-hydroxy-2-butanone (20 mmol), N,N'-dialkylthiourea (20 mmol), and 1-hexanol (50 mL). The resulting mixture was heated at reflux for 16 h. After the reaction mixture was cooled to room temperature, the solvent was removed in vacuo. The residue was washed with water (20 mL×3). The ethanol solution of crude product was cooled to give colorless crystal of 1,3-dialkyl-4,5-Tetramethylimidazole-2(3H)-thione. 1,3-dimethyl, 1,3-diethyl, and 1,3-diisopropyl-4,5-Tetramethylimidazole-2(3H)-thione was obtained in 49%, 71%, and 73% yield, respectively.

Preparation of 1,3-dimethyl-4,5-dihydroimidazolium tetrafluoroborate.²

A 50 mL flask was charged with triethyl orthoformate (1.483 g, 10.0 mmol), ammonium tetrafluoroborate (1.049 g, 10.0 mmol). After N, N'-dimethylethylenediamine (0.889 g, 10.1 mmol) was added with stirring, the resulting mixture was heated at 120 °C for 3 h. After the reaction mixture was cooled to room temperature, the solvent was removed in vacuo. The residue was washed with EtOH/Et₂O (v/v = 1, 5.0 mL×5). The product was dried in vacuo. ¹H NMR (CDCl₃/CD₃CN = 2/1): δ7.86 (s, 1H, NCHN), 3.92 (s, 4H, NCH₂CH₂N), 3.14 (s, 6H, NMe). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃/CD₃CN = 2/1): δ157.2 (s, NCHN), 45.0 (s, NCH₂CH₂N), 33.7 (s, NMe).

Formation of 1,3,4,5-tetramethylimidazol-2-ylidene.[□]

1,3,4,5-Tetramethylimidazole-2(3H)-thione (1.008 g, 6.45 mmol) was stirred in THF (40 mL) at 0 °C, and metallic potassium (1.380 g, 35.3 mmol) was added. After 15 min, the resulting mixture was heated at reflux for 6.5 h. The reaction mixture was cooled to room temperature and filtered through grass filter. The solvent was removed in vacuo to yield crude product. The THF solution of crude product was cooled to give yellow crystal of

1,3,4,5-tetramethylimidazol-2-ylidene. ^1H NMR (C_6D_6): δ 3.40 (s, 6H, NMe), 1.65 (s, 4H, C=CMe). $^{13}\text{C}\{\text{H}\}$ NMR (C_6D_6): δ 212.4 (s, NCN), 122.6 (s, C=C), 35.4 (s, NMe), 9.0 (s, C=CMe).

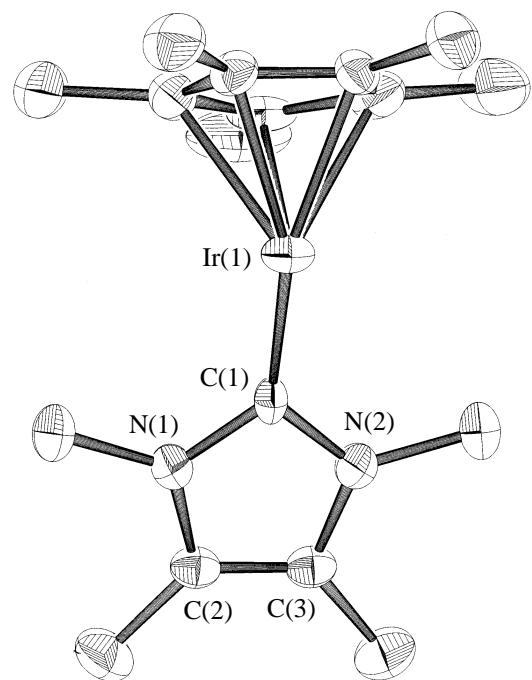


Figure S1. ORTEP drawing (ellipsoids at 50% probability) of **6**. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

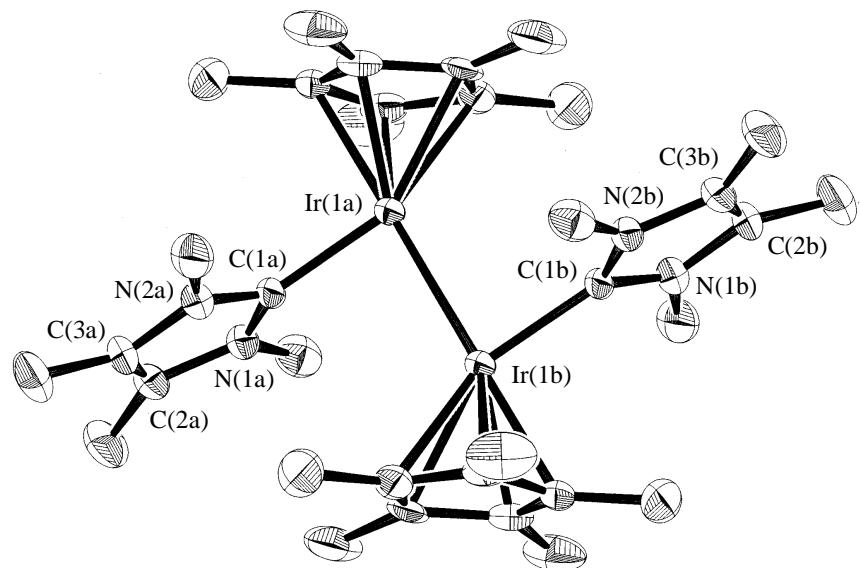


Figure S2. ORTEP drawing (ellipsoids at 50% probability) of the cation part of **7c**. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

Table S1. Crystal Data and Structure Refinement Parameters for **3a**, **5a**, **5d**, **6**, **7c·2(H₂O)**, and **8b·C₃H₆O**

	3a	5a	5d	6	7c·2(H₂O)	8b·C₃H₆O
color, habit	red, block	pale-yellow, block	pale-yellow, block	pale-yellow, block	dark-red, block	pale-yellow, block
max cryst dimens (mm)	0.30 × 0.30 × 0.30	0.30 × 0.30 × 0.50	0.30 × 0.20 × 0.30	0.50 × 0.40 × 0.30	0.40 × 0.40 × 0.30	0.20 × 0.20 × 0.40
cryst syst	monoclinic	monoclinic	monoclinic	orthorhombic	monoclinic	monoclinic
space group	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	<i>P</i> ma	<i>C</i> 2/ <i>c</i>	<i>C</i> 2/ <i>c</i>
<i>a</i> (Å)	15.043(3)	9.055(2)	17.288(8)	8.052(4)	24.764(4)	42.171(4)
<i>b</i> (Å)	8.672(2)	21.448(2)	20.45(1)	15.004(5)	11.882(3)	10.928(5)
<i>c</i> (Å)	15.126(3)	16.176(1)	25.548(9)	14.505(5)	29.616(3)	19.388(5)
α (deg)	90	90	90	90	90	90
β (deg)	110.65(1)	91.865(9)	99.69(3)	90	113.054(8)	114.06(1)
γ (deg)	90	90	90	90	90	90
V (Å ³)	1846.5(7)	3140.1(5)	8904(7)	1752(1)	8019(2)	8159(4)
<i>Z</i>	4	4	12	4	4	8
formula	C ₁₇ H ₂₇ N ₂ Cl ₂ Ir	C ₂₃ H ₃₃ F ₆ N ₄ O ₆ S ₂ Ir	C ₂₁ H ₃₁ F ₆ N ₄ O ₆ S ₂ Ir	C ₁₇ H ₂₃ N ₂ Ir	C ₈₂ H ₉₆ B ₂ N ₄ O ₂ Ir ₂ ·2(H ₂ O)	C ₃₄ H ₆ N ₂ O ₆ F ₆ S ₂ Ir(C ₃ H ₆ O)
<i>f</i> _w	522.54	831.87	805.83	453.65	1579.78	1028.05
<i>D</i> _{cal} (g cm ⁻³)	1.880	1.759	1.803	1.719	1.308	1.674
Radiation (λ , Å)	(b) Data Collection					
temp (K)	Mo K α (0.71069) 203	Mo K α (0.71069) 203	Mo K α (0.71069) 203	Mo K α (0.71069) 203	Mo K α (0.71069) 203	Mo K α (0.71069) 296
scan technique	ω - 2θ	ω - 2θ	ω - 2θ	ω - 2θ	ω - 2θ	ω - 2θ
scan width (deg)	(1.15 + 0.30 tan θ)	(1.21 + 0.30 tan θ)	(0.58 + 0.30 tan θ)	(1.05 + 0.30 tan θ)	(0.68 + 0.30 tan θ)	(1.26 + 0.30 tan θ)
2θ _{max} (deg)	55.0	55.0	55.0	55.0	55.0	55.0
no. of reflns meads	4689	7841	21738	2322	9867	10114
no. of reflns used	3541	4755	9954	1723	7107	5110
no. params varied	199	379	1081	97	424	473
data/params ratio	17.79	12.55	9.21	17.76	16.76	10.80
transm factors	0.6992·1.0000	0.8310·1.0000	0.8223·1.0000	0.6206·1.0000	0.7404·1.0000	0.7694·1.0000
goodness of fit	1.65	1.75	1.26	2.22	1.68	1.93
<i>R</i> ^a	0.025	0.042	0.052	0.033	0.040	0.047
<i>R</i> _w ^a	0.033	0.046	0.049	0.043	0.040	0.050
(c) Structure Determination						

^a $R = \sum \|F_o\| - |F_c| / \sum |F_o|$, $R_w = [\sum w(F_o) - |F_c|]^2 / \sum wF_o^2]^{1/2}$. $w = [\sigma^2(F_o) + p^2(F_o)^2/4]$.

Table S2. Atomic coordinates and B_{iso}/B_{eq} for **3a**

atom	x	y	z	B _{eq}
Ir(1)	-0.011846(9)	0.20134(1)	0.196902(8)	1.130(3)
Cl(1)	-0.16683(7)	0.0869(1)	0.12277(7)	2.27(2)
Cl(2)	0.04595(8)	-0.0615(1)	0.22807(7)	2.31(2)
N(1)	-0.1048(2)	0.2538(4)	0.3471(2)	1.53(6)
N(2)	0.0406(2)	0.1775(4)	0.4118(2)	1.90(6)
C(1)	-0.0278(2)	0.2081(4)	0.3256(2)	1.43(7)
C(2)	-0.0849(3)	0.2496(5)	0.4447(3)	1.68(7)
C(3)	0.0055(3)	0.2065(4)	0.4848(2)	1.75(7)
C(4)	-0.1955(3)	0.3090(5)	0.2814(3)	2.46(8)
C(5)	0.1381(3)	0.1346(5)	0.4291(3)	2.30(8)
C(6)	-0.1574(3)	0.2906(5)	0.4867(3)	2.55(9)
C(7)	0.0668(3)	0.1857(5)	0.5864(3)	2.53(9)
C(8)	0.0587(3)	0.4210(4)	0.2154(2)	1.59(7)
C(9)	-0.0309(3)	0.4297(4)	0.1365(3)	1.64(7)
C(10)	-0.0223(3)	0.3281(4)	0.0633(2)	1.59(7)
C(11)	0.0669(3)	0.2522(4)	0.0982(2)	1.49(7)
C(12)	0.1168(3)	0.3084(4)	0.1941(3)	1.65(7)
C(13)	0.0851(3)	0.5188(5)	0.3026(3)	2.68(9)
C(14)	-0.1079(3)	0.5428(5)	0.1255(3)	2.9(1)
C(15)	-0.0968(3)	0.3077(5)	-0.0317(3)	2.39(8)
C(16)	0.1076(3)	0.1373(5)	0.0491(3)	2.25(8)
C(17)	0.2192(3)	0.2695(5)	0.2496(3)	2.40(8)
H(1)	0.0715	0.4646	0.3514	3.273
H(2)	0.1511	0.5420	0.3241	3.273
H(3)	0.0498	0.6124	0.2897	3.273
H(4)	-0.1337	0.2791	0.5525	3.122
H(5)	-0.1774	0.3966	0.4714	3.122
H(6)	-0.2133	0.2275	0.4601	3.122
H(7)	0.0300	0.1958	0.6258	3.098
H(8)	0.0951	0.0850	0.5956	3.098
H(9)	0.1162	0.2606	0.6040	3.098
H(10)	0.2291	0.2634	0.3155	2.978
H(11)	0.2351	0.1720	0.2296	2.978
H(12)	0.2600	0.3462	0.2401	2.978
H(13)	0.1358	0.0541	0.0918	2.677
H(14)	0.0590	0.0973	-0.0044	2.677
H(15)	0.1552	0.1845	0.0307	2.677
H(16)	0.1701	0.1166	0.4950	2.933
H(17)	0.1400	0.0402	0.3960	2.933
H(18)	0.1698	0.2124	0.4083	2.933

H(19)	-0.2373	0.3372	0.3130	3.101
H(20)	-0.1857	0.3982	0.2476	3.101
H(21)	-0.2252	0.2313	0.2354	3.101
H(22)	-0.1156	0.5562	0.1861	3.524
H(23)	-0.0923	0.6389	0.1060	3.524
H(24)	-0.1658	0.5057	0.0820	3.524
H(25)	-0.1579	0.2947	-0.0274	2.923
H(26)	-0.0994	0.3976	-0.0706	2.923
H(27)	-0.0835	0.2205	-0.0638	2.923

Table S3. Anisotropic Displacement Parameters for **3a**

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Ir(1)	0.01391(7)	0.01478(7)	0.01528(7)	-0.00075(6)	0.00643(5)	-0.00084(5)
Cl(1)	0.0232(4)	0.0356(5)	0.0300(5)	-0.0133(4)	0.0128(4)	-0.0095(4)
Cl(2)	0.0418(6)	0.0181(4)	0.0341(5)	0.0075(4)	0.0211(4)	0.0045(4)
N(1)	0.018(1)	0.024(2)	0.018(1)	0.004(1)	0.008(1)	-0.001(1)
N(2)	0.021(2)	0.028(2)	0.024(2)	-0.001(1)	0.010(1)	-0.002(1)
C(1)	0.017(2)	0.020(2)	0.019(2)	0.000(1)	0.008(1)	-0.003(1)
C(2)	0.024(2)	0.023(2)	0.018(2)	-0.000(2)	0.009(1)	-0.005(1)
C(3)	0.024(2)	0.026(2)	0.017(2)	-0.003(2)	0.007(1)	-0.004(1)
C(4)	0.024(2)	0.047(3)	0.022(2)	0.014(2)	0.008(2)	0.002(2)
C(5)	0.016(2)	0.048(3)	0.024(2)	0.009(2)	0.007(1)	0.007(2)
C(6)	0.033(2)	0.043(3)	0.025(2)	0.003(2)	0.015(2)	-0.009(2)
C(7)	0.035(2)	0.040(2)	0.018(2)	-0.005(2)	0.006(2)	-0.001(2)
C(8)	0.021(2)	0.017(2)	0.023(2)	-0.008(1)	0.009(1)	-0.002(1)
C(9)	0.023(2)	0.015(2)	0.024(2)	-0.003(1)	0.008(1)	0.007(1)
C(10)	0.021(2)	0.020(2)	0.019(2)	-0.006(1)	0.007(1)	0.003(1)
C(11)	0.017(2)	0.026(2)	0.019(2)	-0.005(1)	0.013(1)	0.001(1)
C(12)	0.015(2)	0.023(2)	0.025(2)	-0.001(1)	0.008(1)	0.003(1)
C(13)	0.044(3)	0.024(2)	0.033(2)	-0.007(2)	0.013(2)	-0.009(2)
C(14)	0.038(2)	0.024(2)	0.051(3)	0.009(2)	0.021(2)	0.011(2)
C(15)	0.027(2)	0.037(2)	0.022(2)	-0.002(2)	0.002(2)	0.007(2)
C(16)	0.032(2)	0.029(2)	0.032(2)	-0.001(2)	0.020(2)	-0.002(2)
C(17)	0.015(2)	0.039(2)	0.033(2)	-0.002(2)	0.003(2)	0.006(2)

Table S4. Bond Lengths(Å) for **3a**

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Ir(1)	Cl(1)	2.415(1)	Ir(1)	Cl(2)	2.425(1)
Ir(1)	C(1)	2.044(4)	Ir(1)	C(8)	2.150(4)
Ir(1)	C(9)	2.157(4)	Ir(1)	C(10)	2.257(4)

Ir(1)	C(11)	2.252(4)	Ir(1)	C(12)	2.161(5)
N(1)	C(1)	1.367(6)	N(1)	C(2)	1.400(6)
N(1)	C(4)	1.457(6)	N(2)	C(1)	1.372(6)
N(2)	C(3)	1.406(6)	N(2)	C(5)	1.444(6)
C(2)	C(3)	1.333(7)	C(2)	C(6)	1.486(7)
C(3)	C(7)	1.498(7)	C(4)	H(19)	0.95
C(4)	H(20)	0.97	C(4)	H(21)	0.96
C(5)	H(16)	0.95	C(5)	H(17)	0.96
C(5)	H(18)	0.94	C(6)	H(4)	0.94
C(6)	H(5)	0.97	C(6)	H(6)	0.96
C(7)	H(7)	0.95	C(7)	H(8)	0.96
C(7)	H(9)	0.95	C(8)	C(9)	1.454(6)
C(8)	C(12)	1.422(7)	C(8)	C(13)	1.499(7)
C(9)	C(10)	1.457(7)	C(9)	C(14)	1.482(7)
C(10)	C(11)	1.418(7)	C(10)	C(15)	1.488(6)
C(11)	C(12)	1.462(6)	C(11)	C(16)	1.497(7)
C(12)	C(17)	1.509(6)	C(13)	H(1)	0.96
C(13)	H(2)	0.95	C(13)	H(3)	0.95
C(14)	H(22)	0.97	C(14)	H(23)	0.94
C(14)	H(24)	0.94	C(15)	H(25)	0.95
C(15)	H(26)	0.97	C(15)	H(27)	0.96
C(16)	H(13)	0.96	C(16)	H(14)	0.94
C(16)	H(15)	0.95	C(17)	H(10)	0.95
C(17)	H(11)	0.96	C(17)	H(12)	0.95

Table S5. Bond Angles($^{\circ}$) for **3a**

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Cl(1)	Ir(1)	Cl(2)	85.73(5)	Cl(1)	Ir(1)	C(1)	92.0(1)
Cl(1)	Ir(1)	C(8)	140.9(1)	Cl(1)	Ir(1)	C(9)	102.6(1)
Cl(1)	Ir(1)	C(10)	91.9(1)	Cl(1)	Ir(1)	C(11)	114.8(1)
Cl(1)	Ir(1)	C(12)	153.2(1)	Cl(2)	Ir(1)	C(1)	89.8(1)
Cl(2)	Ir(1)	C(8)	132.9(1)	Cl(2)	Ir(1)	C(9)	158.4(1)
Cl(2)	Ir(1)	C(10)	122.6(1)	Cl(2)	Ir(1)	C(11)	94.4(1)
Cl(2)	Ir(1)	C(12)	98.4(1)	C(1)	Ir(1)	C(8)	93.9(2)
C(1)	Ir(1)	C(9)	109.5(2)	C(1)	Ir(1)	C(10)	147.6(2)
C(1)	Ir(1)	C(11)	153.0(2)	C(1)	Ir(1)	C(12)	114.4(2)
C(8)	Ir(1)	C(9)	39.4(2)	C(8)	Ir(1)	C(10)	63.9(2)
C(8)	Ir(1)	C(11)	64.0(2)	C(8)	Ir(1)	C(12)	38.5(2)
C(9)	Ir(1)	C(10)	38.4(2)	C(9)	Ir(1)	C(11)	64.0(2)
C(9)	Ir(1)	C(12)	65.4(2)	C(10)	Ir(1)	C(11)	36.7(2)
C(10)	Ir(1)	C(12)	63.5(2)	C(11)	Ir(1)	C(12)	38.6(2)

C(1)	N(1)	C(2)	111.1(4)	C(1)	N(1)	C(4)	127.0(4)
C(2)	N(1)	C(4)	121.9(4)	C(1)	N(2)	C(3)	110.4(4)
C(1)	N(2)	C(5)	126.5(4)	C(3)	N(2)	C(5)	122.9(4)
Ir(1)	C(1)	N(1)	128.9(3)	Ir(1)	C(1)	N(2)	126.8(3)
N(1)	C(1)	N(2)	104.2(4)	N(1)	C(2)	C(3)	107.0(4)
N(1)	C(2)	C(6)	122.0(4)	C(3)	C(2)	C(6)	131.1(5)
N(2)	C(3)	C(2)	107.3(4)	N(2)	C(3)	C(7)	121.2(4)
C(2)	C(3)	C(7)	131.4(5)	N(1)	C(4)	H(19)	111.7
N(1)	C(4)	H(20)	110.0	N(1)	C(4)	H(21)	110.4
H(19)	C(4)	H(20)	108.3	H(19)	C(4)	H(21)	109.0
H(20)	C(4)	H(21)	107.3	N(2)	C(5)	H(16)	109.7
N(2)	C(5)	H(17)	109.8	N(2)	C(5)	H(18)	110.9
H(16)	C(5)	H(17)	107.8	H(16)	C(5)	H(18)	109.7
H(17)	C(5)	H(18)	108.8	C(2)	C(6)	H(4)	111.5
C(2)	C(6)	H(5)	109.7	C(2)	C(6)	H(6)	110.4
H(4)	C(6)	H(5)	108.9	H(4)	C(6)	H(6)	109.4
H(5)	C(6)	H(6)	106.8	C(3)	C(7)	H(7)	110.4
C(3)	C(7)	H(8)	109.8	C(3)	C(7)	H(9)	110.0
H(7)	C(7)	H(8)	108.7	H(7)	C(7)	H(9)	109.4
H(8)	C(7)	H(9)	108.5	Ir(1)	C(8)	C(9)	70.5(2)
Ir(1)	C(8)	C(12)	71.1(3)	Ir(1)	C(8)	C(13)	125.5(3)
C(9)	C(8)	C(12)	108.4(4)	C(9)	C(8)	C(13)	125.0(4)
C(12)	C(8)	C(13)	126.5(4)	Ir(1)	C(9)	C(8)	70.0(2)
Ir(1)	C(9)	C(10)	74.5(3)	Ir(1)	C(9)	C(14)	129.6(3)
C(8)	C(9)	C(10)	106.7(4)	C(8)	C(9)	C(14)	126.1(5)
C(10)	C(9)	C(14)	126.2(4)	Ir(1)	C(10)	C(9)	67.1(2)
Ir(1)	C(10)	C(11)	71.5(2)	Ir(1)	C(10)	C(15)	126.7(3)
C(9)	C(10)	C(11)	108.9(4)	C(9)	C(10)	C(15)	124.6(4)
C(11)	C(10)	C(15)	126.6(4)	Ir(1)	C(11)	C(10)	71.9(3)
Ir(1)	C(11)	C(12)	67.3(2)	Ir(1)	C(11)	C(16)	127.0(3)
C(10)	C(11)	C(12)	107.6(4)	C(10)	C(11)	C(16)	128.5(4)
C(12)	C(11)	C(16)	123.9(4)	Ir(1)	C(12)	C(8)	70.3(3)
Ir(1)	C(12)	C(11)	74.1(3)	Ir(1)	C(12)	C(17)	129.7(3)
C(8)	C(12)	C(11)	108.2(4)	C(8)	C(12)	C(17)	128.0(4)
C(11)	C(12)	C(17)	123.0(4)	C(8)	C(13)	H(1)	109.8
C(8)	C(13)	H(2)	109.9	C(8)	C(13)	H(3)	110.3
H(1)	C(13)	H(2)	108.8	H(1)	C(13)	H(3)	108.8
H(2)	C(13)	H(3)	109.2	C(9)	C(14)	H(22)	108.7
C(9)	C(14)	H(23)	110.5	C(9)	C(14)	H(24)	110.2
H(22)	C(14)	H(23)	108.4	H(22)	C(14)	H(24)	108.2
H(23)	C(14)	H(24)	110.8	C(10)	C(15)	H(25)	111.4

