Inorganic Chemistry
including bioinorganic chemistry
Inorg. Chem., 1997, 36(1), 64-69, DOI:10.1021/ic960358p

Table S1. Atomic Coordinates (x10^4) and Equivalent Isotropic Displacement Coefficients ($Å^2$x10^3) for Ru(η^1-PhL)(PPh_3)$_2$(CO)(η^2-NO_2)

p1 of 10 pp

	x	y	z	U(eq)[a]
Ru	2232(1)	2056(1)	1330(1)	32(1)
P(1)	2395(1)	114(1)	1115(1)	35(1)
P(2)	2034(1)	3994(1)	1542(1)	40(1)
O(4)	1087(2)	1605(3)	1329(2)	48(2)
O(3)	1797(2)	1695(3)	2260(2)	50(2)
O(1)	3395(2)	2842(3)	288(2)	50(1)
O(2)	3819(2)	2498(3)	1775(2)	56(2)
N(2)	1146(3)	1503(4)	1958(3)	59(2)
N(1)	3676(3)	3768(4)	-795(2)	59(2)
C(1)	1840(3)	-353(4)	330(3)	38(2)
C(2)	1082(3)	-510(5)	258(3)	49(2)
C(3)	665(3)	-841(5)	-354(3)	60(3)
C(4)	988(4)	-965(6)	-897(3)	66(3)
C(5)	1718(4)	-758(5)	-848(3)	65(3)
C(6)	2140(3)	-469(5)	-244(3)	48(2)
C(7)	3310(3)	-399(5)	1055(3)	45(2)
C(8)	3527(3)	-1472(6)	1256(3)	67(3)
C(9)	4197(4)	-1865(7)	1188(5)	96(4)
C(10)	4678(4)	-1189(8)	937(5)	108(5)
C(11)	4475(4)	-133(7)	735(4)	87(4)
C(12)	3801(3)	271(6)	797(3)	60(3)
C(13)	2157(3)	-798(5)	1772(3)	40(2)
C(14)	1651(3)	-1647(5)	1691(3)	59(3)
C(15)	1505(4)	-2222(6)	2235(5)	81(4)
C(16)	1867(5)	-1964(7)	2861(4)	87(4)
C(17)	2395(5)	-1149(6)	2959(3)	79(3)
C(18)	2536(4)	-560(5)	2418(3)	60(3)
C(19)	2603(3)	4538(5)	2312(3)	44(2)
C(20)	2773(3)	3873(5)	2871(3)	57(3)
C(21)	3199(4)	4275(7)	3458(3)	76(3)
C(22)	3478(4)	5332(6)	3495(4)	72(3)
C(23)	3317(4)	5995(6)	2946(4)	77(3)
C(24)	2875(4)	5614(5)	2359(3)	61(3)
C(25)	1085(3)	4275(5)	1630(3)	50(2)
C(26)	539(4)	4106(6)	1079(4)	71(3)
C(27)	-180(5)	4299(7)	1121(5)	94(4)
C(28)	-354(5)	4638(8)	1715(6)	104(5)
C(29)	185(5)	4805(7)	2257(5)	95(4)
C(30)	912(4)	4622(6)	2224(3)	68(3)
C(31)	2228(3)	5007(5)	924(3)	46(2)
C(32)	1727(4)	5763(5)	595(3)	72(3)
C(33)	1928(5)	6514(6)	133(4)	85(4)
C(34)	2620(6)	6511(7)	18(4)	96(4)
C(35)	3132(5)	5785(6)	353(4)	90(4)
C(36)	2930(4)	5033(5)	800(3)	71(3)
C(37)	2147(3)	2396(4)	325(3)	37(2)
C(38)	2677(3)	2762(4)	-26(3)	38(2)
C(39)	2476(3)	3084(5)	-707(3)	43(2)
C(40)	1754(3)	2967(5)	-1047(3)	50(2)
C(41)	1228(3)	2557(5)	-719(3)	45(2)
C(42)	1437(3)	2296(4)	-46(3)	39(2)
C(43)	446(3)	2386(6)	-1077(3)	65(3)
C(44)	3011(3)	3566(5)	-1063(3)	50(2)

	x	y	z	U(eq) [a]
C(45)	4150(3)	4277(6)	-1192(3)	57(3)
C(46)	4554(4)	5221(7)	-942(4)	87(4)
C(47)	4991(5)	5751(7)	-1321(4)	103(4)
C(48)	5038(4)	5343(8)	-1937(4)	90(4)
C(49)	4672(4)	4398(7)	-2170(3)	76(3)
C(50)	4215(4)	3847(6)	-1810(3)	66(3)
C(51)	3205(3)	2330(4)	1567(3)	43(2)

[a] Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

Table S2. Bond Lengths (Å) for $Ru(\eta^1\text{-PhL})(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}NO_2)$

Ru-P(1)	2.391 (2)	Ru-P(2)	2.397 (2)
Ru-O(4)	2.196 (4)	Ru-O(3)	2.239 (4)
Ru-C(37)	2.062 (5)	Ru-C(51)	1.811 (6)
P(1)-C(1)	1.814 (5)	P(1)-C(7)	1.834 (6)
P(1)-C(13)	1.845 (6)	P(2)-C(19)	1.833 (6)
P(2)-C(25)	1.839 (6)	P(2)-C(31)	1.831 (6)
O(4)-N(2)	1.270 (7)	O(3)-N(2)	1.268 (7)
O(1)-C(38)	1.369 (6)	O(2)-C(51)	1.155 (6)
N(1)-C(44)	1.274 (7)	N(1)-C(45)	1.440 (9)
C(1)-C(2)	1.402 (8)	C(1)-C(6)	1.396 (9)
C(2)-C(3)	1.392 (8)	C(3)-C(4)	1.362 (11)
C(4)-C(5)	1.365 (11)	C(5)-C(6)	1.368 (8)
C(7)-C(8)	1.382 (9)	C(7)-C(12)	1.392 (9)
C(8)-C(9)	1.364 (11)	C(9)-C(10)	1.375 (13)
C(10)-C(11)	1.357 (13)	C(11)-C(12)	1.372 (10)
C(13)-C(14)	1.371 (8)	C(13)-C(18)	1.398 (8)
C(14)-C(15)	1.374 (11)	C(15)-C(16)	1.358 (12)
C(16)-C(17)	1.369