C(10)	C(15)	H(26)	110.2	C(10)	C(15)	H(27)	111.3
H(25)	C(15)	H(26)	107.7	H(25)	C(15)	H(27)	108.8
H(26)	C(15)	H(27)	107.3	C(11)	C(16)	H(13)	109.1
C(11)	C(16)	H(14)	110.0	C(11)	C(16)	H(15)	110.0
H(13)	C(16)	H(14)	108.9	H(13)	C(16)	H(15)	108.6
H(14)	C(16)	H(15)	110.1	C(12)	C(17)	H(10)	110.3
C(12)	C(17)	H(11)	110.0	C(12)	C(17)	H(12)	110.2
H(10)	C(17)	H(11)	108.5	H(10)	C(17)	H(12)	109.0
H(11)	C(17)	H(12)	108.8				

Table S6. Atomic coordinates and B_{iso}/B_{eq} for 5a

atom	x	y	z	B _{eq}
Ir(1)	0.20850(2)	0.15799(1)	0.33705(1)	2.428(4)
S(1)	0.3184(2)	0.05939(8)	0.6912(1)	3.91(4)
S(2)	0.7346(4)	0.2293(1)	0.9912(1)	7.77(8)
F(1)	0.2281(7)	0.0041(3)	0.8223(3)	9.5(2)
F(2)	0.4342(7)	0.0498(3)	0.8404(3)	8.7(2)
F(3)	0.4154(6)	-0.0367(3)	0.7748(3)	8.6(2)
F(4)	0.5919(7)	0.1260(3)	0.9854(4)	10.1(2)
F(5)	0.833(2)	0.1411(9)	1.030(1)	40.2(9)
F(6)	0.629(1)	0.1605(3)	1.1053(4)	13.7(3)
O(1)	0.4645(7)	0.0665(3)	0.6622(4)	8.4(2)
O(2)	0.2255(7)	0.0191(3)	0.6433(3)	6.4(2)
O(3)	0.2564(7)	0.1165(3)	0.7150(3)	7.3(2)
O(4)	0.760(1)	0.2248(5)	0.9151(4)	15.6(4)
O(5)	0.549(1)	0.2430(8)	1.004(1)	31.0(8)
O(6)	0.8036(7)	0.2646(3)	1.0524(3)	8.0(2)
N(1)	0.1942(6)	0.0958(2)	0.1652(3)	3.2(1)
N(2)	0.1837(5)	0.0269(2)	0.2599(3)	3.0(1)
N(3)	0.3752(6)	0.2051(2)	0.2763(3)	3.3(1)
N(4)	0.3815(6)	0.1119(3)	0.3961(3)	3.6(1)
C(1)	0.1964(6)	0.0889(3)	0.2491(3)	2.7(1)
C(2)	0.1754(7)	-0.0053(3)	0.1855(4)	3.7(2)
C(3)	0.1822(8)	0.0386(3)	0.1265(4)	4.0(2)
C(4)	0.1759(7)	-0.0054(3)	0.3393(4)	4.0(2)
C(5)	0.1969(8)	0.1544(3)	0.1204(4)	4.4(2)
C(6)	0.160(1)	-0.0734(4)	0.1802(5)	6.3(2)
C(7)	0.187(1)	0.0330(4)	0.0346(5)	6.8(2)
C(8)	0.0348(6)	0.1480(3)	0.4246(3)	3.0(1)
C(9)	0.1294(7)	0.1991(3)	0.4530(3)	3.2(1)
C(10)	0.1292(7)	0.2458(3)	0.3927(3)	2.9(1)
C(11)	0.0319(7)	0.2252(3)	0.3232(3)	2.8(1)

C(12)	-0.0286(6)	0.1665(3)	0.3451(4)	3.1(1)
C(13)	-0.0056(7)	0.0940(3)	0.4773(4)	3.8(2)
C(14)	0.2120(9)	0.1997(3)	0.5348(4)	4.3(2)
C(15)	0.2092(8)	0.3068(3)	0.3969(4)	3.8(2)
C(16)	-0.0113(7)	0.2651(3)	0.2498(4)	3.4(1)
C(17)	-0.1455(8)	0.1313(4)	0.2966(4)	4.5(2)
C(18)	0.672(2)	0.1567(6)	1.0391(7)	11.2(4)
C(19)	0.353(1)	0.0175(4)	0.7875(5)	5.2(2)
C(20)	0.4816(7)	0.0971(3)	0.4349(4)	3.7(2)
C(21)	0.6067(8)	0.0789(4)	0.4864(5)	5.8(2)
C(22)	0.4598(7)	0.2386(3)	0.2556(4)	3.3(1)
C(23)	0.5705(8)	0.2839(3)	0.2317(4)	4.6(2)
H(1)	0.0857	-0.0280	0.3437	4.765
H(2)	0.1813	0.0243	0.3846	4.765
H(3)	0.2565	-0.0339	0.3476	4.765
H(4)	0.0997	0.1668	0.1019	5.370
H(5)	0.2358	0.1875	0.1558	5.370
H(6)	0.2580	0.1521	0.0735	5.370
H(7)	0.1530	-0.0918	0.2341	7.235
H(8)	0.2417	-0.0922	0.1536	7.235
H(9)	0.0712	-0.0847	0.1488	7.235
H(10)	0.2168	0.0718	0.0101	7.746
H(11)	0.0889	0.0237	0.0116	7.746
H(12)	0.2517	0.0012	0.0181	7.746
H(13)	-0.1046	0.0823	0.4648	4.518
H(14)	0.0052	0.1054	0.5337	4.518
H(15)	0.0584	0.0599	0.4664	4.518
H(16)	0.3011	0.1759	0.5306	5.218
H(17)	0.1531	0.1816	0.5757	5.218
H(18)	0.2369	0.2412	0.5497	5.218
H(19)	0.2119	0.3210	0.4523	4.594
H(20)	0.1579	0.3358	0.3624	4.594
H(21)	0.3061	0.3009	0.3785	4.594
H(22)	0.0176	0.3070	0.2603	4.061
H(23)	-0.1141	0.2629	0.2395	4.061
H(24)	0.0389	0.2503	0.2024	4.061
H(25)	-0.2107	0.1118	0.3333	5.474
H(26)	-0.0990	0.0999	0.2643	5.474
H(27)	-0.1985	0.1588	0.2610	5.474
H(28)	0.6155	0.3018	0.2792	5.424
H(29)	0.5231	0.3158	0.1990	5.424
H(30)	0.6422	0.2638	0.1995	5.424

H(31)	0.6622	0.0485	0.4581	6.926
H(32)	0.6665	0.1142	0.4982	6.926
H(33)	0.5728	0.0617	0.5364	6.926

Table S7. Anisotropic Displacement Parameters for **5a**

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Ir(1)	0.0360(1)	0.0332(1)	0.0232(1)	-0.0021(1)	0.00231(7)	0.0007(1)
S(1)	0.069(1)	0.045(1)	0.0352(8)	0.0011(9)	0.0099(8)	-0.0044(7)
S(2)	0.173(3)	0.077(2)	0.046(1)	-0.053(2)	0.009(1)	-0.004(1)
F(1)	0.136(5)	0.158(6)	0.069(3)	-0.031(4)	0.033(4)	0.041(3)
F(2)	0.138(5)	0.122(5)	0.066(3)	-0.024(4)	-0.047(3)	-0.004(3)
F(3)	0.127(5)	0.080(4)	0.116(5)	0.019(4)	-0.033(4)	0.014(3)
F(4)	0.140(6)	0.120(5)	0.124(5)	-0.058(4)	0.032(4)	-0.045(4)
F(5)	0.40(2)	0.62(3)	0.49(2)	0.42(2)	-0.29(2)	-0.43(2)
F(6)	0.29(1)	0.125(6)	0.108(5)	-0.083(6)	0.057(6)	-0.009(5)
O(1)	0.085(4)	0.137(6)	0.098(5)	-0.010(4)	0.047(4)	0.022(4)
O(2)	0.110(5)	0.067(4)	0.063(3)	-0.009(4)	-0.026(3)	0.001(3)
O(3)	0.145(6)	0.075(4)	0.056(3)	0.045(4)	0.005(4)	-0.011(3)
O(4)	0.27(1)	0.27(1)	0.049(4)	-0.19(1)	0.037(6)	-0.018(6)
O(5)	0.19(1)	0.45(2)	0.52(2)	0.25(1)	-0.21(1)	-0.32(2)
O(6)	0.126(6)	0.111(5)	0.066(4)	-0.050(4)	0.011(4)	-0.029(4)
N(1)	0.060(3)	0.037(3)	0.026(3)	-0.001(3)	0.005(2)	0.001(2)
N(2)	0.046(3)	0.030(3)	0.039(3)	0.004(2)	-0.001(2)	0.005(2)
N(3)	0.043(3)	0.047(3)	0.035(3)	-0.007(3)	0.009(2)	-0.007(2)
N(4)	0.040(3)	0.064(4)	0.033(3)	0.002(3)	-0.003(2)	0.005(3)
C(1)	0.027(3)	0.038(3)	0.036(3)	-0.004(3)	0.002(2)	0.004(3)
C(2)	0.052(4)	0.040(4)	0.049(4)	0.002(3)	0.007(3)	-0.011(3)
C(3)	0.067(5)	0.048(4)	0.038(4)	0.005(4)	0.009(3)	-0.008(3)
C(4)	0.064(5)	0.038(4)	0.049(4)	0.002(3)	-0.001(4)	0.016(3)
C(5)	0.081(5)	0.055(4)	0.030(3)	-0.003(4)	0.001(3)	0.004(3)
C(6)	0.115(8)	0.047(5)	0.076(6)	0.004(5)	0.005(5)	-0.015(4)
C(7)	0.149(9)	0.062(5)	0.045(4)	-0.004(6)	0.005(5)	-0.026(4)
C(8)	0.040(3)	0.041(4)	0.033(3)	0.002(3)	0.014(2)	0.004(3)
C(9)	0.059(4)	0.037(4)	0.024(3)	0.003(3)	0.007(3)	-0.004(3)
C(10)	0.051(4)	0.030(3)	0.028(3)	-0.001(3)	0.006(3)	0.003(2)
C(11)	0.043(3)	0.029(3)	0.034(3)	0.004(3)	0.009(3)	-0.000(3)
C(12)	0.038(3)	0.037(4)	0.041(3)	0.006(3)	0.003(3)	0.003(3)
C(13)	0.056(4)	0.052(4)	0.037(4)	-0.007(3)	0.012(3)	0.010(3)
C(14)	0.087(5)	0.049(4)	0.028(3)	-0.008(4)	-0.001(3)	-0.002(3)
C(15)	0.073(5)	0.032(4)	0.041(4)	-0.007(3)	0.010(3)	-0.003(3)
C(16)	0.050(4)	0.041(4)	0.037(3)	-0.002(3)	-0.001(3)	0.005(3)
C(17)	0.045(4)	0.070(5)	0.055(4)	-0.009(4)	-0.001(3)	0.012(4)

C(18)	0.20(1)	0.16(1)	0.077(7)	-0.12(1)	0.083(8)	-0.076(8)
C(19)	0.079(6)	0.066(6)	0.054(5)	0.003(5)	-0.011(4)	0.008(4)
C(20)	0.046(4)	0.061(5)	0.035(3)	0.004(3)	0.005(3)	-0.002(3)
C(21)	0.040(4)	0.125(8)	0.054(5)	0.022(5)	-0.006(3)	0.002(5)
C(22)	0.046(4)	0.044(4)	0.036(3)	-0.005(3)	0.011(3)	-0.006(3)
C(23)	0.053(4)	0.057(5)	0.066(5)	-0.012(4)	0.014(4)	0.002(4)

Table S8. Bond Lengths(Å) for **5a**

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Ir(1)	N(3)	2.088(7)	Ir(1)	N(4)	2.060(7)
Ir(1)	C(1)	2.055(8)	Ir(1)	C(8)	2.161(7)
Ir(1)	C(9)	2.213(7)	Ir(1)	C(10)	2.217(8)
Ir(1)	C(11)	2.160(7)	Ir(1)	C(12)	2.163(8)
S(1)	O(1)	1.426(8)	S(1)	O(2)	1.418(7)
S(1)	O(3)	1.407(7)	S(1)	C(19)	1.82(1)
S(2)	O(4)	1.263(9)	S(2)	O(5)	1.73(2)
S(2)	O(6)	1.380(7)	S(2)	C(18)	1.84(2)
F(1)	C(19)	1.31(1)	F(2)	C(19)	1.31(1)
F(3)	C(19)	1.31(1)	F(4)	C(18)	1.30(1)
F(5)	C(18)	1.50(2)	F(6)	C(18)	1.16(1)
N(1)	C(1)	1.364(9)	N(1)	C(3)	1.38(1)
N(1)	C(5)	1.45(1)	N(2)	C(1)	1.347(9)
N(2)	C(2)	1.39(1)	N(2)	C(4)	1.46(1)
N(3)	C(22)	1.111(9)	N(4)	C(20)	1.13(1)
C(2)	C(3)	1.34(1)	C(2)	C(6)	1.47(1)
C(3)	C(7)	1.49(1)	C(4)	H(1)	0.95
C(4)	H(2)	0.97	C(4)	H(3)	0.96
C(5)	H(4)	0.96	C(5)	H(5)	0.97
C(5)	H(6)	0.95	C(6)	H(7)	0.96
C(6)	H(8)	0.96	C(6)	H(9)	0.97
C(7)	H(10)	0.96	C(7)	H(11)	0.97
C(7)	H(12)	0.94	C(8)	C(9)	1.46(1)
C(8)	C(12)	1.45(1)	C(8)	C(13)	1.49(1)
C(9)	C(10)	1.40(1)	C(9)	C(14)	1.50(1)
C(10)	C(11)	1.47(1)	C(10)	C(15)	1.50(1)
C(11)	C(12)	1.42(1)	C(11)	C(16)	1.50(1)
C(12)	C(17)	1.50(1)	C(13)	H(13)	0.95
C(13)	H(14)	0.95	C(13)	H(15)	0.95
C(14)	H(16)	0.96	C(14)	H(17)	0.95
C(14)	H(18)	0.95	C(15)	H(19)	0.95
C(15)	H(20)	0.95	C(15)	H(21)	0.94
C(16)	H(22)	0.95	C(16)	H(23)	0.94

C(16)	H(24)	0.96	C(17)	H(25)	0.95
C(17)	H(26)	0.96	C(17)	H(27)	0.94
C(20)	C(21)	1.44(1)	C(21)	H(31)	0.95
C(21)	H(32)	0.95	C(21)	H(33)	0.95
C(22)	C(23)	1.46(1)	C(23)	H(28)	0.94
C(23)	H(29)	0.96	C(23)	H(30)	0.95

Table S9. Bond Angles($^{\circ}$) for **5a**

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
N(3)	Ir(1)	N(4)	84.3(3)	N(3)	Ir(1)	C(1)	92.6(3)
N(3)	Ir(1)	C(8)	155.4(3)	N(3)	Ir(1)	C(9)	117.7(3)
N(3)	Ir(1)	C(10)	91.7(3)	N(3)	Ir(1)	C(11)	99.9(3)
N(3)	Ir(1)	C(12)	136.2(3)	N(4)	Ir(1)	C(1)	89.9(3)
N(4)	Ir(1)	C(8)	101.9(3)	N(4)	Ir(1)	C(9)	93.4(3)
N(4)	Ir(1)	C(10)	118.1(3)	N(4)	Ir(1)	C(11)	156.6(3)
N(4)	Ir(1)	C(12)	138.9(3)	C(1)	Ir(1)	C(8)	111.0(3)
C(1)	Ir(1)	C(9)	149.6(3)	C(1)	Ir(1)	C(10)	152.0(3)
C(1)	Ir(1)	C(11)	112.8(3)	C(1)	Ir(1)	C(12)	94.1(3)
C(8)	Ir(1)	C(9)	38.9(3)	C(8)	Ir(1)	C(10)	64.3(3)
C(8)	Ir(1)	C(11)	65.3(3)	C(8)	Ir(1)	C(12)	39.1(3)
C(9)	Ir(1)	C(10)	36.8(3)	C(9)	Ir(1)	C(11)	64.1(3)
C(9)	Ir(1)	C(12)	64.3(3)	C(10)	Ir(1)	C(11)	39.3(3)
C(10)	Ir(1)	C(12)	64.4(3)	C(11)	Ir(1)	C(12)	38.4(3)
O(1)	S(1)	O(2)	115.3(5)	O(1)	S(1)	O(3)	112.3(6)
O(1)	S(1)	C(19)	101.5(5)	O(2)	S(1)	O(3)	116.4(5)
O(2)	S(1)	C(19)	104.5(5)	O(3)	S(1)	C(19)	104.8(5)
O(4)	S(2)	O(5)	110(1)	O(4)	S(2)	O(6)	130.5(6)
O(4)	S(2)	C(18)	114.5(7)	O(5)	S(2)	O(6)	104.1(7)
O(5)	S(2)	C(18)	77(1)	O(6)	S(2)	C(18)	107.5(6)
C(1)	N(1)	C(3)	110.7(7)	C(1)	N(1)	C(5)	126.2(7)
C(3)	N(1)	C(5)	123.0(7)	C(1)	N(2)	C(2)	112.4(7)
C(1)	N(2)	C(4)	126.0(7)	C(2)	N(2)	C(4)	121.6(7)
Ir(1)	N(3)	C(22)	166.3(7)	Ir(1)	N(4)	C(20)	167.3(8)
Ir(1)	C(1)	N(1)	127.5(6)	Ir(1)	C(1)	N(2)	128.7(6)
N(1)	C(1)	N(2)	103.7(6)	N(2)	C(2)	C(3)	105.4(7)
N(2)	C(2)	C(6)	123.1(9)	C(3)	C(2)	C(6)	131.5(9)
N(1)	C(3)	C(2)	107.7(7)	N(1)	C(3)	C(7)	121.3(8)
C(2)	C(3)	C(7)	130.9(9)	N(2)	C(4)	H(1)	111.8
N(2)	C(4)	H(2)	110.5	N(2)	C(4)	H(3)	111.5
H(1)	C(4)	H(2)	107.4	H(1)	C(4)	H(3)	108.3
H(2)	C(4)	H(3)	107.1	N(1)	C(5)	H(4)	111.5

N(1)	C(5)	H(5)	110.5	N(1)	C(5)	H(6)	111.8
H(4)	C(5)	H(5)	107.1	H(4)	C(5)	H(6)	108.4
H(5)	C(5)	H(6)	107.3	C(2)	C(6)	H(7)	111.5
C(2)	C(6)	H(8)	111.8	C(2)	C(6)	H(9)	110.8
H(7)	C(6)	H(8)	108.0	H(7)	C(6)	H(9)	107.2
H(8)	C(6)	H(9)	107.4	C(3)	C(7)	H(10)	110.9
C(3)	C(7)	H(11)	109.8	C(3)	C(7)	H(12)	112.3
H(10)	C(7)	H(11)	106.4	H(10)	C(7)	H(12)	109.1
H(11)	C(7)	H(12)	108.1	Ir(1)	C(8)	C(9)	72.5(4)
Ir(1)	C(8)	C(12)	70.5(4)	Ir(1)	C(8)	C(13)	130.5(6)
C(9)	C(8)	C(12)	106.6(7)	C(9)	C(8)	C(13)	123.9(7)
C(12)	C(8)	C(13)	128.6(8)	Ir(1)	C(9)	C(8)	68.7(4)
Ir(1)	C(9)	C(10)	71.7(4)	Ir(1)	C(9)	C(14)	125.9(6)
C(8)	C(9)	C(10)	109.4(7)	C(8)	C(9)	C(14)	123.8(7)
C(10)	C(9)	C(14)	126.8(8)	Ir(1)	C(10)	C(9)	71.4(4)
Ir(1)	C(10)	C(11)	68.3(4)	Ir(1)	C(10)	C(15)	126.8(6)
C(9)	C(10)	C(11)	107.8(7)	C(9)	C(10)	C(15)	127.2(7)
C(11)	C(10)	C(15)	125.0(7)	Ir(1)	C(11)	C(10)	72.4(4)
Ir(1)	C(11)	C(12)	70.9(4)	Ir(1)	C(11)	C(16)	129.3(5)
C(10)	C(11)	C(12)	107.5(7)	C(10)	C(11)	C(16)	124.5(7)
C(12)	C(11)	C(16)	127.4(7)	Ir(1)	C(12)	C(8)	70.4(4)
Ir(1)	C(12)	C(11)	70.6(4)	Ir(1)	C(12)	C(17)	127.6(6)
C(8)	C(12)	C(11)	108.6(7)	C(8)	C(12)	C(17)	125.4(7)
C(11)	C(12)	C(17)	125.9(7)	C(8)	C(13)	H(13)	109.4
C(8)	C(13)	H(14)	109.3	C(8)	C(13)	H(15)	109.1
H(13)	C(13)	H(14)	110.0	H(13)	C(13)	H(15)	109.5
H(14)	C(13)	H(15)	109.5	C(9)	C(14)	H(16)	109.3
C(9)	C(14)	H(17)	109.8	C(9)	C(14)	H(18)	109.9
H(16)	C(14)	H(17)	109.0	H(16)	C(14)	H(18)	108.9
H(17)	C(14)	H(18)	109.9	C(10)	C(15)	H(19)	108.8
C(10)	C(15)	H(20)	108.7	C(10)	C(15)	H(21)	108.8
H(19)	C(15)	H(20)	110.0	H(19)	C(15)	H(21)	110.3
H(20)	C(15)	H(21)	110.2	C(11)	C(16)	H(22)	109.5
C(11)	C(16)	H(23)	110.0	C(11)	C(16)	H(24)	109.0
H(22)	C(16)	H(23)	110.1	H(22)	C(16)	H(24)	108.7
H(23)	C(16)	H(24)	109.5	C(12)	C(17)	H(25)	109.7
C(12)	C(17)	H(26)	108.9	C(12)	C(17)	H(27)	109.9
H(25)	C(17)	H(26)	108.9	H(25)	C(17)	H(27)	110.1
H(26)	C(17)	H(27)	109.3	S(2)	C(18)	F(4)	109(1)
S(2)	C(18)	F(5)	81(1)	S(2)	C(18)	F(6)	117(1)
F(4)	C(18)	F(5)	110(1)	F(4)	C(18)	F(6)	117(1)
F(5)	C(18)	F(6)	118(2)	S(1)	C(19)	F(1)	110.5(8)

S(1)	C(19)	F(2)	112.1(8)	S(1)	C(19)	F(3)	111.6(8)
F(1)	C(19)	F(2)	108(1)	F(1)	C(19)	F(3)	105(1)
F(2)	C(19)	F(3)	109.6(9)	N(4)	C(20)	C(21)	178.3(9)
C(20)	C(21)	H(31)	109.1	C(20)	C(21)	H(32)	109.5
C(20)	C(21)	H(33)	109.2	H(31)	C(21)	H(32)	109.8
H(31)	C(21)	H(33)	109.6	H(32)	C(21)	H(33)	109.7
N(3)	C(22)	C(23)	177.6(9)	C(22)	C(23)	H(28)	109.8
C(22)	C(23)	H(29)	108.8	C(22)	C(23)	H(30)	109.3
H(28)	C(23)	H(29)	109.6	H(28)	C(23)	H(30)	110.3
H(29)	C(23)	H(30)	109.0				

Table S10. Atomic coordinates and $B_{\text{iso}}/B_{\text{eq}}$ for **5d**

atom	x	y	z	B_{eq}
Ir(1a)	0.13279(2)	0.17624(2)	0.28039(1)	2.810(9)
Ir(1c)	-0.45662(2)	-0.37603(2)	-0.15658(2)	2.898(9)
Ir(1b)	0.21838(2)	-0.30234(2)	-0.46270(2)	3.30(1)
S(1)	0.3687(2)	0.0692(1)	0.1500(1)	3.83(7)
S(2)	0.7080(2)	0.0349(2)	0.5679(1)	4.25(8)
S(3)	0.0619(2)	0.1788(2)	0.5988(1)	4.99(9)
S(4)	0.0144(2)	0.0464(2)	0.8798(1)	4.46(8)
S(5)	-0.3757(3)	-0.2867(2)	-0.4134(2)	8.7(1)
S(6)	0.7228(3)	0.1730(3)	0.2698(3)	9.7(2)
F(1)	0.4709(5)	0.1517(5)	0.1243(4)	9.5(3)
F(2)	0.4779(5)	0.0563(5)	0.0919(4)	10.6(3)
F(3)	0.5213(4)	0.0734(4)	0.1746(4)	8.6(3)
F(4)	0.7867(6)	-0.0132(5)	0.4986(3)	10.9(3)
F(5)	0.8546(5)	0.0071(6)	0.5710(4)	12.0(4)
F(6)	0.7829(6)	-0.0746(5)	0.5643(4)	10.6(3)
F(7)	-0.0363(6)	0.1015(6)	0.5406(5)	13.0(4)
F(8)	0.061(1)	0.1302(8)	0.5058(5)	22.2(8)
F(9)	0.0698(6)	0.0615(5)	0.5632(5)	11.3(4)
F(10)	0.1043(5)	0.0020(4)	0.8155(4)	9.4(3)
F(11)	0.1656(5)	0.0521(4)	0.8818(5)	10.8(3)
F(12)	0.1235(4)	-0.0444(3)	0.8916(3)	7.6(2)
F(13)	-0.3860(7)	-0.3755(5)	-0.4838(4)	11.8(4)
F(14)	-0.3294(9)	-0.3995(7)	-0.3991(5)	17.2(6)
F(15)	-0.4590(6)	-0.3911(4)	-0.4276(4)	10.4(3)
F(16)	0.6645(8)	0.140(1)	0.1779(5)	21.3(7)
F(17)	0.7645(9)	0.1886(7)	0.1796(7)	21.1(7)
F(18)	0.7682(9)	0.0936(5)	0.2026(4)	12.5(4)
O(1)	0.3716(5)	0.0004(4)	0.1588(3)	5.9(2)

O(2)	0.3158(5)	0.0905(4)	0.1037(3)	5.2(2)
O(3)	0.3665(4)	0.1075(4)	0.1972(3)	5.4(2)
O(4)	0.6391(5)	0.0026(4)	0.5431(3)	6.4(2)
O(5)	0.7211(5)	0.0321(5)	0.6236(3)	6.5(3)
O(6)	0.7201(6)	0.0982(4)	0.5471(4)	7.7(3)
O(7)	0.0182(8)	0.2323(5)	0.5790(6)	15.2(5)
O(8)	0.0353(8)	0.1506(6)	0.6416(5)	11.9(5)
O(9)	0.1403(6)	0.1884(6)	0.6019(6)	14.3(5)
O(10)	-0.0413(5)	-0.0009(4)	0.8579(4)	8.0(3)
O(11)	0.0103(6)	0.1091(4)	0.8575(5)	9.4(3)
O(12)	0.0250(8)	0.0462(7)	0.9358(4)	12.7(5)
O(13)	-0.4496(7)	-0.2627(7)	-0.4590(6)	13.8(5)
O(14)	-0.3053(5)	-0.2656(6)	-0.4264(4)	8.6(3)
O(15)	-0.3895(7)	-0.2804(5)	-0.3631(4)	9.9(4)
O(16)	0.679(1)	0.1207(7)	0.2868(5)	16.3(7)
O(17)	0.6781(7)	0.2288(5)	0.2692(7)	14.0(5)
O(18)	0.7968(9)	0.172(1)	0.2918(8)	30(1)
N(1a)	0.0314(6)	0.0620(4)	0.3056(4)	4.4(3)
N(1b)	0.3288(5)	-0.3861(4)	-0.5150(4)	4.5(3)
N(1c)	-0.3052(5)	-0.4419(5)	-0.1739(5)	4.9(3)
N(2b)	0.2470(6)	-0.4463(5)	-0.4799(4)	4.7(3)
N(2a)	0.1353(6)	0.0277(4)	0.2743(4)	4.3(2)
N(2c)	-0.3819(6)	-0.4233(4)	-0.2493(4)	4.3(3)
N(3a)	0.1155(5)	0.2032(4)	0.3559(4)	3.7(2)
N(3b)	0.2056(5)	-0.2580(4)	-0.5372(4)	4.0(2)
N(3c)	-0.3734(5)	-0.3174(4)	-0.1130(3)	3.3(2)
N(4b)	0.1093(6)	-0.3410(4)	-0.4941(4)	3.8(2)
N(4a)	0.2405(5)	0.1496(4)	0.3205(3)	3.4(2)
N(4c)	-0.4682(5)	-0.2976(4)	-0.2084(3)	3.4(2)
C(1a)	0.0981(6)	0.0807(5)	0.2880(4)	3.1(2)
C(1b)	0.2682(6)	-0.3852(5)	-0.4891(4)	3.7(3)
C(1c)	-0.3729(7)	-0.4159(5)	-0.1960(5)	3.9(3)
C(2b)	0.2966(8)	-0.4949(6)	-0.5034(5)	6.0(4)
C(2a)	0.093(1)	-0.0327(5)	0.2841(6)	6.9(4)
C(2c)	-0.3175(9)	-0.4579(6)	-0.2651(6)	6.3(4)
C(3a)	0.0204(9)	-0.0097(7)	0.3053(6)	7.0(4)
C(3b)	0.3521(9)	-0.4519(7)	-0.5262(6)	7.1(5)
C(3c)	-0.2608(7)	-0.4673(6)	-0.2130(7)	6.3(4)
C(4b)	0.1843(7)	-0.4710(5)	-0.4531(5)	5.2(3)
C(4a)	0.2052(8)	0.0238(6)	0.2519(5)	5.5(3)
C(4c)	-0.4489(8)	-0.4069(6)	-0.2893(4)	5.1(3)
C(5a)	-0.0262(8)	0.1019(7)	0.3224(6)	6.8(4)

C(5b)	0.3722(8)	-0.3305(6)	-0.5304(5)	6.2(4)
C(5c)	-0.2729(7)	-0.4439(7)	-0.1185(6)	6.4(4)
C(6b)	0.2287(6)	-0.3108(5)	-0.3782(4)	3.7(3)
C(6a)	0.1367(6)	0.1877(5)	0.1978(4)	3.3(2)
C(6c)	-0.5799(6)	-0.4003(5)	-0.1703(4)	3.8(3)
C(7a)	0.1795(6)	0.2425(5)	0.2236(4)	3.4(3)
C(7b)	0.1772(6)	-0.2550(5)	-0.3946(4)	3.8(3)
C(7c)	-0.5640(6)	-0.3666(5)	-0.1215(5)	3.8(3)
C(8b)	0.2207(7)	-0.2075(5)	-0.4185(4)	3.9(3)
C(8a)	0.1297(6)	0.2782(5)	0.2510(4)	3.0(2)
C(8c)	-0.5094(6)	-0.4048(5)	-0.0868(4)	3.3(2)
C(9a)	0.0523(5)	0.2493(5)	0.2396(4)	2.9(2)
C(9b)	0.2987(6)	-0.2332(5)	-0.4170(4)	3.5(3)
C(9c)	-0.4886(6)	-0.4613(5)	-0.1144(4)	3.1(2)
C(10b)	0.3053(6)	-0.2949(5)	-0.3898(4)	3.5(3)
C(10a)	0.0560(6)	0.1940(5)	0.2047(4)	3.5(3)
C(10c)	-0.5347(6)	-0.4592(5)	-0.1672(4)	3.4(3)
C(11a)	0.1635(6)	0.1435(6)	0.1573(4)	4.3(3)
C(11b)	0.2097(6)	-0.3644(5)	-0.3432(4)	4.3(3)
C(11c)	-0.6387(7)	-0.3812(6)	-0.2182(5)	5.8(3)
C(12b)	0.0950(7)	-0.2497(6)	-0.3865(5)	4.9(3)
C(12a)	0.2639(6)	0.2559(6)	0.2237(4)	4.4(3)
C(12c)	-0.6022(7)	-0.3049(6)	-0.1082(6)	6.0(4)
C(13a)	0.1497(7)	0.3382(5)	0.2839(5)	4.5(3)
C(13b)	0.1928(7)	-0.1433(5)	-0.4387(5)	4.7(3)
C(13c)	-0.4781(7)	-0.3889(6)	-0.0309(4)	4.9(3)
C(14b)	0.3646(7)	-0.1954(5)	-0.4336(5)	4.8(3)
C(14a)	-0.0198(6)	0.2768(5)	0.2566(4)	3.9(3)
C(14c)	-0.4404(7)	-0.5184(5)	-0.0913(5)	5.0(3)
C(15a)	-0.0123(6)	0.1535(5)	0.1809(4)	4.1(3)
C(15b)	0.3770(6)	-0.3354(6)	-0.3743(5)	4.7(3)
C(15c)	-0.5388(8)	-0.5127(6)	-0.2070(4)	5.7(4)
C(16b)	0.0498(7)	-0.3573(5)	-0.5132(4)	3.8(3)
C(16a)	0.2974(7)	0.1369(5)	0.3460(5)	4.1(3)
C(16c)	-0.4776(6)	-0.2555(5)	-0.2371(4)	3.2(3)
C(17a)	0.3711(7)	0.1220(6)	0.3815(5)	5.0(3)
C(17b)	-0.0268(6)	-0.3805(6)	-0.5377(4)	4.8(3)
C(17c)	-0.4887(7)	-0.2012(5)	-0.2750(4)	4.1(3)
C(18b)	0.1894(7)	-0.2291(6)	-0.5760(5)	4.1(3)
C(18a)	0.1160(6)	0.2312(6)	0.3948(4)	4.0(3)
C(18c)	-0.3327(7)	-0.2821(6)	-0.0877(4)	3.8(3)
C(19a)	0.1180(7)	0.2712(7)	0.4416(4)	5.8(4)

C(19b)	0.1659(7)	-0.1937(6)	-0.6242(4)	4.6(3)
C(19c)	-0.2799(7)	-0.2368(6)	-0.0546(4)	5.1(3)
C(20)	0.4638(8)	0.0880(8)	0.1336(7)	6.2(4)
C(21)	0.7849(9)	-0.0142(8)	0.5484(6)	6.1(4)
C(22)	0.039(1)	0.1159(8)	0.5487(6)	7.2(5)
C(23)	0.1081(9)	0.0148(7)	0.8700(7)	6.4(4)
C(24)	-0.391(1)	-0.365(1)	-0.4348(9)	11.4(7)
C(25)	0.730(1)	0.1491(9)	0.2065(8)	8.0(5)
H(1)	0.2193	0.0615	0.2329	6.600
H(2)	0.2016	-0.0117	0.2205	6.600
H(3)	0.2531	0.0084	0.2738	6.600
H(4)	-0.0427	0.1402	0.3012	8.397
H(5)	-0.0763	0.0823	0.3297	8.397
H(6)	-0.0079	0.1239	0.3598	8.397
H(7)	0.0790	-0.0622	0.2553	8.814
H(8)	0.1268	-0.0617	0.3124	8.814
H(9)	-0.0307	-0.0231	0.2871	9.120
H(10)	0.0163	-0.0251	0.3445	9.120
H(11)	0.1456	0.1614	0.1209	4.811
H(12)	0.1433	0.1018	0.1581	4.811
H(13)	0.2197	0.1424	0.1612	4.811
H(14)	0.2724	0.2930	0.2018	4.843
H(15)	0.2892	0.2188	0.2100	4.843
H(16)	0.2919	0.2645	0.2587	4.843
H(17)	0.1100	0.3701	0.2756	5.280
H(18)	0.1531	0.3270	0.3214	5.280
H(19)	0.1989	0.3558	0.2795	5.280
H(20)	-0.0277	0.3209	0.2449	4.526
H(21)	-0.0629	0.2511	0.2447	4.526
H(22)	-0.0111	0.2780	0.2957	4.526
H(23)	-0.0486	0.1809	0.1534	5.128
H(24)	0.0047	0.1194	0.1585	5.128
H(25)	-0.0408	0.1375	0.2038	5.128
H(26)	0.3621	0.1021	0.4156	6.735
H(27)	0.4034	0.1610	0.3937	6.735
H(28)	0.4046	0.0928	0.3673	6.735
H(29)	0.1665	0.2613	0.4653	6.359
H(30)	0.1184	0.3152	0.4317	6.359
H(31)	0.0756	0.2608	0.4580	6.359
H(32)	0.1996	-0.4614	-0.4136	5.863
H(33)	0.1745	-0.5134	-0.4574	5.863
H(34)	0.1366	-0.4445	-0.4625	5.863

H(35)	0.3918	-0.3060	-0.4998	6.575
H(36)	0.4142	-0.3454	-0.5469	6.575
H(37)	0.3374	-0.3048	-0.5547	6.575
H(38)	0.3297	-0.5201	-0.4802	7.846
H(39)	0.2728	-0.5159	-0.5339	7.846
H(40)	0.4107	-0.4574	-0.5097	8.065
H(41)	0.3559	-0.4564	-0.5644	8.065
H(42)	0.2144	-0.3554	-0.3070	5.301
H(43)	0.2470	-0.4043	-0.3443	5.301
H(44)	0.1589	-0.3851	-0.3552	5.301
H(45)	0.0905	-0.2455	-0.3485	5.820
H(46)	0.0622	-0.2823	-0.4013	5.820
H(47)	0.0715	-0.2068	-0.4013	5.820
H(48)	0.2302	-0.1178	-0.4539	6.271
H(49)	0.1447	-0.1436	-0.4626	6.271
H(50)	0.1812	-0.1133	-0.4084	6.271
H(51)	0.3976	-0.1767	-0.4026	5.843
H(52)	0.3962	-0.2222	-0.4514	5.843
H(53)	0.3449	-0.1596	-0.4562	5.843
H(54)	0.3875	-0.3443	-0.3372	5.459
H(55)	0.3703	-0.3791	-0.3918	5.459
H(56)	0.4218	-0.3166	-0.3849	5.459
H(57)	-0.0602	-0.3882	-0.5137	5.439
H(58)	-0.0234	-0.4191	-0.5593	5.439
H(59)	-0.0523	-0.3471	-0.5636	5.439
H(60)	0.2089	-0.1801	-0.6405	5.534
H(61)	0.1265	-0.2123	-0.6492	5.534
H(62)	0.1418	-0.1491	-0.6155	5.534
H(63)	-0.4662	-0.4433	-0.3133	6.192
H(64)	-0.4395	-0.3707	-0.3111	6.192
H(65)	-0.4941	-0.3956	-0.2730	6.192
H(66)	-0.3153	-0.4445	-0.0961	8.122
H(67)	-0.2406	-0.4810	-0.1064	8.122
H(68)	-0.2426	-0.4051	-0.1062	8.122
H(69)	-0.3319	-0.5003	-0.2850	7.363
H(70)	-0.2913	-0.4341	-0.2925	7.363
H(71)	-0.2466	-0.5158	-0.2090	7.900
H(72)	-0.2103	-0.4473	-0.2143	7.900
H(73)	-0.5458	-0.5559	-0.1927	6.472
H(74)	-0.4904	-0.5164	-0.2227	6.472
H(75)	-0.5806	-0.5081	-0.2377	6.472
H(76)	-0.6903	-0.3714	-0.2107	6.359

H(77)	-0.6480	-0.4194	-0.2435	6.359
H(78)	-0.6227	-0.3465	-0.2384	6.359
H(79)	-0.6546	-0.3051	-0.1245	6.914
H(80)	-0.5745	-0.2691	-0.1174	6.914
H(81)	-0.6006	-0.3044	-0.0695	6.914
H(82)	-0.5123	-0.4013	-0.0081	5.178
H(83)	-0.4281	-0.4110	-0.0202	5.178
H(84)	-0.4673	-0.3426	-0.0270	5.178
H(85)	-0.4709	-0.5571	-0.0948	5.392
H(86)	-0.3968	-0.5244	-0.1101	5.392
H(87)	-0.4194	-0.5114	-0.0547	5.392
H(88)	-0.5122	-0.1630	-0.2586	4.672
H(89)	-0.5241	-0.2110	-0.3063	4.672
H(90)	-0.4407	-0.1853	-0.2836	4.672
H(91)	-0.2887	-0.2395	-0.0177	5.624
H(92)	-0.2256	-0.2524	-0.0531	5.624
H(93)	-0.2843	-0.1950	-0.0663	5.624

Table S11. Anisotropic Displacement Parameters for **5d**

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Ir(1a)	0.0382(2)	0.0341(2)	0.0350(2)	0.0016(2)	0.0078(2)	-0.0016(2)
Ir(1c)	0.0414(2)	0.0354(2)	0.0322(2)	-0.0024(2)	0.0029(2)	0.0024(2)
Ir(1b)	0.0404(2)	0.0427(3)	0.0419(3)	-0.0009(2)	0.0060(2)	0.0110(2)
S(1)	0.046(2)	0.048(2)	0.050(2)	0.003(1)	0.006(1)	-0.006(1)
S(2)	0.060(2)	0.059(2)	0.041(2)	-0.002(2)	0.006(2)	0.001(2)
S(3)	0.061(2)	0.047(2)	0.084(3)	-0.004(2)	0.019(2)	-0.006(2)
S(4)	0.072(2)	0.044(2)	0.055(2)	-0.000(2)	0.015(2)	-0.003(2)
S(5)	0.156(5)	0.102(3)	0.089(3)	-0.064(3)	0.072(3)	-0.038(3)
S(6)	0.101(4)	0.107(4)	0.137(5)	0.045(3)	-0.049(3)	-0.060(4)
F(1)	0.092(7)	0.088(7)	0.19(1)	-0.017(5)	0.037(6)	0.050(6)
F(2)	0.101(7)	0.18(1)	0.139(9)	0.032(7)	0.068(7)	-0.004(8)
F(3)	0.049(5)	0.118(7)	0.155(9)	0.003(5)	0.004(5)	0.020(6)
F(4)	0.22(1)	0.139(8)	0.065(6)	0.065(8)	0.068(7)	0.005(6)
F(5)	0.066(6)	0.24(1)	0.16(1)	-0.000(7)	0.037(6)	-0.032(9)
F(6)	0.155(9)	0.096(7)	0.17(1)	0.052(7)	0.088(8)	0.043(7)
F(7)	0.105(8)	0.18(1)	0.19(1)	-0.021(8)	-0.044(8)	-0.061(9)
F(8)	0.52(3)	0.23(2)	0.12(1)	-0.18(2)	0.15(2)	-0.06(1)
F(9)	0.137(9)	0.083(7)	0.20(1)	0.004(7)	-0.005(8)	-0.062(8)
F(10)	0.135(8)	0.116(7)	0.118(8)	0.039(6)	0.055(7)	0.014(6)
F(11)	0.064(6)	0.083(6)	0.25(1)	-0.020(5)	-0.024(7)	0.044(7)
F(12)	0.085(6)	0.057(5)	0.137(8)	0.008(4)	-0.014(5)	0.036(5)
F(13)	0.19(1)	0.17(1)	0.097(7)	-0.010(8)	0.045(7)	-0.071(7)

F(14)	0.23(1)	0.29(2)	0.14(1)	0.16(1)	0.03(1)	0.04(1)
F(15)	0.135(9)	0.102(7)	0.16(1)	-0.037(6)	0.027(7)	-0.052(6)
F(16)	0.13(1)	0.55(3)	0.11(1)	-0.12(2)	-0.021(8)	-0.01(1)
F(17)	0.25(2)	0.22(1)	0.36(2)	-0.01(1)	0.15(2)	0.18(2)
F(18)	0.29(2)	0.109(8)	0.102(8)	0.010(9)	0.097(9)	-0.001(7)
O(1)	0.083(6)	0.045(5)	0.094(7)	-0.004(5)	0.011(5)	-0.007(5)
O(2)	0.076(6)	0.066(5)	0.050(5)	0.019(5)	-0.005(4)	-0.003(4)
O(3)	0.067(6)	0.073(6)	0.062(5)	0.010(4)	-0.001(4)	-0.022(4)
O(4)	0.060(6)	0.098(7)	0.075(6)	-0.006(5)	-0.018(5)	0.001(5)
O(5)	0.067(6)	0.137(8)	0.038(5)	0.015(6)	-0.005(4)	-0.003(5)
O(6)	0.139(9)	0.056(6)	0.107(8)	-0.001(6)	0.053(7)	0.013(5)
O(7)	0.21(1)	0.056(7)	0.28(2)	0.040(8)	-0.07(1)	0.014(9)
O(8)	0.22(1)	0.14(1)	0.098(9)	-0.08(1)	0.058(9)	-0.033(8)
O(9)	0.084(8)	0.18(1)	0.29(2)	-0.063(8)	0.07(1)	-0.16(1)
O(10)	0.068(6)	0.063(6)	0.17(1)	-0.006(5)	0.004(6)	-0.012(6)
O(11)	0.092(7)	0.052(6)	0.22(1)	0.016(5)	0.066(8)	0.056(7)
O(12)	0.24(2)	0.18(1)	0.075(8)	0.01(1)	0.066(9)	-0.034(8)
O(13)	0.13(1)	0.16(1)	0.20(1)	0.043(9)	-0.05(1)	0.08(1)
O(14)	0.079(7)	0.16(1)	0.094(8)	-0.039(7)	0.039(6)	-0.040(7)
O(15)	0.22(1)	0.089(8)	0.086(8)	-0.067(8)	0.090(8)	-0.035(6)
O(16)	0.41(3)	0.12(1)	0.12(1)	0.12(1)	0.13(1)	0.029(9)
O(17)	0.13(1)	0.055(7)	0.34(2)	0.035(7)	0.03(1)	-0.01(1)
O(18)	0.12(1)	0.67(5)	0.31(2)	0.14(2)	-0.10(1)	-0.36(3)
N(1a)	0.063(7)	0.042(6)	0.059(6)	-0.005(5)	0.003(5)	-0.002(5)
N(1b)	0.061(7)	0.054(6)	0.064(7)	0.012(5)	0.028(5)	0.007(5)
N(1c)	0.037(6)	0.060(7)	0.091(8)	-0.002(5)	0.014(6)	-0.002(6)
N(2b)	0.074(7)	0.049(6)	0.058(6)	0.003(5)	0.020(6)	0.005(5)
N(2a)	0.073(7)	0.039(6)	0.046(6)	0.006(5)	-0.008(5)	-0.009(5)
N(2c)	0.060(7)	0.053(6)	0.056(7)	0.002(5)	0.025(5)	-0.004(5)
N(3a)	0.042(5)	0.055(6)	0.044(6)	0.007(5)	0.010(5)	0.003(5)
N(3b)	0.042(6)	0.051(6)	0.060(6)	-0.007(5)	0.008(5)	0.003(5)
N(3c)	0.052(6)	0.038(5)	0.037(5)	-0.005(4)	0.012(4)	0.006(4)
N(4b)	0.052(6)	0.044(6)	0.048(6)	-0.002(5)	0.009(5)	0.010(4)
N(4a)	0.045(6)	0.038(5)	0.046(6)	0.005(4)	0.004(5)	0.003(4)
N(4c)	0.047(5)	0.038(5)	0.042(5)	-0.008(4)	0.008(4)	-0.007(4)
C(1a)	0.027(6)	0.055(7)	0.036(6)	-0.006(5)	0.001(5)	0.001(5)
C(1b)	0.053(7)	0.054(8)	0.035(6)	0.007(6)	0.009(5)	0.014(5)
C(1c)	0.055(8)	0.025(6)	0.070(8)	-0.014(5)	0.014(7)	0.002(6)
C(2b)	0.11(1)	0.051(8)	0.068(9)	0.028(8)	0.029(8)	0.005(7)
C(2a)	0.12(1)	0.024(7)	0.10(1)	-0.024(8)	-0.03(1)	0.004(7)
C(2c)	0.09(1)	0.061(9)	0.10(1)	0.007(8)	0.05(1)	-0.012(8)
C(3a)	0.09(1)	0.053(9)	0.11(1)	-0.028(8)	-0.022(9)	0.021(8)

C(3b)	0.11(1)	0.07(1)	0.11(1)	0.017(9)	0.06(1)	0.010(9)
C(3c)	0.052(8)	0.058(8)	0.15(1)	0.008(7)	0.061(9)	0.006(9)
C(4b)	0.069(9)	0.048(7)	0.082(9)	-0.007(6)	0.014(7)	0.022(7)
C(4a)	0.09(1)	0.058(8)	0.056(8)	0.038(7)	0.006(7)	-0.004(6)
C(4c)	0.10(1)	0.062(8)	0.033(7)	-0.020(7)	0.014(7)	-0.010(6)
C(5a)	0.07(1)	0.08(1)	0.12(1)	-0.006(8)	0.057(9)	0.018(9)
C(5b)	0.10(1)	0.078(9)	0.068(9)	-0.006(8)	0.044(8)	0.017(8)
C(5c)	0.048(8)	0.08(1)	0.11(1)	0.007(7)	0.001(8)	0.033(9)
C(6b)	0.046(7)	0.036(6)	0.057(7)	-0.000(5)	0.009(5)	0.008(5)
C(6a)	0.035(6)	0.056(7)	0.034(6)	-0.001(5)	0.007(5)	0.005(5)
C(6c)	0.042(7)	0.056(7)	0.047(7)	-0.011(6)	0.005(5)	0.021(6)
C(7a)	0.051(7)	0.043(6)	0.034(6)	-0.000(5)	0.008(5)	0.008(5)
C(7b)	0.048(7)	0.046(7)	0.047(7)	0.002(6)	0.000(5)	-0.003(6)
C(7c)	0.054(7)	0.030(6)	0.061(8)	0.005(5)	0.015(6)	0.006(6)
C(8b)	0.064(8)	0.041(7)	0.045(7)	0.000(6)	0.016(6)	0.001(5)
C(8a)	0.052(7)	0.033(6)	0.029(6)	-0.004(5)	0.005(5)	0.003(5)
C(8c)	0.051(7)	0.036(6)	0.039(6)	-0.003(5)	0.014(5)	0.006(5)
C(9a)	0.035(6)	0.044(6)	0.028(5)	0.012(5)	0.004(4)	0.006(5)
C(9b)	0.040(6)	0.034(6)	0.056(7)	-0.002(5)	0.003(5)	0.002(5)
C(9c)	0.041(6)	0.040(6)	0.036(6)	-0.001(5)	0.003(5)	0.009(5)
C(10b)	0.041(6)	0.045(6)	0.047(6)	-0.007(5)	0.008(5)	0.008(5)
C(10a)	0.049(7)	0.043(7)	0.043(6)	-0.004(5)	0.010(5)	0.001(5)
C(10c)	0.046(7)	0.051(7)	0.034(6)	-0.010(5)	0.006(5)	0.005(5)
C(11a)	0.061(8)	0.069(8)	0.035(6)	0.014(6)	0.013(6)	-0.009(6)
C(11b)	0.057(7)	0.055(7)	0.049(7)	-0.009(6)	0.003(6)	0.022(6)
C(11c)	0.049(7)	0.076(9)	0.09(1)	-0.015(7)	-0.009(7)	0.044(8)
C(12b)	0.051(8)	0.073(9)	0.064(8)	-0.001(7)	0.010(6)	-0.006(7)
C(12a)	0.043(7)	0.074(8)	0.050(7)	-0.018(6)	0.007(6)	-0.003(6)
C(12c)	0.064(9)	0.072(9)	0.10(1)	0.009(7)	0.035(8)	0.010(8)
C(13a)	0.069(8)	0.034(7)	0.072(8)	-0.012(6)	0.022(7)	-0.004(6)
C(13b)	0.066(8)	0.043(7)	0.068(8)	-0.002(6)	0.004(7)	0.009(6)
C(13c)	0.078(9)	0.078(9)	0.028(6)	-0.022(7)	0.009(6)	0.003(6)
C(14b)	0.059(8)	0.042(7)	0.081(9)	-0.012(6)	0.006(7)	0.004(6)
C(14a)	0.049(7)	0.050(7)	0.053(7)	0.008(5)	0.017(6)	0.004(6)
C(14c)	0.078(9)	0.047(7)	0.065(8)	-0.002(6)	0.008(7)	0.016(6)
C(15a)	0.039(6)	0.065(8)	0.054(7)	-0.003(6)	0.013(5)	-0.021(6)
C(15b)	0.043(7)	0.062(8)	0.067(8)	0.009(6)	-0.006(6)	0.012(6)
C(15c)	0.10(1)	0.069(9)	0.042(7)	-0.034(8)	0.007(7)	-0.004(6)
C(16b)	0.051(7)	0.057(8)	0.036(6)	0.003(6)	0.003(6)	0.007(5)
C(16a)	0.059(8)	0.051(7)	0.047(7)	0.015(6)	0.017(6)	0.008(6)
C(16c)	0.038(6)	0.040(6)	0.042(7)	-0.001(5)	0.005(5)	-0.004(5)
C(17a)	0.052(7)	0.061(8)	0.076(9)	0.006(6)	0.003(7)	0.012(7)

C(17b)	0.046(7)	0.081(9)	0.053(7)	-0.001(7)	0.004(6)	0.000(7)
C(17c)	0.074(8)	0.035(6)	0.045(7)	-0.006(6)	0.002(6)	0.007(5)
C(18b)	0.058(8)	0.053(8)	0.050(7)	0.006(6)	0.020(6)	0.007(6)
C(18a)	0.052(7)	0.062(8)	0.036(7)	0.007(6)	0.005(6)	0.008(6)
C(18c)	0.050(7)	0.056(8)	0.038(7)	-0.002(6)	0.005(6)	0.010(6)
C(19a)	0.075(9)	0.11(1)	0.038(7)	-0.010(8)	0.008(6)	-0.017(7)
C(19b)	0.061(8)	0.063(8)	0.047(7)	0.002(6)	-0.003(6)	0.013(6)
C(19c)	0.064(8)	0.073(9)	0.055(8)	-0.029(7)	0.005(6)	-0.026(7)
C(20)	0.059(9)	0.09(1)	0.10(1)	0.009(8)	0.031(9)	0.01(1)
C(21)	0.08(1)	0.08(1)	0.08(1)	0.032(9)	0.017(9)	0.010(9)
C(22)	0.12(1)	0.08(1)	0.06(1)	-0.03(1)	-0.01(1)	0.005(9)
C(23)	0.09(1)	0.055(9)	0.10(1)	0.010(8)	0.005(9)	0.003(9)
C(24)	0.11(2)	0.20(2)	0.13(2)	-0.07(2)	0.04(1)	-0.12(2)
C(25)	0.07(1)	0.09(1)	0.14(2)	-0.04(1)	-0.00(1)	0.04(1)

Table S12. Bond Lengths(Å) for **5d**

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Ir(1a)	N(3a)	2.08(1)	Ir(1a)	N(4a)	2.04(1)
Ir(1a)	C(1a)	2.06(1)	Ir(1a)	C(6a)	2.13(1)
Ir(1a)	C(7a)	2.23(1)	Ir(1a)	C(8a)	2.21(1)
Ir(1a)	C(9a)	2.18(1)	Ir(1a)	C(10a)	2.18(1)
Ir(1c)	N(3c)	2.05(1)	Ir(1c)	N(4c)	2.07(1)
Ir(1c)	C(1c)	2.07(1)	Ir(1c)	C(6c)	2.16(1)
Ir(1c)	C(7c)	2.20(1)	Ir(1c)	C(8c)	2.21(1)
Ir(1c)	C(9c)	2.17(1)	Ir(1c)	C(10c)	2.16(1)
Ir(1b)	N(3b)	2.09(1)	Ir(1b)	N(4b)	2.08(1)
Ir(1b)	C(1b)	2.06(1)	Ir(1b)	C(6b)	2.14(1)
Ir(1b)	C(7b)	2.21(1)	Ir(1b)	C(8b)	2.24(1)
Ir(1b)	C(9b)	2.18(1)	Ir(1b)	C(10b)	2.19(1)
S(1)	O(1)	1.425(9)	S(1)	O(2)	1.436(8)
S(1)	O(3)	1.441(9)	S(1)	C(20)	1.80(2)
S(2)	O(4)	1.414(9)	S(2)	O(5)	1.402(9)
S(2)	O(6)	1.429(9)	S(2)	C(21)	1.80(1)
S(3)	O(7)	1.38(1)	S(3)	O(8)	1.38(1)
S(3)	O(9)	1.36(1)	S(3)	C(22)	1.81(2)
S(4)	O(10)	1.41(1)	S(4)	O(11)	1.400(9)
S(4)	O(12)	1.41(1)	S(4)	C(23)	1.80(2)
S(5)	O(13)	1.65(1)	S(5)	O(14)	1.38(1)
S(5)	O(15)	1.35(1)	S(5)	C(24)	1.70(2)
S(6)	O(16)	1.42(2)	S(6)	O(17)	1.38(1)
S(6)	O(18)	1.31(2)	S(6)	C(25)	1.72(2)
F(1)	C(20)	1.33(2)	F(2)	C(20)	1.30(2)

F(3)	C(20)	1.35(2)	F(4)	C(21)	1.28(2)
F(5)	C(21)	1.32(2)	F(6)	C(21)	1.30(2)
F(7)	C(22)	1.31(2)	F(8)	C(22)	1.25(2)
F(9)	C(22)	1.26(2)	F(10)	C(23)	1.41(2)
F(11)	C(23)	1.25(2)	F(12)	C(23)	1.34(2)
F(13)	C(24)	1.29(2)	F(14)	C(24)	1.46(3)
F(15)	C(24)	1.33(2)	F(16)	C(25)	1.26(2)
F(17)	C(25)	1.27(2)	F(18)	C(25)	1.32(2)
N(1a)	C(1a)	1.36(1)	N(1a)	C(3a)	1.48(2)
N(1a)	C(5a)	1.41(2)	N(1b)	C(1b)	1.33(1)
N(1b)	C(3b)	1.45(2)	N(1b)	C(5b)	1.45(2)
N(1c)	C(1c)	1.32(1)	N(1c)	C(3c)	1.45(2)
N(1c)	C(5c)	1.43(2)	N(2b)	C(1b)	1.33(1)
N(2b)	C(2b)	1.50(2)	N(2b)	C(4b)	1.47(2)
N(2a)	C(1a)	1.34(1)	N(2a)	C(2a)	1.48(2)
N(2a)	C(4a)	1.42(2)	N(2c)	C(1c)	1.35(1)
N(2c)	C(2c)	1.43(2)	N(2c)	C(4c)	1.45(2)
N(3a)	C(18a)	1.14(1)	N(3b)	C(18b)	1.15(1)
N(3c)	C(18c)	1.13(1)	N(4b)	C(16b)	1.11(1)
N(4a)	C(16a)	1.11(1)	N(4c)	C(16c)	1.12(1)
C(2b)	C(3b)	1.49(2)	C(2b)	H(38)	0.9
C(2b)	H(39)	0.9	C(2a)	C(3a)	1.52(2)
C(2a)	H(7)	0.9	C(2a)	H(8)	1.0
C(2c)	C(3c)	1.53(2)	C(2c)	H(69)	1.0
C(2c)	H(70)	1.0	C(3a)	H(9)	1.0
C(3a)	H(10)	1.1	C(3b)	H(40)	1.0
C(3b)	H(41)	1.0	C(3c)	H(71)	1.0
C(3c)	H(72)	1.0	C(4b)	H(32)	1.0
C(4b)	H(33)	0.9	C(4b)	H(34)	1.0
C(4a)	H(1)	1.0	C(4a)	H(2)	1.1
C(4a)	H(3)	1.0	C(4c)	H(63)	1.0
C(4c)	H(64)	1.0	C(4c)	H(65)	1.0
C(5a)	H(4)	1.0	C(5a)	H(5)	1.0
C(5a)	H(6)	1.1	C(5b)	H(35)	0.9
C(5b)	H(36)	0.9	C(5b)	H(37)	0.9
C(5c)	H(66)	1.0	C(5c)	H(67)	1.0
C(5c)	H(68)	1.0	C(6b)	C(7b)	1.46(2)
C(6b)	C(10b)	1.44(1)	C(6b)	C(11b)	1.49(1)
C(6a)	C(7a)	1.44(1)	C(6a)	C(10a)	1.44(1)
C(6a)	C(11a)	1.50(1)	C(6c)	C(7c)	1.41(2)
C(6c)	C(10c)	1.43(2)	C(6c)	C(11c)	1.50(2)
C(7a)	C(8a)	1.40(1)	C(7a)	C(12a)	1.48(1)

C(7b)	C(8b)	1.43(2)	C(7b)	C(12b)	1.47(2)
C(7c)	C(8c)	1.42(2)	C(7c)	C(12c)	1.49(2)
C(8b)	C(9b)	1.44(2)	C(8b)	C(13b)	1.46(2)
C(8a)	C(9a)	1.45(1)	C(8a)	C(13a)	1.50(1)
C(8c)	C(9c)	1.43(1)	C(8c)	C(13c)	1.48(2)
C(9a)	C(10a)	1.45(1)	C(9a)	C(14a)	1.50(1)
C(9b)	C(10b)	1.44(1)	C(9b)	C(14b)	1.50(2)
C(9c)	C(10c)	1.45(1)	C(9c)	C(14c)	1.50(2)
C(10b)	C(15b)	1.49(2)	C(10a)	C(15a)	1.49(2)
C(10c)	C(15c)	1.49(2)	C(11a)	H(11)	1.0
C(11a)	H(12)	0.9	C(11a)	H(13)	1.0
C(11b)	H(42)	0.9	C(11b)	H(43)	1.0
C(11b)	H(44)	1.0	C(11c)	H(76)	1.0
C(11c)	H(77)	1.0	C(11c)	H(78)	0.9
C(12b)	H(45)	1.0	C(12b)	H(46)	0.9
C(12b)	H(47)	1.0	C(12a)	H(14)	1.0
C(12a)	H(15)	1.0	C(12a)	H(16)	1.0
C(12c)	H(79)	0.9	C(12c)	H(80)	0.9
C(12c)	H(81)	1.0	C(13a)	H(17)	0.9
C(13a)	H(18)	1.0	C(13a)	H(19)	0.9
C(13b)	H(48)	1.0	C(13b)	H(49)	0.9
C(13b)	H(50)	1.0	C(13c)	H(82)	0.9
C(13c)	H(83)	1.0	C(13c)	H(84)	1.0
C(14b)	H(51)	1.0	C(14b)	H(52)	0.9
C(14b)	H(53)	1.0	C(14a)	H(20)	1.0
C(14a)	H(21)	0.9	C(14a)	H(22)	1.0
C(14c)	H(85)	0.9	C(14c)	H(86)	1.0
C(14c)	H(87)	1.0	C(15a)	H(23)	1.0
C(15a)	H(24)	1.0	C(15a)	H(25)	0.9
C(15b)	H(54)	1.0	C(15b)	H(55)	1.0
C(15b)	H(56)	0.9	C(15c)	H(73)	1.0
C(15c)	H(74)	1.0	C(15c)	H(75)	1.0
C(16b)	C(17b)	1.45(2)	C(16a)	C(17a)	1.47(2)
C(16c)	C(17c)	1.46(2)	C(17a)	H(26)	1.0
C(17a)	H(27)	1.0	C(17a)	H(28)	0.9
C(17b)	H(57)	0.9	C(17b)	H(58)	1.0
C(17b)	H(59)	1.0	C(17c)	H(88)	1.0
C(17c)	H(89)	0.9	C(17c)	H(90)	1.0
C(18b)	C(19b)	1.43(2)	C(18a)	C(19a)	1.44(2)
C(18c)	C(19c)	1.47(2)	C(19a)	H(29)	1.0
C(19a)	H(30)	0.9	C(19a)	H(31)	0.9
C(19b)	H(60)	1.0	C(19b)	H(61)	0.9

C(19b)	H(62)	1.0		C(19c)	H(91)	1.0
C(19c)	H(92)	1.0		C(19c)	H(93)	0.9

Table S13. Bond Angles(^o) for **5d**

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
N(3a)	Ir(1a)	N(4a)	82.3(4)	N(3a)	Ir(1a)	C(1a)	94.2(4)
N(3a)	Ir(1a)	C(6a)	157.3(4)	N(3a)	Ir(1a)	C(7a)	124.6(4)
N(3a)	Ir(1a)	C(8a)	93.8(4)	N(3a)	Ir(1a)	C(9a)	94.7(4)
N(3a)	Ir(1a)	C(10a)	128.2(4)	N(4a)	Ir(1a)	C(1a)	87.5(4)
N(4a)	Ir(1a)	C(6a)	110.3(4)	N(4a)	Ir(1a)	C(7a)	95.1(4)
N(4a)	Ir(1a)	C(8a)	112.9(4)	N(4a)	Ir(1a)	C(9a)	151.2(4)
N(4a)	Ir(1a)	C(10a)	148.8(4)	C(1a)	Ir(1a)	C(6a)	104.8(4)
C(1a)	Ir(1a)	C(7a)	141.1(4)	C(1a)	Ir(1a)	C(8a)	159.0(4)
C(1a)	Ir(1a)	C(9a)	121.4(4)	C(1a)	Ir(1a)	C(10a)	95.6(4)
C(6a)	Ir(1a)	C(7a)	38.4(4)	C(6a)	Ir(1a)	C(8a)	64.2(4)
C(6a)	Ir(1a)	C(9a)	65.0(4)	C(7a)	Ir(1a)	C(9a)	63.0(4)
C(7a)	Ir(1a)	C(8a)	36.8(4)	C(8a)	Ir(1a)	C(9a)	38.4(4)
C(7a)	Ir(1a)	C(10a)	63.6(4)	C(9a)	Ir(1a)	C(10a)	38.8(4)
N(3c)	Ir(1c)	N(4c)	83.0(3)	N(3c)	Ir(1c)	C(1c)	90.6(4)
N(3c)	Ir(1c)	C(6c)	143.6(4)	N(3c)	Ir(1c)	C(7c)	106.8(4)
N(3c)	Ir(1c)	C(8c)	93.7(4)	N(3c)	Ir(1c)	C(9c)	114.4(4)
N(3c)	Ir(1c)	C(10c)	153.5(4)	N(4c)	Ir(1c)	C(1c)	89.7(4)
N(4c)	Ir(1c)	C(6c)	95.0(4)	N(4c)	Ir(1c)	C(7c)	101.2(4)
N(4c)	Ir(1c)	C(8c)	135.5(4)	N(4c)	Ir(1c)	C(9c)	159.4(4)
N(4c)	Ir(1c)	C(10c)	122.6(4)	C(1c)	Ir(1c)	C(6c)	125.8(5)
C(1c)	Ir(1c)	C(7c)	160.3(4)	C(1c)	Ir(1c)	C(8c)	134.8(4)
C(1c)	Ir(1c)	C(9c)	100.6(4)	C(1c)	Ir(1c)	C(10c)	95.9(4)
C(6c)	Ir(1c)	C(7c)	37.7(4)	C(6c)	Ir(1c)	C(8c)	62.6(4)
C(6c)	Ir(1c)	C(9c)	64.4(4)	C(6c)	Ir(1c)	C(10c)	38.7(4)
C(7c)	Ir(1c)	C(8c)	37.4(4)	C(7c)	Ir(1c)	C(9c)	64.2(4)
C(7c)	Ir(1c)	C(10c)	64.5(4)	C(8c)	Ir(1c)	C(9c)	38.0(4)
C(8c)	Ir(1c)	C(10c)	63.8(4)	C(9c)	Ir(1c)	C(10c)	39.1(4)
N(3b)	Ir(1b)	N(4b)	82.1(4)	N(3b)	Ir(1b)	C(1b)	92.6(4)
N(3b)	Ir(1b)	C(6b)	158.8(4)	N(3b)	Ir(1b)	C(7b)	122.0(4)
N(3b)	Ir(1b)	C(8b)	94.2(4)	N(3b)	Ir(1b)	C(9b)	99.6(4)
N(3b)	Ir(1b)	C(10b)	134.2(4)	N(4b)	Ir(1b)	C(1b)	87.9(4)
N(4b)	Ir(1b)	C(6b)	105.9(4)	N(4b)	Ir(1b)	C(7b)	94.5(4)
N(4b)	Ir(1b)	C(8b)	117.6(4)	N(4b)	Ir(1b)	C(9b)	155.4(4)
N(4b)	Ir(1b)	C(10b)	143.4(4)	C(1b)	Ir(1b)	C(6b)	107.1(4)
C(1b)	Ir(1b)	C(7b)	145.4(4)	C(1b)	Ir(1b)	C(8b)	154.3(5)

C(1b)	Ir(1b)	C(9b)	116.4(5)	C(1b)	Ir(1b)	C(10b)	94.0(4)
C(6b)	Ir(1b)	C(7b)	39.3(4)	C(6b)	Ir(1b)	C(8b)	64.6(4)
C(6b)	Ir(1b)	C(9b)	64.9(4)	C(6b)	Ir(1b)	C(10b)	38.9(4)
C(7b)	Ir(1b)	C(8b)	37.4(4)	C(7b)	Ir(1b)	C(9b)	63.6(4)
C(7b)	Ir(1b)	C(10b)	64.3(4)	C(8b)	Ir(1b)	C(9b)	38.0(4)
C(8b)	Ir(1b)	C(10b)	63.9(4)	C(9b)	Ir(1b)	C(10b)	38.3(4)
O(1)	S(1)	O(2)	115.4(6)	O(1)	S(1)	O(3)	114.2(6)
O(1)	S(1)	C(20)	103.7(7)	O(2)	S(1)	O(3)	114.9(5)
O(2)	S(1)	C(20)	102.9(7)	O(3)	S(1)	C(20)	103.4(7)
O(4)	S(2)	O(5)	114.5(6)	O(4)	S(2)	O(6)	114.9(7)
O(4)	S(2)	C(21)	102.7(8)	O(5)	S(2)	O(6)	113.9(7)
O(5)	S(2)	C(21)	104.8(7)	O(6)	S(2)	C(21)	103.9(7)
O(7)	S(3)	O(8)	113(1)	O(7)	S(3)	O(9)	113(1)
O(7)	S(3)	C(22)	105(1)	O(8)	S(3)	O(9)	118(1)
O(8)	S(3)	C(22)	101.5(8)	O(9)	S(3)	C(22)	104.1(9)
O(10)	S(4)	O(11)	118.8(8)	O(10)	S(4)	O(12)	111.3(8)
O(10)	S(4)	C(23)	105.6(7)	O(11)	S(4)	O(12)	113.8(9)
O(11)	S(4)	C(23)	105.0(7)	O(12)	S(4)	C(23)	100.0(9)
O(13)	S(5)	O(14)	110.2(9)	O(13)	S(5)	O(15)	114(1)
O(13)	S(5)	C(24)	90(1)	O(14)	S(5)	O(15)	120.1(8)
O(14)	S(5)	C(24)	108.2(9)	O(15)	S(5)	C(24)	111(1)
O(16)	S(6)	O(17)	107(1)	O(16)	S(6)	O(18)	113(2)
O(16)	S(6)	C(25)	101.7(9)	O(17)	S(6)	O(18)	121(1)
O(17)	S(6)	C(25)	111(1)	O(18)	S(6)	C(25)	100(1)
C(1a)	N(1a)	C(3a)	113(1)	C(1a)	N(1a)	C(5a)	128(1)
C(3a)	N(1a)	C(5a)	119(1)	C(1b)	N(1b)	C(3b)	112(1)
C(1b)	N(1b)	C(5b)	128(1)	C(3b)	N(1b)	C(5b)	120(1)
C(1c)	N(1c)	C(3c)	112(1)	C(1c)	N(1c)	C(5c)	127(1)
C(3c)	N(1c)	C(5c)	120(1)	C(1b)	N(2b)	C(2b)	111(1)
C(1b)	N(2b)	C(4b)	131(1)	C(2b)	N(2b)	C(4b)	118(1)
C(1a)	N(2a)	C(2a)	111(1)	C(1a)	N(2a)	C(4a)	129(1)
C(2a)	N(2a)	C(4a)	120(1)	C(1c)	N(2c)	C(2c)	112(1)
C(1c)	N(2c)	C(4c)	129(1)	C(2c)	N(2c)	C(4c)	119(1)
Ir(1a)	N(3a)	C(18a)	163(1)	Ir(1b)	N(3b)	C(18b)	170(1)
Ir(1c)	N(3c)	C(18c)	174(1)	Ir(1b)	N(4b)	C(16b)	174(1)
Ir(1a)	N(4a)	C(16a)	174(1)	Ir(1c)	N(4c)	C(16c)	177(1)
Ir(1a)	C(1a)	N(1a)	125.0(9)	Ir(1a)	C(1a)	N(2a)	125.6(8)
N(1a)	C(1a)	N(2a)	109(1)	Ir(1b)	C(1b)	N(1b)	125.6(9)
Ir(1b)	C(1b)	N(2b)	124.8(9)	N(1b)	C(1b)	N(2b)	110(1)
Ir(1c)	C(1c)	N(1c)	126(1)	Ir(1c)	C(1c)	N(2c)	124(1)
N(1c)	C(1c)	N(2c)	109(1)	N(2b)	C(2b)	C(3b)	102(1)
N(2b)	C(2b)	H(38)	116	N(2b)	C(2b)	H(39)	116

C(3b)	C(2b)	H(38)	102	C(3b)	C(2b)	H(39)	99
H(38)	C(2b)	H(39)	115	N(2a)	C(2a)	C(3a)	105(1)
N(2a)	C(2a)	H(7)	117	N(2a)	C(2a)	H(8)	110
C(3a)	C(2a)	H(7)	111	C(3a)	C(2a)	H(8)	109
H(7)	C(2a)	H(8)	102	N(2c)	C(2c)	C(3c)	103(1)
N(2c)	C(2c)	H(69)	115	N(2c)	C(2c)	H(70)	114
C(3c)	C(2c)	H(69)	113	C(3c)	C(2c)	H(70)	111
H(69)	C(2c)	H(70)	99	N(1a)	C(3a)	C(2a)	101(1)
N(1a)	C(3a)	H(9)	113	N(1a)	C(3a)	H(10)	108
C(2a)	C(3a)	H(9)	118	C(2a)	C(3a)	H(10)	115
H(9)	C(3a)	H(10)	99	N(1b)	C(3b)	C(2b)	105(1)
N(1b)	C(3b)	H(40)	107	N(1b)	C(3b)	H(41)	110
C(2b)	C(3b)	H(40)	115	C(2b)	C(3b)	H(41)	118
H(40)	C(3b)	H(41)	99	N(1c)	C(3c)	C(2c)	103(1)
N(1c)	C(3c)	H(71)	114	N(1c)	C(3c)	H(72)	117
C(2c)	C(3c)	H(71)	108	C(2c)	C(3c)	H(72)	111
H(71)	C(3c)	H(72)	102	N(2b)	C(4b)	H(32)	107
N(2b)	C(4b)	H(33)	114	N(2b)	C(4b)	H(34)	110
H(32)	C(4b)	H(33)	108	H(32)	C(4b)	H(34)	101
H(33)	C(4b)	H(34)	112	N(2a)	C(4a)	H(1)	117
N(2a)	C(4a)	H(2)	112	N(2a)	C(4a)	H(3)	119
H(1)	C(4a)	H(2)	98	H(1)	C(4a)	H(3)	106
H(2)	C(4a)	H(3)	98	N(2c)	C(4c)	H(63)	112
N(2c)	C(4c)	H(64)	113	N(2c)	C(4c)	H(65)	110
H(63)	C(4c)	H(64)	106	H(63)	C(4c)	H(65)	105
H(64)	C(4c)	H(65)	107	N(1a)	C(5a)	H(4)	117
N(1a)	C(5a)	H(5)	120	N(1a)	C(5a)	H(6)	113
H(4)	C(5a)	H(5)	104	H(4)	C(5a)	H(6)	100
H(5)	C(5a)	H(6)	98	N(1b)	C(5b)	H(35)	108
N(1b)	C(5b)	H(36)	109	N(1b)	C(5b)	H(37)	108
H(35)	C(5b)	H(36)	110	H(35)	C(5b)	H(37)	110
H(36)	C(5b)	H(37)	109	N(1c)	C(5c)	H(66)	111
N(1c)	C(5c)	H(67)	116	N(1c)	C(5c)	H(68)	113
H(66)	C(5c)	H(67)	104	H(66)	C(5c)	H(68)	103
H(67)	C(5c)	H(68)	106	Ir(1b)	C(6b)	C(7b)	72.9(7)
Ir(1b)	C(6b)	C(10b)	72.5(7)	Ir(1b)	C(6b)	C(11b)	132.6(9)
C(7b)	C(6b)	C(10b)	107(1)	C(7b)	C(6b)	C(11b)	124(1)
C(10b)	C(6b)	C(11b)	126(1)	Ir(1a)	C(6a)	C(7a)	74.5(6)
Ir(1a)	C(6a)	C(10a)	72.4(6)	Ir(1a)	C(6a)	C(11a)	132.7(8)
C(7a)	C(6a)	C(10a)	108(1)	C(7a)	C(6a)	C(11a)	126(1)
C(10a)	C(6a)	C(11a)	124(1)	Ir(1c)	C(6c)	C(7c)	72.8(7)
Ir(1c)	C(6c)	C(10c)	70.7(6)	Ir(1c)	C(6c)	C(11c)	125.8(8)

C(7c)	C(6c)	C(10c)	110(1)	C(7c)	C(6c)	C(11c)	127(1)
C(10c)	C(6c)	C(11c)	123(1)	Ir(1a)	C(7a)	C(6a)	67.1(6)
Ir(1a)	C(7a)	C(8a)	70.8(6)	Ir(1a)	C(7a)	C(12a)	125.0(8)
C(6a)	C(7a)	C(8a)	109(1)	C(6a)	C(7a)	C(12a)	125(1)
C(8a)	C(7a)	C(12a)	126(1)	Ir(1b)	C(7b)	C(6b)	67.8(6)
Ir(1b)	C(7b)	C(8b)	72.5(7)	Ir(1b)	C(7b)	C(12b)	126.0(8)
C(6b)	C(7b)	C(8b)	108(1)	C(6b)	C(7b)	C(12b)	125(1)
C(8b)	C(7b)	C(12b)	127(1)	Ir(1c)	C(7c)	C(6c)	69.5(7)
Ir(1c)	C(7c)	C(8c)	71.8(6)	Ir(1c)	C(7c)	C(12c)	127.1(8)
C(6c)	C(7c)	C(8c)	107(1)	C(6c)	C(7c)	C(12c)	126(1)
C(8c)	C(7c)	C(12c)	127(1)	Ir(1b)	C(8b)	C(7b)	70.1(7)
Ir(1b)	C(8b)	C(9b)	68.6(6)	Ir(1b)	C(8b)	C(13b)	128.5(9)
C(7b)	C(8b)	C(9b)	107(1)	C(7b)	C(8b)	C(13b)	127(1)
C(9b)	C(8b)	C(13b)	126(1)	Ir(1a)	C(8a)	C(7a)	72.4(6)
Ir(1a)	C(8a)	C(9a)	69.6(6)	Ir(1a)	C(8a)	C(13a)	126.3(8)
C(7a)	C(8a)	C(9a)	108(1)	C(7a)	C(8a)	C(13a)	127(1)
C(9a)	C(8a)	C(13a)	125(1)	Ir(1c)	C(8c)	C(7c)	70.8(6)
Ir(1c)	C(8c)	C(9c)	69.3(6)	Ir(1c)	C(8c)	C(13c)	125.9(8)
C(7c)	C(8c)	C(9c)	110(1)	C(7c)	C(8c)	C(13c)	125(1)
C(9c)	C(8c)	C(13c)	125(1)	Ir(1a)	C(9a)	C(8a)	71.9(6)
Ir(1a)	C(9a)	C(10a)	70.7(6)	Ir(1a)	C(9a)	C(14a)	127.9(7)
C(8a)	C(9a)	C(10a)	107.8(9)	C(8a)	C(9a)	C(14a)	125(1)
C(10a)	C(9a)	C(14a)	127(1)	Ir(1b)	C(9b)	C(8b)	73.4(7)
Ir(1b)	C(9b)	C(10b)	71.4(6)	Ir(1b)	C(9b)	C(14b)	129.1(9)
C(8b)	C(9b)	C(10b)	109(1)	C(8b)	C(9b)	C(14b)	124(1)
C(10b)	C(9b)	C(14b)	126(1)	Ir(1c)	C(9c)	C(8c)	72.7(6)
Ir(1c)	C(9c)	C(10c)	70.1(6)	Ir(1c)	C(9c)	C(14c)	130.6(8)
C(8c)	C(9c)	C(10c)	107(1)	C(8c)	C(9c)	C(14c)	127(1)
C(10c)	C(9c)	C(14c)	125(1)	Ir(1b)	C(10b)	C(6b)	68.7(7)
Ir(1b)	C(10b)	C(9b)	70.3(6)	Ir(1b)	C(10b)	C(15b)	127.5(9)
C(6b)	C(10b)	C(9b)	107(1)	C(6b)	C(10b)	C(15b)	125(1)
C(9b)	C(10b)	C(15b)	128(1)	Ir(1a)	C(10a)	C(6a)	68.7(6)
Ir(1a)	C(10a)	C(9a)	70.6(6)	Ir(1a)	C(10a)	C(15a)	126.3(8)
C(6a)	C(10a)	C(9a)	107(1)	C(6a)	C(10a)	C(15a)	128(1)
C(9a)	C(10a)	C(15a)	125(1)	Ir(1c)	C(10c)	C(6c)	70.6(6)
Ir(1c)	C(10c)	C(9c)	70.9(6)	Ir(1c)	C(10c)	C(15c)	128.6(8)
C(6c)	C(10c)	C(9c)	107(1)	C(6c)	C(10c)	C(15c)	128(1)
C(9c)	C(10c)	C(15c)	125(1)	C(6a)	C(11a)	H(11)	109
C(6a)	C(11a)	H(12)	112	C(6a)	C(11a)	H(13)	111
H(11)	C(11a)	H(12)	107	H(11)	C(11a)	H(13)	104
H(12)	C(11a)	H(13)	110	C(6b)	C(11b)	H(42)	117
C(6b)	C(11b)	H(43)	111	C(6b)	C(11b)	H(44)	114

H(42)	C(11b)	H(43)	103	H(42)	C(11b)	H(44)	108
H(43)	C(11b)	H(44)	100	C(6c)	C(11c)	H(76)	114
C(6c)	C(11c)	H(77)	109	C(6c)	C(11c)	H(78)	114
H(76)	C(11c)	H(77)	103	H(76)	C(11c)	H(78)	108
H(77)	C(11c)	H(78)	104	C(7b)	C(12b)	H(45)	112
C(7b)	C(12b)	H(46)	115	C(7b)	C(12b)	H(47)	110
H(45)	C(12b)	H(46)	108	H(45)	C(12b)	H(47)	101
H(46)	C(12b)	H(47)	107	C(7a)	C(12a)	H(14)	112
C(7a)	C(12a)	H(15)	110	C(7a)	C(12a)	H(16)	112
H(14)	C(12a)	H(15)	106	H(14)	C(12a)	H(16)	107
H(15)	C(12a)	H(16)	107	C(7c)	C(12c)	H(79)	109
C(7c)	C(12c)	H(80)	110	C(7c)	C(12c)	H(81)	107
H(79)	C(12c)	H(80)	113	H(79)	C(12c)	H(81)	108
H(80)	C(12c)	H(81)	108	C(8a)	C(13a)	H(17)	110
C(8a)	C(13a)	H(18)	109	C(8a)	C(13a)	H(19)	111
H(17)	C(13a)	H(18)	107	H(17)	C(13a)	H(19)	110
H(18)	C(13a)	H(19)	107	C(8b)	C(13b)	H(48)	115
C(8b)	C(13b)	H(49)	115	C(8b)	C(13b)	H(50)	111
H(48)	C(13b)	H(49)	108	H(48)	C(13b)	H(50)	101
H(49)	C(13b)	H(50)	103	C(8c)	C(13c)	H(82)	112
C(8c)	C(13c)	H(83)	109	C(8c)	C(13c)	H(84)	110
H(82)	C(13c)	H(83)	108	H(82)	C(13c)	H(84)	109
H(83)	C(13c)	H(84)	106	C(9b)	C(14b)	H(51)	109
C(9b)	C(14b)	H(52)	111	C(9b)	C(14b)	H(53)	110
H(51)	C(14b)	H(52)	108	H(51)	C(14b)	H(53)	106
H(52)	C(14b)	H(53)	109	C(9a)	C(14a)	H(20)	110
C(9a)	C(14a)	H(21)	110	C(9a)	C(14a)	H(22)	108
H(20)	C(14a)	H(21)	111	H(20)	C(14a)	H(22)	106
H(21)	C(14a)	H(22)	109	C(9c)	C(14c)	H(85)	110
C(9c)	C(14c)	H(86)	109	C(9c)	C(14c)	H(87)	111
H(85)	C(14c)	H(86)	108	H(85)	C(14c)	H(87)	109
H(86)	C(14c)	H(87)	107	C(10a)	C(15a)	H(23)	109
C(10a)	C(15a)	H(24)	109	C(10a)	C(15a)	H(25)	115
H(23)	C(15a)	H(24)	101	H(23)	C(15a)	H(25)	108
H(24)	C(15a)	H(25)	112	C(10b)	C(15b)	H(54)	112
C(10b)	C(15b)	H(55)	110	C(10b)	C(15b)	H(56)	112
H(54)	C(15b)	H(55)	105	H(54)	C(15b)	H(56)	109
H(55)	C(15b)	H(56)	105	C(10c)	C(15c)	H(73)	114
C(10c)	C(15c)	H(74)	112	C(10c)	C(15c)	H(75)	114
H(73)	C(15c)	H(74)	104	H(73)	C(15c)	H(75)	105
H(74)	C(15c)	H(75)	104	N(4b)	C(16b)	C(17b)	178(1)
N(4a)	C(16a)	C(17a)	177(1)	N(4c)	C(16c)	C(17c)	179(1)

C(16a)	C(17a)	H(26)	112	C(16a)	C(17a)	H(27)	114
C(16a)	C(17a)	H(28)	114	H(26)	C(17a)	H(27)	102
H(26)	C(17a)	H(28)	105	H(27)	C(17a)	H(28)	106
C(16b)	C(17b)	H(57)	113	C(16b)	C(17b)	H(58)	112
C(16b)	C(17b)	H(59)	109	H(57)	C(17b)	H(58)	110
H(57)	C(17b)	H(59)	107	H(58)	C(17b)	H(59)	104
C(16c)	C(17c)	H(88)	109	C(16c)	C(17c)	H(89)	113
C(16c)	C(17c)	H(90)	112	H(88)	C(17c)	H(89)	105
H(88)	C(17c)	H(90)	104	H(89)	C(17c)	H(90)	110
N(3b)	C(18b)	C(19b)	178(1)	N(3a)	C(18a)	C(19a)	176(1)
N(3c)	C(18c)	C(19c)	179(1)	C(18a)	C(19a)	H(29)	107
C(18a)	C(19a)	H(30)	108	C(18a)	C(19a)	H(31)	109
H(29)	C(19a)	H(30)	108	H(29)	C(19a)	H(31)	109
H(30)	C(19a)	H(31)	112	C(18b)	C(19b)	H(60)	113
C(18b)	C(19b)	H(61)	116	C(18b)	C(19b)	H(62)	109
H(60)	C(19b)	H(61)	110	H(60)	C(19b)	H(62)	101
H(61)	C(19b)	H(62)	103	C(18c)	C(19c)	H(91)	109
C(18c)	C(19c)	H(92)	108	C(18c)	C(19c)	H(93)	113
H(91)	C(19c)	H(92)	104	H(91)	C(19c)	H(93)	110
H(92)	C(19c)	H(93)	110	S(1)	C(20)	F(1)	111(1)
S(1)	C(20)	F(2)	113(1)	S(1)	C(20)	F(3)	111(1)
F(1)	C(20)	F(2)	108(2)	F(1)	C(20)	F(3)	106(1)
F(2)	C(20)	F(3)	108(1)	S(2)	C(21)	F(4)	114(1)
S(2)	C(21)	F(5)	111(1)	S(2)	C(21)	F(6)	112(1)
F(4)	C(21)	F(5)	105(2)	F(4)	C(21)	F(6)	109(2)
F(5)	C(21)	F(6)	104(1)	S(3)	C(22)	F(7)	112(2)
S(3)	C(22)	F(8)	113(1)	S(3)	C(22)	F(9)	113(1)
F(7)	C(22)	F(8)	111(2)	F(7)	C(22)	F(9)	102(2)
F(8)	C(22)	F(9)	107(2)	S(4)	C(23)	F(10)	108(1)
S(4)	C(23)	F(11)	116(1)	S(4)	C(23)	F(12)	113(1)
F(10)	C(23)	F(11)	105(2)	F(10)	C(23)	F(12)	102(1)
F(11)	C(23)	F(12)	111(1)	S(5)	C(24)	F(13)	116(2)
S(5)	C(24)	F(14)	101(1)	S(5)	C(24)	F(15)	115(2)
F(13)	C(24)	F(14)	111(2)	F(13)	C(24)	F(15)	106(2)
F(14)	C(24)	F(15)	107(2)	S(6)	C(25)	F(16)	113(2)
S(6)	C(25)	F(17)	116(2)	S(6)	C(25)	F(18)	116(1)
F(16)	C(25)	F(17)	104(2)	F(16)	C(25)	F(18)	104(2)
F(17)	C(25)	F(18)	103(2)				

Table S14. Atomic coordinates and $B_{\text{iso}}/B_{\text{eq}}$ and occupancy for **6**

atom	x	y	z	B_{eq}	occ
------	---	---	---	-----------------	-----

Ir(1)	0.08471(4)	0.2500	0.01592(2)	2.213(7)	1/2
N(1)	0.3990(5)	0.1795(3)	0.1056(3)	2.18(9)	
C(1)	0.3059(9)	0.2500	0.0767(5)	1.8(1)	1/2
C(2)	0.5446(6)	0.2058(4)	0.1491(4)	2.2(1)	
C(3)	0.3563(8)	0.0866(4)	0.0889(5)	3.0(1)	
C(4)	0.6673(8)	0.1425(5)	0.1889(5)	3.5(1)	
C(5)	-0.0991(6)	0.2973(4)	-0.0882(4)	2.4(1)	
C(6)	0.0616(8)	0.3286(4)	-0.1175(4)	3.2(1)	
C(7)	0.164(1)	0.2500	-0.1330(5)	2.9(2)	1/2
C(8)	-0.2445(8)	0.3566(5)	-0.0709(5)	3.9(1)	
C(9)	0.107(1)	0.4234(6)	-0.1386(6)	5.6(2)	
C(10)	0.337(1)	0.25000(1)	-0.1693(7)	6.9(4)	1/2
H(1)	0.2916	0.0657	0.1393	3.604	
H(2)	0.4547	0.0520	0.0841	3.603	
H(3)	0.2940	0.0815	0.0336	3.597	
H(4)	0.6394	0.1312	0.2515	4.264	
H(5)	0.7758	0.1671	0.1857	4.268	
H(6)	0.6638	0.0883	0.1551	4.261	
H(7)	-0.3382	0.3206	-0.0569	4.656	
H(8)	-0.2669	0.3910	-0.1244	4.654	
H(9)	-0.2220	0.3952	-0.0205	4.647	
H(10)	0.0123	0.4594	-0.1274	6.758	
H(11)	0.1402	0.4296	-0.2012	6.757	
H(12)	0.1953	0.4417	-0.0995	6.760	
H(13)	0.3734	0.3097	-0.1770	8.242	
H(14)	0.3394	0.2202	-0.2271	8.242	
H(15)	0.4074	0.2202	-0.1270	8.243	

Table S15. Anisotropic Displacement Parameters for **6**

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Ir(1)	0.0225(2)	0.0399(2)	0.0217(2)	0.0000	-0.0018(1)	0.0000
N(1)	0.028(2)	0.024(2)	0.030(2)	0.003(2)	-0.003(2)	0.001(2)
C(1)	0.029(3)	0.017(3)	0.023(3)	0.0000	0.003(3)	0.0000
C(2)	0.026(2)	0.035(3)	0.024(3)	0.001(2)	0.000(2)	0.000(2)
C(3)	0.047(3)	0.024(3)	0.043(4)	-0.003(3)	-0.001(3)	-0.001(2)
C(4)	0.040(3)	0.051(4)	0.044(4)	0.013(3)	-0.008(3)	0.006(3)
C(5)	0.032(3)	0.031(3)	0.029(3)	0.007(2)	-0.002(2)	-0.000(2)
C(6)	0.053(4)	0.039(3)	0.029(3)	-0.015(3)	-0.003(3)	0.005(3)
C(7)	0.027(4)	0.066(6)	0.017(4)	0.0000	-0.003(3)	0.0000
C(8)	0.052(4)	0.047(4)	0.047(4)	0.020(4)	-0.007(3)	-0.002(3)
C(9)	0.103(7)	0.054(5)	0.058(5)	-0.035(5)	-0.027(5)	0.024(4)
C(10)	0.046(6)	0.19(2)	0.025(5)	0.0000	0.005(5)	0.0000

Table S16. Bond Lengths(Å) for **6**

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Ir(1)	C(1)	1.988(7)	Ir(1)	C(5)	2.231(6)
Ir(1)	C(5) ¹⁾	2.231(6)	Ir(1)	C(6)	2.274(6)
Ir(1)	C(6) ¹⁾	2.274(6)	Ir(1)	C(7)	2.253(8)
N(1)	C(1)	1.363(6)	N(1)	C(2)	1.388(7)
N(1)	C(3)	1.456(7)	C(1)	N(1) ¹⁾	1.363(6)
C(2)	C(2) ¹⁾	1.327(8)	C(2)	C(4)	1.487(9)
C(5)	C(5) ¹⁾	1.419(8)	C(5)	C(6)	1.441(8)
C(5)	C(8)	1.492(9)	C(6)	C(7)	1.458(8)
C(6)	C(9)	1.50(1)	C(7)	C(6) ¹⁾	1.458(8)
C(7)	C(10)	1.48(1)			
C(3)	H(1)	0.9500	C(3)	H(2)	0.9500
C(3)	H(3)	0.9500	C(4)	H(4)	0.9500
C(4)	H(5)	0.9500	C(4)	H(6)	0.9501
C(8)	H(7)	0.9500	C(8)	H(8)	0.9500
C(8)	H(9)	0.9501	C(9)	H(10)	0.9500
C(9)	H(11)	0.9500	C(9)	H(12)	0.9500
C(10)	H(13)	0.9500	C(10)	H(13) ¹⁾	0.9500
C(10)	H(14)	0.9500	C(10)	H(14) ¹⁾	0.9500
C(10)	H(15)	0.9500	C(10)	H(15) ¹⁾	0.9500

Symmetry Operators:

¹⁾ X,-Y+1/2,Z**Table S17.** Bond Angles(°) for **6**

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Ir(1)	C(1)	N(1)	129.0(3)	Ir(1)	C(1)	N(1) ¹⁾	129.0(3)
C(5)	Ir(1)	C(1)	153.5(2)	C(5) ¹⁾	Ir(1)	C(1)	153.5(2)
C(6)	Ir(1)	C(1)	116.8(2)	C(6) ¹⁾	Ir(1)	C(1)	116.8(2)
C(7)	Ir(1)	C(1)	99.8(3)	Ir(1)	C(5)	C(5) ¹⁾	71.4(3)
C(5) ¹⁾	Ir(1)	C(5)	37.1(2)	Ir(1)	C(5)	C(6)	73.0(3)
C(6)	Ir(1)	C(5)	37.3(2)	C(6) ¹⁾	Ir(1)	C(5)	62.3(2)
C(7)	Ir(1)	C(5)	62.6(2)	Ir(1)	C(5)	C(8)	126.6(4)
Ir(1)	C(5) ¹⁾	C(5)	71.4(3)	C(6)	Ir(1)	C(5) ¹⁾	62.3(2)
Ir(1)	C(5) ¹⁾	C(6) ¹⁾	73.0(3)	C(6) ¹⁾	Ir(1)	C(5) ¹⁾	37.3(2)
C(7)	Ir(1)	C(5) ¹⁾	62.6(2)	Ir(1)	C(5) ¹⁾	C(8) ¹⁾	126.6(4)
Ir(1)	C(6)	C(5)	69.7(3)	C(6) ¹⁾	Ir(1)	C(6)	62.5(2)
Ir(1)	C(6)	C(7)	70.4(4)	C(7)	Ir(1)	C(6)	37.6(2)

Ir(1)	C(6)	C(9)	130.2(5)	Ir(1)	C(6) ¹⁾	C(5) ¹⁾	69.7(3)
Ir(1)	C(6) ¹⁾	C(7)	70.4(4)	C(7)	Ir(1)	C(6) ¹⁾	37.6(2)
Ir(1)	C(6) ¹⁾	C(9) ¹⁾	130.2(5)	Ir(1)	C(7)	C(6)	72.0(4)
Ir(1)	C(7)	C(6) ¹⁾	72.0(4)	Ir(1)	C(7)	C(10)	127.3(6)
N(1)	C(1)	N(1) ¹⁾	101.9(5)	C(3)	N(1)	C(1)	124.2(5)
C(2)	N(1)	C(1)	112.6(5)	C(3)	N(1)	C(2)	123.2(5)
N(1)	C(2)	C(2) ¹⁾	106.5(5)	N(1)	C(2)	C(4)	123.8(5)
C(1)	N(1) ¹⁾	C(3) ¹⁾	124.2(5)	C(1)	N(1) ¹⁾	C(2) ¹⁾	112.6(5)
C(2)	C(2) ¹⁾	N(1) ¹⁾	106.5(5)	C(4)	C(2)	C(2) ¹⁾	129.7(5)
C(2)	C(2) ¹⁾	C(4) ¹⁾	129.7(5)	C(6)	C(5)	C(5) ¹⁾	109.0(5)
C(5)	C(5) ¹⁾	C(6) ¹⁾	109.0(5)	C(8)	C(5)	C(5) ¹⁾	126.6(5)
C(5)	C(5) ¹⁾	C(8) ¹⁾	126.6(5)	C(5)	C(6)	C(7)	106.9(5)
C(8)	C(5)	C(6)	124.0(5)	C(5)	C(6)	C(9)	126.1(6)
C(6)	C(7)	C(6) ¹⁾	108.0(6)	C(9)	C(6)	C(7)	126.6(6)
C(6)	C(7)	C(10)	125.8(4)	C(7)	C(6) ¹⁾	C(5) ¹⁾	106.9(5)
C(7)	C(6) ¹⁾	C(9) ¹⁾	126.6(6)	C(10)	C(7)	C(6) ¹⁾	125.8(4)
N(1)	C(3)	H(3)	110.1	N(1)	C(3)	H(1)	108.6
N(1)	C(3)	H(2)	109.8	C(2)	C(4)	H(4)	109.2
C(2)	C(4)	H(5)	110.2	C(2)	C(4)	H(6)	109.0
H(3)	C(3)	H(1)	109.5	H(2)	C(3)	H(1)	109.5
H(3)	C(3)	H(2)	109.5	H(5)	C(4)	H(4)	109.5
H(6)	C(4)	H(4)	109.5	H(6)	C(4)	H(5)	109.5
C(5)	C(8)	H(9)	110.1	C(5)	C(8)	H(7)	108.6
C(5)	C(8)	H(8)	109.6	C(6)	C(9)	H(12)	109.6
C(6)	C(9)	H(10)	107.9	C(6)	C(9)	H(11)	110.9
C(7)	C(10)	H(15)	109.4	C(7)	C(10)	H(15) ¹⁾	109.4
C(7)	C(10)	H(13)	109.5	C(7)	C(10)	H(13) ¹⁾	109.5
C(7)	C(10)	H(14)	109.5	C(7)	C(10)	H(14) ¹⁾	109.5
H(9)	C(8)	H(7)	109.5	H(8)	C(8)	H(7)	109.5
H(9)	C(8)	H(8)	109.5	H(12)	C(9)	H(10)	109.5
H(11)	C(9)	H(10)	109.5	H(12)	C(9)	H(11)	109.5
H(15)	C(10)	H(13)	109.5	H(15) ¹⁾	C(10)	H(13)	56.2
H(13) ¹⁾	C(10)	H(13)	141.1	H(14)	C(10)	H(13)	109.5
H(14) ¹⁾	C(10)	H(13)	56.3	H(15)	C(10)	H(13) ¹⁾	56.2
H(15) ¹⁾	C(10)	H(13) ¹⁾	109.5	H(14)	C(10)	H(13) ¹⁾	56.3
H(14) ¹⁾	C(10)	H(13) ¹⁾	109.5	H(15)	C(10)	H(14)	109.5
H(15) ¹⁾	C(10)	H(14)	141.1	H(14) ¹⁾	C(10)	H(14)	56.3
H(15)	C(10)	H(14) ¹⁾	141.1	H(15) ¹⁾	C(10)	H(14) ¹⁾	109.5
H(15) ¹⁾	C(10)	H(15)	56.3				

Symmetry Operators:

¹⁾ X,-Y+1/2,Z

Table S18. Atomic coordinates and B_{iso}/B_{eq} for **7c**·2(H₂O)

atom	x	y	z	B _{eq}
Ir(1)	0.193508(6)	0.21529(1)	0.485227(5)	1.661(3)
O(1)	0.4027(7)	0.264(1)	0.1725(8)	35.7(8)
O(2)	0.962(1)	-0.022(2)	0.2198(7)	71(2)
N(1)	0.1607(1)	0.3310(3)	0.3864(1)	2.15(6)
N(2)	0.1899(1)	0.1622(3)	0.3835(1)	2.60(7)
C(1)	0.1829(2)	0.2391(3)	0.4144(1)	1.91(7)
C(2)	0.1466(2)	0.4365(4)	0.4032(2)	3.07(9)
C(3)	0.2105(2)	0.0471(4)	0.3962(2)	3.3(1)
C(4)	0.1538(2)	0.3123(4)	0.3376(1)	2.89(9)
C(5)	0.1716(2)	0.2070(4)	0.3356(1)	3.23(9)
C(6)	0.1330(2)	0.4023(5)	0.2997(2)	4.3(1)
C(7)	0.1760(3)	0.1396(5)	0.2942(2)	4.9(1)
C(8)	0.1716(2)	0.1246(4)	0.5432(1)	2.93(9)
C(9)	0.1469(2)	0.0677(3)	0.4958(1)	2.41(8)
C(10)	0.1050(2)	0.1424(3)	0.4616(1)	2.06(7)
C(11)	0.1068(2)	0.2454(3)	0.4864(2)	2.73(9)
C(12)	0.1473(2)	0.2323(4)	0.5372(2)	2.89(9)
C(13)	0.2090(2)	0.0702(5)	0.5907(2)	5.1(1)
C(14)	0.1576(2)	-0.0518(4)	0.4879(2)	4.2(1)
C(15)	0.0662(2)	0.1158(4)	0.4103(2)	3.5(1)
C(16)	0.0648(2)	0.3423(4)	0.4669(2)	4.5(1)
C(17)	0.1553(2)	0.3207(5)	0.5759(2)	5.1(1)
C(18)	0.4094(2)	0.1714(4)	0.8562(1)	2.72(8)
C(19)	0.4089(2)	0.0555(4)	0.8653(2)	4.1(1)
C(20)	0.4435(3)	-0.0210(4)	0.8529(2)	5.1(1)
C(21)	0.4802(2)	0.0165(5)	0.8302(2)	4.8(1)
C(22)	0.4808(2)	0.1291(5)	0.8208(2)	3.9(1)
C(23)	0.4468(2)	0.2028(4)	0.8336(1)	2.97(9)
C(24)	0.3488(2)	0.2167(3)	0.9138(1)	2.82(9)
C(25)	0.2924(2)	0.2226(4)	0.9131(2)	3.3(1)
C(26)	0.2794(3)	0.1926(4)	0.9532(2)	4.2(1)
C(27)	0.3234(3)	0.1547(4)	0.9954(2)	4.7(1)
C(28)	0.3790(3)	0.1461(4)	0.9974(2)	4.5(1)
C(29)	0.3919(2)	0.1766(4)	0.9568(2)	3.8(1)
C(30)	0.3945(2)	0.3859(3)	0.8790(1)	2.17(8)
C(31)	0.4234(2)	0.4289(3)	0.9266(1)	2.52(8)
C(32)	0.4491(2)	0.5347(4)	0.9361(2)	3.11(9)
C(33)	0.4481(2)	0.6035(4)	0.8983(2)	3.4(1)

C(34)	0.4203(2)	0.5643(4)	0.8504(2)	3.2(1)
C(35)	0.3947(2)	0.4594(4)	0.8417(1)	2.90(9)
C(36)	0.3023(2)	0.2628(3)	0.8165(1)	2.49(8)
C(37)	0.2818(2)	0.1686(4)	0.7870(2)	3.4(1)
C(38)	0.2304(2)	0.1683(4)	0.7454(2)	4.5(1)
C(39)	0.1960(2)	0.2640(4)	0.7312(2)	4.1(1)
C(40)	0.2139(2)	0.3587(4)	0.7606(2)	3.3(1)
C(41)	0.2660(2)	0.3573(4)	0.8020(1)	2.72(9)
B(1)	0.3641(2)	0.2596(4)	0.8666(2)	2.41(9)
H(1)	0.1482	0.4295	0.4361	3.730
H(2)	0.1737	0.4939	0.4034	3.730
H(3)	0.1078	0.4609	0.3827	3.730
H(4)	0.2131	0.0285	0.4285	4.094
H(5)	0.1842	-0.0049	0.3735	4.094
H(6)	0.2485	0.0377	0.3955	4.094
H(7)	0.1209	0.4665	0.3127	5.135
H(8)	0.1655	0.4262	0.2912	5.135
H(9)	0.1024	0.3769	0.2713	5.135
H(10)	0.1809	0.0601	0.3031	5.817
H(11)	0.1418	0.1467	0.2652	5.817
H(12)	0.2094	0.1616	0.2879	5.817
H(13)	0.1958	0.0872	0.6157	6.201
H(14)	0.2080	-0.0114	0.5866	6.201
H(15)	0.2492	0.0925	0.6008	6.201
H(16)	0.1600	-0.0972	0.5152	5.009
H(17)	0.1252	-0.0813	0.4593	5.009
H(18)	0.1924	-0.0607	0.4822	5.009
H(19)	0.0282	0.0930	0.4080	4.356
H(20)	0.0612	0.1816	0.3899	4.356
H(21)	0.0824	0.0576	0.3975	4.356
H(22)	0.0532	0.3710	0.4913	5.203
H(23)	0.0830	0.4013	0.4555	5.203
H(24)	0.0304	0.3183	0.4392	5.203
H(25)	0.1530	0.2857	0.6044	6.229
H(26)	0.1925	0.3555	0.5852	6.229
H(27)	0.1252	0.3754	0.5638	6.229
H(28)	0.3837	0.0270	0.8807	4.968
H(29)	0.4427	-0.1010	0.8614	5.932
H(30)	0.5041	-0.0362	0.8216	5.840
H(31)	0.5064	0.1568	0.8049	4.680
H(32)	0.4488	0.2821	0.8264	3.665
H(33)	0.2615	0.2502	0.8833	3.958

H(34)	0.2399	0.1978	0.9515	5.149
H(35)	0.3172	0.1343	1.0243	5.807
H(36)	0.4113	0.1206	1.0276	5.394
H(37)	0.4309	0.1697	0.9582	4.584
H(38)	0.4255	0.3831	0.9544	3.093
H(39)	0.4680	0.5604	0.9698	3.737
H(40)	0.4662	0.6767	0.9052	3.984
H(41)	0.4193	0.6119	0.8236	3.915
H(42)	0.3760	0.4334	0.8081	3.485
H(43)	0.3049	0.1007	0.7958	4.080
H(44)	0.2190	0.0999	0.7258	5.132
H(45)	0.1602	0.2639	0.7018	4.776
H(46)	0.1903	0.4269	0.7517	4.019
H(47)	0.2780	0.4254	0.8221	3.248

Table S19. Anisotropic Displacement Parameters for **7c·2(H₂O)**

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Ir(1)	0.02024(7)	0.02548(7)	0.01889(7)	-0.00303(7)	0.00928(5)	0.00102(7)
O(1)	0.35(2)	0.17(1)	0.64(3)	0.10(1)	-0.02(2)	0.06(1)
O(2)	0.85(5)	1.46(7)	0.74(5)	1.02(6)	0.70(4)	0.88(5)
N(1)	0.025(2)	0.034(2)	0.020(1)	-0.004(1)	0.007(1)	0.002(1)
N(2)	0.040(2)	0.038(2)	0.024(2)	-0.010(2)	0.015(1)	-0.005(1)
C(1)	0.019(2)	0.036(2)	0.016(2)	-0.006(1)	0.005(1)	0.001(1)
C(2)	0.038(2)	0.040(2)	0.040(2)	0.006(2)	0.016(2)	0.010(2)
C(3)	0.058(3)	0.034(2)	0.043(2)	-0.005(2)	0.030(2)	-0.011(2)
C(4)	0.040(2)	0.048(3)	0.021(2)	-0.013(2)	0.010(2)	0.005(2)
C(5)	0.047(2)	0.059(3)	0.020(2)	-0.020(2)	0.016(2)	-0.007(2)
C(6)	0.056(3)	0.073(4)	0.027(2)	-0.005(3)	0.011(2)	0.017(2)
C(7)	0.096(4)	0.070(4)	0.032(2)	-0.023(3)	0.035(3)	-0.011(2)
C(8)	0.026(2)	0.061(3)	0.027(2)	-0.014(2)	0.013(2)	0.014(2)
C(9)	0.029(2)	0.028(2)	0.042(2)	-0.004(2)	0.022(2)	0.007(2)
C(10)	0.023(2)	0.034(2)	0.026(2)	-0.005(2)	0.014(1)	-0.001(2)
C(11)	0.029(2)	0.034(2)	0.048(3)	-0.005(2)	0.024(2)	0.002(2)
C(12)	0.037(2)	0.048(3)	0.036(2)	-0.014(2)	0.026(2)	-0.012(2)
C(13)	0.037(3)	0.102(4)	0.047(3)	-0.016(3)	0.010(2)	0.039(3)
C(14)	0.069(3)	0.032(2)	0.078(4)	-0.001(2)	0.050(3)	0.012(2)
C(15)	0.031(2)	0.063(3)	0.037(2)	-0.011(2)	0.011(2)	-0.004(2)
C(16)	0.040(3)	0.043(3)	0.099(4)	0.021(2)	0.040(3)	0.018(3)
C(17)	0.063(3)	0.092(4)	0.061(3)	-0.032(3)	0.047(3)	-0.040(3)
C(18)	0.030(2)	0.036(2)	0.033(2)	0.001(2)	0.008(2)	-0.006(2)
C(19)	0.055(3)	0.035(3)	0.072(3)	0.007(2)	0.034(3)	-0.002(2)
C(20)	0.062(4)	0.042(3)	0.091(4)	0.009(3)	0.031(3)	-0.012(3)

C(21)	0.042(3)	0.073(4)	0.064(3)	0.013(3)	0.017(3)	-0.029(3)
C(22)	0.033(2)	0.072(4)	0.044(3)	0.004(2)	0.015(2)	-0.015(2)
C(23)	0.029(2)	0.051(3)	0.029(2)	0.003(2)	0.008(2)	-0.007(2)
C(24)	0.053(3)	0.027(2)	0.037(2)	-0.001(2)	0.028(2)	0.001(2)
C(25)	0.047(3)	0.037(2)	0.049(3)	-0.012(2)	0.027(2)	-0.005(2)
C(26)	0.077(4)	0.038(3)	0.067(3)	-0.021(2)	0.052(3)	-0.011(2)
C(27)	0.108(5)	0.036(3)	0.060(3)	-0.006(3)	0.058(4)	0.007(2)
C(28)	0.092(4)	0.033(2)	0.049(3)	0.009(3)	0.031(3)	0.014(2)
C(29)	0.063(3)	0.042(3)	0.046(3)	0.008(2)	0.028(2)	0.008(2)
C(30)	0.026(2)	0.034(2)	0.027(2)	0.001(2)	0.015(2)	-0.002(2)
C(31)	0.030(2)	0.037(2)	0.031(2)	0.004(2)	0.014(2)	0.001(2)
C(32)	0.033(2)	0.043(2)	0.038(2)	0.002(2)	0.009(2)	-0.016(2)
C(33)	0.037(2)	0.029(2)	0.059(3)	-0.000(2)	0.013(2)	-0.004(2)
C(34)	0.040(2)	0.038(2)	0.043(2)	0.001(2)	0.016(2)	0.008(2)
C(35)	0.040(2)	0.038(2)	0.032(2)	-0.002(2)	0.015(2)	-0.003(2)
C(36)	0.035(2)	0.032(2)	0.034(2)	-0.003(2)	0.022(2)	-0.006(2)
C(37)	0.038(2)	0.035(2)	0.054(3)	-0.001(2)	0.014(2)	-0.010(2)
C(38)	0.050(3)	0.043(3)	0.067(3)	-0.010(2)	0.011(3)	-0.024(3)
C(39)	0.036(2)	0.057(3)	0.051(3)	-0.003(2)	0.005(2)	-0.011(2)
C(40)	0.041(2)	0.042(2)	0.044(2)	0.003(2)	0.019(2)	-0.007(2)
C(41)	0.041(2)	0.034(2)	0.032(2)	-0.001(2)	0.017(2)	-0.008(2)
B(1)	0.033(2)	0.029(2)	0.037(2)	-0.000(2)	0.021(2)	-0.001(2)

Table S20. Bond Lengths(Å) for 7c·2(H₂O)

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Ir(1)	Ir(1)	2.7124(5)	Ir(1)	C(1)	2.028(4)
Ir(1)	C(8)	2.266(4)	Ir(1)	C(9)	2.189(5)
Ir(1)	C(10)	2.200(4)	Ir(1)	C(11)	2.191(5)
Ir(1)	C(12)	2.258(5)	N(1)	C(1)	1.351(6)
N(1)	C(2)	1.442(7)	N(1)	C(4)	1.407(6)
N(2)	C(1)	1.352(6)	N(2)	C(3)	1.456(7)
N(2)	C(5)	1.414(6)	C(2)	H(1)	0.96
C(2)	H(2)	0.96	C(2)	H(3)	0.96
C(3)	H(4)	0.96	C(3)	H(5)	0.96
C(3)	H(6)	0.96	C(4)	C(5)	1.335(8)
C(4)	C(6)	1.488(7)	C(5)	C(7)	1.503(8)
C(6)	H(7)	0.95	C(6)	H(8)	0.97
C(6)	H(9)	0.93	C(7)	H(10)	0.98
C(7)	H(11)	0.95	C(7)	H(12)	0.95
C(8)	C(9)	1.460(7)	C(8)	C(12)	1.396(8)
C(8)	C(13)	1.494(7)	C(9)	C(10)	1.438(7)
C(9)	C(14)	1.480(7)	C(10)	C(11)	1.420(7)

C(10)	C(15)	1.479(7)	C(11)	C(12)	1.453(8)
C(11)	C(16)	1.507(8)	C(12)	C(17)	1.509(8)
C(13)	H(13)	0.94	C(13)	H(14)	0.98
C(13)	H(15)	0.96	C(14)	H(16)	0.96
C(14)	H(17)	0.98	C(14)	H(18)	0.95
C(15)	H(19)	0.96	C(15)	H(20)	0.97
C(15)	H(21)	0.95	C(16)	H(22)	0.94
C(16)	H(23)	0.96	C(16)	H(24)	0.96
C(17)	H(25)	0.96	C(17)	H(26)	0.95
C(17)	H(27)	0.95	C(18)	C(19)	1.404(8)
C(18)	C(23)	1.390(7)	C(18)	B(1)	1.649(8)
C(19)	C(20)	1.396(8)	C(19)	H(28)	0.97
C(20)	C(21)	1.40(1)	C(20)	H(29)	0.99
C(21)	C(22)	1.37(1)	C(21)	H(30)	0.96
C(22)	C(23)	1.369(8)	C(22)	H(31)	0.98
C(23)	H(32)	0.97	C(24)	C(25)	1.391(8)
C(24)	C(29)	1.387(8)	C(24)	B(1)	1.665(7)
C(25)	C(26)	1.393(8)	C(25)	H(33)	0.97
C(26)	C(27)	1.37(1)	C(26)	H(34)	0.96
C(27)	C(28)	1.36(1)	C(27)	H(35)	0.96
C(28)	C(29)	1.408(8)	C(28)	H(36)	0.99
C(29)	H(37)	0.95	C(30)	C(31)	1.403(7)
C(30)	C(35)	1.411(7)	C(30)	B(1)	1.654(7)
C(31)	C(32)	1.387(7)	C(31)	H(38)	0.97
C(32)	C(33)	1.379(8)	C(32)	H(39)	0.97
C(33)	C(34)	1.393(8)	C(33)	H(40)	0.96
C(34)	C(35)	1.376(8)	C(34)	H(41)	0.97
C(35)	H(42)	0.97	C(36)	C(37)	1.388(7)
C(36)	C(41)	1.397(7)	C(36)	B(1)	1.663(8)
C(37)	C(38)	1.381(8)	C(37)	H(43)	0.96
C(38)	C(39)	1.384(9)	C(38)	H(44)	0.97
C(39)	C(40)	1.385(8)	C(39)	H(45)	0.97
C(40)	C(41)	1.390(7)	C(40)	H(46)	0.97
C(41)	H(47)	0.98			

Table S21. Bond Angles($^{\circ}$) for **7c·2(H₂O)**

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
Ir(1)	Ir(1)	C(1)	89.5(1)	Ir(1)	Ir(1)	C(8)	115.0(1)
Ir(1)	Ir(1)	C(9)	137.1(1)	Ir(1)	Ir(1)	C(10)	174.5(1)
Ir(1)	Ir(1)	C(11)	147.0(1)	Ir(1)	Ir(1)	C(12)	119.1(1)
C(1)	Ir(1)	C(8)	151.3(2)	C(1)	Ir(1)	C(9)	113.4(2)

C(1)	Ir(1)	C(10)	90.9(2)	C(1)	Ir(1)	C(11)	105.2(2)
C(1)	Ir(1)	C(12)	142.8(2)	C(8)	Ir(1)	C(9)	38.2(2)
C(8)	Ir(1)	C(10)	63.2(2)	C(8)	Ir(1)	C(11)	62.5(2)
C(8)	Ir(1)	C(12)	35.9(2)	C(9)	Ir(1)	C(10)	38.2(2)
C(9)	Ir(1)	C(11)	63.5(2)	C(9)	Ir(1)	C(12)	62.5(2)
C(10)	Ir(1)	C(11)	37.7(2)	C(10)	Ir(1)	C(12)	62.9(2)
C(11)	Ir(1)	C(12)	38.1(2)	C(1)	N(1)	C(2)	125.9(4)
C(1)	N(1)	C(4)	111.1(4)	C(2)	N(1)	C(4)	123.0(4)
C(1)	N(2)	C(3)	125.8(4)	C(1)	N(2)	C(5)	110.4(5)
C(3)	N(2)	C(5)	123.7(4)	Ir(1)	C(1)	N(1)	127.2(4)
Ir(1)	C(1)	N(2)	127.3(4)	N(1)	C(1)	N(2)	105.0(4)
N(1)	C(2)	H(1)	110	N(1)	C(2)	H(2)	111
N(1)	C(2)	H(3)	111	H(1)	C(2)	H(2)	107
H(1)	C(2)	H(3)	107	H(2)	C(2)	H(3)	108
N(2)	C(3)	H(4)	110	N(2)	C(3)	H(5)	110
N(2)	C(3)	H(6)	110	H(4)	C(3)	H(5)	108
H(4)	C(3)	H(6)	108	H(5)	C(3)	H(6)	108
N(1)	C(4)	C(5)	106.4(4)	N(1)	C(4)	C(6)	121.9(5)
C(5)	C(4)	C(6)	131.6(5)	N(2)	C(5)	C(4)	106.9(4)
N(2)	C(5)	C(7)	121.3(6)	C(4)	C(5)	C(7)	131.7(5)
C(4)	C(6)	H(7)	109	C(4)	C(6)	H(8)	109
C(4)	C(6)	H(9)	111	H(7)	C(6)	H(8)	107
H(7)	C(6)	H(9)	110	H(8)	C(6)	H(9)	108
C(5)	C(7)	H(10)	109	C(5)	C(7)	H(11)	111
C(5)	C(7)	H(12)	111	H(10)	C(7)	H(11)	107
H(10)	C(7)	H(12)	107	H(11)	C(7)	H(12)	109
Ir(1)	C(8)	C(9)	68.0(3)	Ir(1)	C(8)	C(12)	71.7(3)
Ir(1)	C(8)	C(13)	132.4(4)	C(9)	C(8)	C(12)	107.8(4)
C(9)	C(8)	C(13)	125.2(6)	C(12)	C(8)	C(13)	126.5(6)
Ir(1)	C(9)	C(8)	73.8(3)	Ir(1)	C(9)	C(10)	71.3(3)
Ir(1)	C(9)	C(14)	127.5(4)	C(8)	C(9)	C(10)	107.8(4)
C(8)	C(9)	C(14)	124.3(5)	C(10)	C(9)	C(14)	127.3(5)
Ir(1)	C(10)	C(9)	70.5(3)	Ir(1)	C(10)	C(11)	70.8(3)
Ir(1)	C(10)	C(15)	125.2(3)	C(9)	C(10)	C(11)	107.5(4)
C(9)	C(10)	C(15)	126.2(5)	C(11)	C(10)	C(15)	126.3(5)
Ir(1)	C(11)	C(10)	71.5(3)	Ir(1)	C(11)	C(12)	73.5(3)
Ir(1)	C(11)	C(16)	130.7(4)	C(10)	C(11)	C(12)	108.2(5)
C(10)	C(11)	C(16)	125.6(5)	C(12)	C(11)	C(16)	124.9(5)
Ir(1)	C(12)	C(8)	72.3(3)	Ir(1)	C(12)	C(11)	68.4(3)
Ir(1)	C(12)	C(17)	129.0(4)	C(8)	C(12)	C(11)	108.6(5)
C(8)	C(12)	C(17)	128.2(6)	C(11)	C(12)	C(17)	123.0(6)
C(8)	C(13)	H(13)	111	C(8)	C(13)	H(14)	109

C(8)	C(13)	H(15)	111	H(13)	C(13)	H(14)	108
H(13)	C(13)	H(15)	109	H(14)	C(13)	H(15)	106
C(9)	C(14)	H(16)	111	C(9)	C(14)	H(17)	110
C(9)	C(14)	H(18)	111	H(16)	C(14)	H(17)	106
H(16)	C(14)	H(18)	109	H(17)	C(14)	H(18)	107
C(10)	C(15)	H(19)	111	C(10)	C(15)	H(20)	109
C(10)	C(15)	H(21)	111	H(19)	C(15)	H(20)	107
H(19)	C(15)	H(21)	108	H(20)	C(15)	H(21)	108
C(11)	C(16)	H(22)	110	C(11)	C(16)	H(23)	110
C(11)	C(16)	H(24)	110	H(22)	C(16)	H(23)	109
H(22)	C(16)	H(24)	108	H(23)	C(16)	H(24)	107
C(12)	C(17)	H(25)	109	C(12)	C(17)	H(26)	110
C(12)	C(17)	H(27)	109	H(25)	C(17)	H(26)	108
H(25)	C(17)	H(27)	108	H(26)	C(17)	H(27)	109
C(19)	C(18)	C(23)	114.3(5)	C(19)	C(18)	B(1)	122.0(5)
C(23)	C(18)	B(1)	123.3(5)	C(18)	C(19)	C(20)	122.5(6)
C(18)	C(19)	H(28)	119	C(20)	C(19)	H(28)	118
C(19)	C(20)	C(21)	120.1(6)	C(19)	C(20)	H(29)	118
C(21)	C(20)	H(29)	121	C(20)	C(21)	C(22)	118.2(6)
C(20)	C(21)	H(30)	120	C(22)	C(21)	H(30)	121
C(21)	C(22)	C(23)	120.7(6)	C(21)	C(22)	H(31)	119
C(23)	C(22)	H(31)	120	C(18)	C(23)	C(22)	124.2(6)
C(18)	C(23)	H(32)	117	C(22)	C(23)	H(32)	117
C(25)	C(24)	C(29)	116.0(5)	C(25)	C(24)	B(1)	122.0(5)
C(29)	C(24)	B(1)	122.0(5)	C(24)	C(25)	C(26)	122.7(6)
C(24)	C(25)	H(33)	117	C(26)	C(25)	H(33)	119
C(25)	C(26)	C(27)	119.6(6)	C(25)	C(26)	H(34)	120
C(27)	C(26)	H(34)	119	C(26)	C(27)	C(28)	119.6(6)
C(26)	C(27)	H(35)	123	C(28)	C(27)	H(35)	117
C(27)	C(28)	C(29)	120.6(6)	C(27)	C(28)	H(36)	120
C(29)	C(28)	H(36)	118	C(24)	C(29)	C(28)	121.5(6)
C(24)	C(29)	H(37)	118	C(28)	C(29)	H(37)	120
C(31)	C(30)	C(35)	113.9(5)	C(31)	C(30)	B(1)	124.2(4)
C(35)	C(30)	B(1)	121.9(4)	C(30)	C(31)	C(32)	123.2(5)
C(30)	C(31)	H(38)	119	C(32)	C(31)	H(38)	117
C(31)	C(32)	C(33)	120.8(5)	C(31)	C(32)	H(39)	119
C(33)	C(32)	H(39)	119	C(32)	C(33)	C(34)	118.3(5)
C(32)	C(33)	H(40)	120	C(34)	C(33)	H(40)	121
C(33)	C(34)	C(35)	120.1(5)	C(33)	C(34)	H(41)	118
C(35)	C(34)	H(41)	120	C(30)	C(35)	C(34)	123.8(5)
C(30)	C(35)	H(42)	117	C(34)	C(35)	H(42)	118
C(37)	C(36)	C(41)	115.0(5)	C(37)	C(36)	B(1)	121.7(5)

C(41)	C(36)	B(1)	123.2(4)	C(36)	C(37)	C(38)	123.0(6)
C(36)	C(37)	H(43)	118	C(38)	C(37)	H(43)	118
C(37)	C(38)	C(39)	120.8(6)	C(37)	C(38)	H(44)	118
C(39)	C(38)	H(44)	120	C(38)	C(39)	C(40)	118.0(6)
C(38)	C(39)	H(45)	120	C(40)	C(39)	H(45)	121
C(39)	C(40)	C(41)	120.2(6)	C(39)	C(40)	H(46)	119
C(41)	C(40)	H(46)	120	C(36)	C(41)	C(40)	122.9(5)
C(36)	C(41)	H(47)	118	C(40)	C(41)	H(47)	118
C(18)	B(1)	C(24)	110.9(4)	C(18)	B(1)	C(30)	109.5(4)
C(18)	B(1)	C(36)	107.6(4)	C(24)	B(1)	C(30)	109.0(4)
C(24)	B(1)	C(36)	108.9(4)	C(30)	B(1)	C(36)	110.9(4)

Table S22. Atomic coordinates and $B_{\text{iso}}/B_{\text{eq}}$ for **8b·C₃H₆O**

atom	x	y	z	B_{eq}
Ir(1)	0.128582(6)	0.18460(2)	0.45680(1)	3.895(5)
S(1)	0.18504(9)	0.4389(3)	0.7332(1)	10.3(1)
S(2)	0.5434(3)	0.3345(9)	0.5317(5)	22.5(4)
P(1)	0.14793(4)	0.0076(1)	0.41526(9)	3.73(4)
F(1)	0.1692(2)	0.5469(6)	0.8314(3)	11.3(2)
F(2)	0.1500(3)	0.359(1)	0.784(1)	28.9(7)
F(3)	0.2011(2)	0.3869(8)	0.8715(3)	14.6(3)
F(4)	0.530(1)	0.187(2)	0.441(1)	40(1)
F(5)	0.5652(9)	0.142(3)	0.535(1)	40(1)
F(6)	0.512(1)	0.159(4)	0.522(2)	46(2)
O(1)	0.1987(2)	0.3260(6)	0.7257(4)	10.5(2)
O(2)	0.1591(2)	0.5016(7)	0.6792(4)	11.7(2)
O(3)	0.2197(2)	0.5306(8)	0.784(1)	29.5(6)
O(4)	0.5530(6)	0.337(2)	0.601(1)	31.3(9)
O(5)	0.4997(5)	0.329(3)	0.483(1)	33(1)
O(6)	0.5658(5)	0.377(3)	0.505(2)	38(1)
O(7)	1.0009	0.3388	0.1933	21.5(5)
N(1)	0.1136(1)	0.2611(5)	0.3495(3)	4.5(1)
N(2)	0.0795(1)	0.1085(5)	0.4146(3)	4.9(1)
C(1)	0.0923(3)	0.377(1)	0.2254(5)	11.6(4)
C(2)	0.1042(2)	0.3107(8)	0.2943(4)	6.0(2)
C(3)	0.0179(2)	0.023(1)	0.3584(6)	10.8(3)
C(4)	0.0534(2)	0.0718(8)	0.3921(4)	6.3(2)
C(5)	0.1362(2)	0.3686(7)	0.5133(4)	5.3(2)
C(6)	0.1698(2)	0.3112(7)	0.5275(3)	5.0(2)
C(7)	0.1721(2)	0.2016(6)	0.5700(3)	4.4(2)
C(8)	0.1398(2)	0.1845(7)	0.5770(3)	5.0(2)

C(9)	0.1185(2)	0.2901(7)	0.5441(4)	5.4(2)
C(10)	0.1242(2)	0.4874(7)	0.4728(5)	8.3(2)
C(11)	0.1985(2)	0.3709(7)	0.5162(4)	6.4(2)
C(12)	0.2043(2)	0.1251(7)	0.6055(3)	5.0(2)
C(13)	0.1318(2)	0.0940(7)	0.6246(4)	6.1(2)
C(14)	0.0833(2)	0.3106(9)	0.5454(5)	8.0(3)
C(15)	0.1128(2)	-0.0766(6)	0.3421(3)	4.3(2)
C(16)	0.0972(2)	-0.0282(6)	0.2721(4)	5.2(2)
C(17)	0.0696(2)	-0.0881(9)	0.2137(4)	6.2(2)
C(18)	0.0579(2)	-0.195(1)	0.2291(5)	7.5(3)
C(19)	0.0732(3)	-0.2477(9)	0.2995(5)	8.4(3)
C(20)	0.1008(2)	-0.1887(8)	0.3549(4)	7.4(2)
C(21)	0.1775(1)	0.0350(5)	0.3693(3)	3.7(1)
C(22)	0.1888(2)	0.1514(6)	0.3633(4)	4.6(2)
C(23)	0.2103(2)	0.1730(7)	0.3281(4)	6.2(2)
C(24)	0.2210(2)	0.0767(9)	0.2974(4)	6.1(2)
C(25)	0.2094(2)	-0.0432(7)	0.3015(4)	5.5(2)
C(26)	0.1873(2)	-0.0625(6)	0.3361(3)	4.6(2)
C(27)	0.1689(2)	-0.1022(5)	0.4901(3)	4.2(1)
C(28)	0.1512(2)	-0.1430(6)	0.5334(4)	5.2(2)
C(29)	0.1667(2)	-0.2256(7)	0.5914(4)	5.9(2)
C(30)	0.1997(3)	-0.2669(8)	0.6084(4)	7.1(2)
C(31)	0.2173(2)	-0.2274(7)	0.5691(4)	6.6(2)
C(32)	0.2028(2)	-0.1453(6)	0.5095(4)	5.5(2)
C(33)	0.1820(4)	0.444(1)	0.8168(6)	11.0(4)
C(34)	0.5400(8)	0.200(5)	0.506(1)	27(1)
C(35)	0.9577	0.4357	0.1693	10.9(3)
C(36)	0.9932	0.4177	0.1861	7.2(2)
C(37)	1.0068	0.5191	0.1858	17.5(5)
H(1)	0.2152	0.4021	0.5616	7.946
H(2)	0.2096	0.3117	0.4959	7.947
H(3)	0.1900	0.4357	0.4798	7.947
H(4)	0.2087	0.1143	0.6580	5.975
H(5)	0.2008	0.0501	0.5814	5.975
H(6)	0.2231	0.1684	0.6025	5.975
H(7)	0.0816	0.4418	0.2265	15.308
H(8)	0.1141	0.3918	0.2177	15.308
H(9)	0.0798	0.3175	0.1865	15.308
H(10)	0.1348	0.1299	0.6706	7.218
H(11)	0.1086	0.0665	0.5983	7.218
H(12)	0.1471	0.0251	0.6334	7.218
H(13)	0.0090	0.0090	0.3974	13.950

H(14)	0.0022	0.0736	0.3214	13.950
H(15)	0.0176	-0.0575	0.3365	13.950
H(16)	0.0856	0.3114	0.5962	9.845
H(17)	0.0740	0.3876	0.5225	9.845
H(18)	0.0679	0.2473	0.5184	9.845
H(19)	0.1188	0.5429	0.5071	9.059
H(20)	0.1415	0.5240	0.4620	9.059
H(21)	0.1036	0.4765	0.4297	9.059
H(22)	0.1823	0.2186	0.3867	5.944
H(23)	0.1047	0.0481	0.2607	6.524
H(24)	0.2100	-0.3243	0.6474	8.717
H(25)	0.0600	-0.0577	0.1639	7.461
H(26)	0.2404	-0.2568	0.5809	7.770
H(27)	0.2188	0.2519	0.3255	7.280
H(28)	0.1537	-0.2557	0.6195	7.162
H(29)	0.1792	-0.1421	0.3375	5.495
H(30)	0.0654	-0.3227	0.3114	9.826
H(31)	0.1280	-0.1144	0.5219	6.343
H(32)	0.2363	0.0867	0.2730	7.448
H(33)	0.2169	-0.1108	0.2802	6.155
H(34)	0.0379	-0.2373	0.1934	8.955
H(35)	0.1121	-0.2299	0.4026	8.398
H(36)	0.2161	-0.1193	0.4823	6.360
H(37)	0.9560	0.4312	0.2209	15.332
H(38)	0.9479	0.4950	0.1441	15.332
H(39)	0.9492	0.3533	0.1493	15.332
H(40)	1.0150	0.5501	0.2445	22.380
H(41)	1.0290	0.5022	0.1870	22.380
H(42)	0.9940	0.5721	0.1587	22.380

Table S23. Anisotropic Displacement Parameters for **8b**·C₃H₆O

atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Ir(1)	0.0530(1)	0.0513(1)	0.0420(1)	-0.0029(2)	0.01767(9)	-0.0028(2)
S(1)	0.192(3)	0.130(2)	0.080(2)	0.068(2)	0.066(2)	0.006(2)
S(2)	0.39(1)	0.32(1)	0.155(5)	-0.082(9)	0.120(8)	-0.022(7)
P(1)	0.054(1)	0.044(1)	0.0426(8)	-0.0045(8)	0.0178(8)	-0.0013(7)
F(1)	0.195(6)	0.133(5)	0.123(4)	0.050(5)	0.086(4)	-0.019(4)
F(2)	0.23(1)	0.165(9)	0.76(3)	-0.008(8)	0.26(2)	0.05(1)
F(3)	0.248(9)	0.216(8)	0.083(4)	0.121(7)	0.060(5)	0.039(5)
F(4)	0.75(5)	0.41(3)	0.24(2)	0.03(3)	0.07(2)	-0.12(2)
F(5)	0.69(5)	0.50(3)	0.35(3)	0.40(3)	0.23(3)	0.05(2)
F(6)	0.52(5)	0.44(4)	0.69(7)	-0.14(3)	0.16(4)	0.05(4)

O(1)	0.179(7)	0.085(5)	0.164(6)	0.018(4)	0.102(6)	-0.034(4)
O(2)	0.176(7)	0.155(7)	0.097(5)	0.049(6)	0.038(5)	0.022(5)
O(3)	0.108(6)	0.105(7)	0.87(3)	-0.054(5)	0.16(1)	-0.16(1)
O(4)	0.57(4)	0.28(2)	0.24(2)	-0.04(2)	0.06(2)	-0.07(2)
O(5)	0.18(1)	0.69(5)	0.36(2)	-0.01(2)	0.10(1)	-0.00(3)
O(6)	0.24(2)	0.78(6)	0.39(3)	-0.16(3)	0.09(2)	0.20(3)
N(1)	0.049(3)	0.056(3)	0.060(3)	0.004(3)	0.017(3)	-0.005(3)
N(2)	0.053(3)	0.073(4)	0.064(4)	-0.004(3)	0.027(3)	0.002(3)
C(1)	0.119(8)	0.21(1)	0.095(7)	0.004(8)	0.029(6)	0.080(8)
C(2)	0.066(4)	0.101(6)	0.051(4)	0.005(5)	0.016(3)	0.019(5)
C(3)	0.091(7)	0.16(1)	0.136(9)	-0.062(7)	0.020(6)	-0.007(8)
C(4)	0.066(5)	0.101(7)	0.073(5)	-0.006(5)	0.029(4)	0.003(5)
C(5)	0.087(5)	0.051(4)	0.052(4)	0.005(4)	0.018(4)	-0.011(3)
C(6)	0.081(5)	0.054(4)	0.045(3)	-0.003(4)	0.015(3)	-0.009(4)
C(7)	0.066(4)	0.060(5)	0.038(3)	-0.002(4)	0.017(3)	-0.007(3)
C(8)	0.078(5)	0.074(5)	0.039(3)	-0.004(5)	0.025(3)	-0.013(4)
C(9)	0.077(5)	0.071(6)	0.054(4)	0.009(4)	0.024(4)	-0.021(4)
C(10)	0.128(8)	0.047(5)	0.101(7)	0.003(5)	0.009(6)	-0.022(4)
C(11)	0.092(6)	0.078(5)	0.058(4)	-0.033(5)	0.015(4)	-0.010(4)
C(12)	0.056(4)	0.084(5)	0.042(3)	-0.000(4)	0.013(3)	-0.001(3)
C(13)	0.095(6)	0.094(6)	0.057(4)	-0.008(5)	0.046(4)	0.003(4)
C(14)	0.087(6)	0.136(8)	0.083(5)	0.012(6)	0.036(5)	-0.033(6)
C(15)	0.060(4)	0.048(4)	0.053(4)	-0.006(3)	0.021(3)	-0.009(3)
C(16)	0.073(5)	0.065(5)	0.055(4)	-0.009(4)	0.021(4)	-0.002(4)
C(17)	0.058(5)	0.110(7)	0.058(4)	-0.006(5)	0.015(4)	-0.009(5)
C(18)	0.074(5)	0.126(8)	0.077(6)	-0.030(6)	0.021(4)	-0.043(6)
C(19)	0.123(8)	0.086(6)	0.094(7)	-0.055(6)	0.028(6)	-0.015(6)
C(20)	0.115(7)	0.073(6)	0.064(5)	-0.035(5)	0.008(4)	-0.005(5)
C(21)	0.053(4)	0.045(4)	0.040(3)	0.004(3)	0.017(3)	0.003(3)
C(22)	0.055(4)	0.058(5)	0.068(4)	-0.001(3)	0.030(3)	-0.001(3)
C(23)	0.069(5)	0.083(6)	0.090(5)	-0.020(5)	0.041(4)	-0.010(5)
C(24)	0.064(5)	0.117(7)	0.057(4)	0.002(5)	0.033(4)	-0.003(5)
C(25)	0.083(5)	0.072(5)	0.057(4)	0.017(4)	0.033(4)	-0.007(4)
C(26)	0.080(5)	0.054(4)	0.046(4)	0.003(4)	0.030(3)	-0.002(3)
C(27)	0.060(4)	0.038(4)	0.051(4)	-0.004(3)	0.014(3)	0.002(3)
C(28)	0.075(5)	0.058(5)	0.066(5)	-0.004(4)	0.030(4)	0.004(4)
C(29)	0.110(7)	0.062(5)	0.054(4)	-0.013(5)	0.034(5)	0.010(4)
C(30)	0.131(8)	0.062(5)	0.062(5)	0.008(5)	0.024(5)	0.017(4)
C(31)	0.093(6)	0.074(6)	0.068(5)	0.018(4)	0.018(5)	0.018(4)
C(32)	0.082(5)	0.057(5)	0.070(5)	0.005(4)	0.033(4)	0.006(4)
C(33)	0.23(1)	0.097(8)	0.100(8)	0.10(1)	0.083(9)	0.012(7)
C(34)	0.24(3)	0.58(7)	0.12(2)	0.07(3)	-0.02(2)	-0.21(3)

Table S24. Bond Lengths(Å) for **8b**·C₃H₆O

atom	atom	distance	atom	atom	distance
Ir(1)	P(1)	2.365(2)	Ir(1)	N(1)	2.086(8)
Ir(1)	N(2)	2.066(8)	Ir(1)	C(5)	2.249(9)
Ir(1)	C(6)	2.206(9)	Ir(1)	C(7)	2.222(8)
Ir(1)	C(8)	2.182(8)	Ir(1)	C(9)	2.226(9)
S(1)	O(1)	1.394(8)	S(1)	O(2)	1.352(9)
S(1)	O(3)	1.71(1)	S(1)	C(33)	1.68(1)
S(2)	O(4)	1.23(2)	S(2)	O(5)	1.70(3)
S(2)	O(6)	1.34(2)	S(2)	C(34)	1.54(6)
P(1)	C(15)	1.827(8)	P(1)	C(21)	1.828(8)
P(1)	C(27)	1.811(8)	F(1)	C(33)	1.32(1)
F(2)	C(33)	1.54(2)	F(3)	C(33)	1.21(1)
F(4)	C(34)	1.16(3)	F(5)	C(34)	1.17(5)
F(6)	C(34)	1.40(6)	O(7)	C(36)	0.9125(4)
N(1)	C(2)	1.12(1)	N(2)	C(4)	1.08(1)
C(1)	C(2)	1.42(1)	C(1)	H(7)	0.8
C(1)	H(8)	1.0	C(1)	H(9)	1.0
C(3)	C(4)	1.47(2)	C(3)	H(13)	1.0
C(3)	H(14)	0.9	C(3)	H(15)	1.0
C(5)	C(6)	1.47(1)	C(5)	C(9)	1.42(1)
C(5)	C(10)	1.49(1)	C(6)	C(7)	1.43(1)
C(6)	C(11)	1.47(1)	C(7)	C(8)	1.44(1)
C(7)	C(12)	1.50(1)	C(8)	C(9)	1.44(1)
C(8)	C(13)	1.48(1)	C(9)	C(14)	1.51(1)
C(10)	H(19)	1.0	C(10)	H(20)	0.9
C(10)	H(21)	0.9	C(11)	H(1)	0.9
C(11)	H(2)	1.0	C(11)	H(3)	1.0
C(12)	H(4)	1.0	C(12)	H(5)	0.9
C(12)	H(6)	0.9	C(13)	H(10)	0.9
C(13)	H(11)	0.9	C(13)	H(12)	1.0
C(14)	H(16)	0.9	C(14)	H(17)	1.0
C(14)	H(18)	0.9	C(15)	C(16)	1.35(1)
C(15)	C(20)	1.39(1)	C(16)	C(17)	1.41(1)
C(16)	H(23)	1.0	C(17)	C(18)	1.35(2)
C(17)	H(25)	0.9	C(18)	C(19)	1.37(2)
C(18)	H(34)	1.0	C(19)	C(20)	1.38(1)
C(19)	H(30)	0.9	C(20)	H(35)	1.0
C(21)	C(22)	1.38(1)	C(21)	C(26)	1.39(1)
C(22)	C(23)	1.36(1)	C(22)	H(22)	1.0
C(23)	C(24)	1.37(1)	C(23)	H(27)	0.9

C(24)	C(25)	1.41(1)	C(24)	H(32)	1.0
C(25)	C(26)	1.37(1)	C(25)	H(33)	1.0
C(26)	H(29)	0.9	C(27)	C(28)	1.41(1)
C(27)	C(32)	1.40(1)	C(28)	C(29)	1.38(1)
C(28)	H(31)	1.0	C(29)	C(30)	1.37(2)
C(29)	H(28)	1.0	C(30)	C(31)	1.33(2)
C(30)	H(24)	0.9	C(31)	C(32)	1.39(1)
C(31)	H(26)	1.0	C(32)	H(36)	1.0
C(35)	C(36)	1.4113(1)	C(35)	H(37)	1.0
C(35)	H(38)	0.8	C(35)	H(39)	1.0
C(36)	C(37)	1.2498(5)	C(37)	H(40)	1.1
C(37)	H(41)	0.9	C(37)	H(42)	0.8

Table S25. Bond Angles(^o) for **8b·C₃H₆O**

atom	atom	atom	angle	atom	atom	atom	angle
P(1)	Ir(1)	N(1)	89.7(2)	P(1)	Ir(1)	N(2)	88.0(2)
P(1)	Ir(1)	C(5)	153.7(3)	P(1)	Ir(1)	C(6)	115.5(3)
P(1)	Ir(1)	C(7)	98.3(2)	P(1)	Ir(1)	C(8)	114.1(3)
P(1)	Ir(1)	C(9)	151.8(3)	N(1)	Ir(1)	N(2)	85.4(3)
N(1)	Ir(1)	C(5)	93.0(3)	N(1)	Ir(1)	C(6)	102.1(3)
N(1)	Ir(1)	C(7)	138.0(3)	N(1)	Ir(1)	C(8)	155.7(4)
N(1)	Ir(1)	C(9)	118.4(4)	N(2)	Ir(1)	C(5)	118.3(4)
N(2)	Ir(1)	C(6)	155.0(3)	N(2)	Ir(1)	C(7)	135.7(3)
N(2)	Ir(1)	C(8)	99.7(3)	N(2)	Ir(1)	C(9)	92.2(3)
C(5)	Ir(1)	C(6)	38.4(3)	C(5)	Ir(1)	C(7)	63.1(3)
C(5)	Ir(1)	C(8)	63.6(4)	C(5)	Ir(1)	C(9)	37.0(3)
C(6)	Ir(1)	C(7)	37.8(3)	C(6)	Ir(1)	C(8)	64.1(3)
C(6)	Ir(1)	C(9)	63.2(4)	C(7)	Ir(1)	C(8)	38.0(3)
C(7)	Ir(1)	C(9)	62.8(3)	C(8)	Ir(1)	C(9)	38.2(3)
O(1)	S(1)	O(2)	127.3(7)	O(1)	S(1)	O(3)	106.7(7)
O(1)	S(1)	C(33)	109.2(7)	O(2)	S(1)	O(3)	112.4(9)
O(2)	S(1)	C(33)	111.9(8)	O(3)	S(1)	C(33)	79(1)
O(4)	S(2)	O(5)	114(2)	O(4)	S(2)	O(6)	117(3)
O(4)	S(2)	C(34)	108(3)	O(5)	S(2)	O(6)	125(2)
O(5)	S(2)	C(34)	81(2)	O(6)	S(2)	C(34)	101(3)
Ir(1)	P(1)	C(15)	113.1(3)	Ir(1)	P(1)	C(21)	115.5(3)
Ir(1)	P(1)	C(27)	113.1(3)	C(15)	P(1)	C(21)	101.7(4)
C(15)	P(1)	C(27)	105.4(4)	C(21)	P(1)	C(27)	106.9(4)
Ir(1)	N(1)	C(2)	173.4(8)	Ir(1)	N(2)	C(4)	178(1)
C(2)	C(1)	H(7)	112	C(2)	C(1)	H(8)	103
C(2)	C(1)	H(9)	105	H(7)	C(1)	H(8)	113

H(7)	C(1)	H(9)	116	H(8)	C(1)	H(9)	103
N(1)	C(2)	C(1)	178(1)	C(4)	C(3)	H(13)	110
C(4)	C(3)	H(14)	113	C(4)	C(3)	H(15)	110
H(13)	C(3)	H(14)	108	H(13)	C(3)	H(15)	104
H(14)	C(3)	H(15)	108	N(2)	C(4)	C(3)	178(1)
Ir(1)	C(5)	C(6)	69.2(5)	Ir(1)	C(5)	C(9)	70.6(5)
Ir(1)	C(5)	C(10)	124.8(6)	C(6)	C(5)	C(9)	107.1(9)
C(6)	C(5)	C(10)	124(1)	C(9)	C(5)	C(10)	128(1)
Ir(1)	C(6)	C(5)	72.4(5)	Ir(1)	C(6)	C(7)	71.7(5)
Ir(1)	C(6)	C(11)	132.4(6)	C(5)	C(6)	C(7)	107.5(9)
C(5)	C(6)	C(11)	125(1)	C(7)	C(6)	C(11)	126.0(9)
Ir(1)	C(7)	C(6)	70.5(5)	Ir(1)	C(7)	C(8)	69.5(5)
Ir(1)	C(7)	C(12)	129.4(6)	C(6)	C(7)	C(8)	108.5(8)
C(6)	C(7)	C(12)	124.5(8)	C(8)	C(7)	C(12)	126.8(8)
Ir(1)	C(8)	C(7)	72.5(4)	Ir(1)	C(8)	C(9)	72.6(5)
Ir(1)	C(8)	C(13)	131.3(7)	C(7)	C(8)	C(9)	107.2(9)
C(7)	C(8)	C(13)	127.8(9)	C(9)	C(8)	C(13)	123.5(9)
Ir(1)	C(9)	C(5)	72.4(5)	Ir(1)	C(9)	C(8)	69.3(5)
Ir(1)	C(9)	C(14)	125.6(7)	C(5)	C(9)	C(8)	109.4(9)
C(5)	C(9)	C(14)	127(1)	C(8)	C(9)	C(14)	123(1)
C(5)	C(10)	H(19)	107	C(5)	C(10)	H(20)	111
C(5)	C(10)	H(21)	110	H(19)	C(10)	H(20)	107
H(19)	C(10)	H(21)	106	H(20)	C(10)	H(21)	112
C(6)	C(11)	H(1)	111	C(6)	C(11)	H(2)	109
C(6)	C(11)	H(3)	110	H(1)	C(11)	H(2)	108
H(1)	C(11)	H(3)	109	H(2)	C(11)	H(3)	106
C(7)	C(12)	H(4)	107	C(7)	C(12)	H(5)	109
C(7)	C(12)	H(6)	108	H(4)	C(12)	H(5)	110
H(4)	C(12)	H(6)	108	H(5)	C(12)	H(6)	112
C(8)	C(13)	H(10)	109	C(8)	C(13)	H(11)	108
C(8)	C(13)	H(12)	108	H(10)	C(13)	H(11)	110
H(10)	C(13)	H(12)	109	H(11)	C(13)	H(12)	108
C(9)	C(14)	H(16)	109	C(9)	C(14)	H(17)	109
C(9)	C(14)	H(18)	109	H(16)	C(14)	H(17)	108
H(16)	C(14)	H(18)	109	H(17)	C(14)	H(18)	109
P(1)	C(15)	C(16)	119.4(7)	P(1)	C(15)	C(20)	123.1(7)
C(16)	C(15)	C(20)	117.5(8)	C(15)	C(16)	C(17)	122.0(9)
C(15)	C(16)	H(23)	120	C(17)	C(16)	H(23)	117
C(16)	C(17)	C(18)	119(1)	C(16)	C(17)	H(25)	121
C(18)	C(17)	H(25)	119	C(17)	C(18)	C(19)	121(1)
C(17)	C(18)	H(34)	123	C(19)	C(18)	H(34)	115
C(18)	C(19)	C(20)	119(1)	C(18)	C(19)	H(30)	122

C(20)	C(19)	H(30)	118	C(15)	C(20)	C(19)	122(1)
C(15)	C(20)	H(35)	120	C(19)	C(20)	H(35)	117
P(1)	C(21)	C(22)	121.3(6)	P(1)	C(21)	C(26)	119.3(7)
C(22)	C(21)	C(26)	119.3(8)	C(21)	C(22)	C(23)	121.8(9)
C(21)	C(22)	H(22)	119	C(23)	C(22)	H(22)	118
C(22)	C(23)	C(24)	119(1)	C(22)	C(23)	H(27)	122
C(24)	C(23)	H(27)	118	C(23)	C(24)	C(25)	120.2(9)
C(23)	C(24)	H(32)	122	C(25)	C(24)	H(32)	117
C(24)	C(25)	C(26)	119.4(9)	C(24)	C(25)	H(33)	120
C(26)	C(25)	H(33)	120	C(21)	C(26)	C(25)	119.8(9)
C(21)	C(26)	H(29)	121	C(25)	C(26)	H(29)	119
P(1)	C(27)	C(28)	118.9(7)	P(1)	C(27)	C(32)	123.4(7)
C(28)	C(27)	C(32)	117.7(8)	C(27)	C(28)	C(29)	120.2(9)
C(27)	C(28)	H(31)	119	C(29)	C(28)	H(31)	119
C(28)	C(29)	C(30)	121(1)	C(28)	C(29)	H(28)	119
C(30)	C(29)	H(28)	120	C(29)	C(30)	C(31)	120(1)
C(29)	C(30)	H(24)	120	C(31)	C(30)	H(24)	119
C(30)	C(31)	C(32)	122(1)	C(30)	C(31)	H(26)	120
C(32)	C(31)	H(26)	118	C(27)	C(32)	C(31)	119.7(9)
C(27)	C(32)	H(36)	120	C(31)	C(32)	H(36)	119
S(1)	C(33)	F(1)	116(1)	S(1)	C(33)	F(2)	89(1)
S(1)	C(33)	F(3)	123(1)	F(1)	C(33)	F(2)	104(2)
F(1)	C(33)	F(3)	116(1)	F(2)	C(33)	F(3)	102(2)
S(2)	C(34)	F(4)	115(6)	S(2)	C(34)	F(5)	115(4)
S(2)	C(34)	F(6)	102(4)	F(4)	C(34)	F(5)	108(4)
F(4)	C(34)	F(6)	104(4)	F(5)	C(34)	F(6)	114(8)
C(36)	C(35)	H(37)	104	C(36)	C(35)	H(38)	118
C(36)	C(35)	H(39)	98	H(37)	C(35)	H(38)	113
H(37)	C(35)	H(39)	100	H(38)	C(35)	H(39)	118
O(7)	C(36)	C(35)	116.632(5)	O(7)	C(36)	C(37)	134.51(2)
C(35)	C(36)	C(37)	108.83(2)	C(36)	C(37)	H(40)	102
C(36)	C(37)	H(41)	106	C(36)	C(37)	H(42)	116
H(40)	C(37)	H(41)	98	H(40)	C(37)	H(42)	106
H(41)	C(37)	H(42)	122				

References

(1) Kuhn, N.; Kratz, T. *Synthesis* **1993**, 561.

(2) Saba, S.; Brescia, A.-M.; Kaloustian, M. K. *Tetrahedron Lett.* **1991**, 32, 5031.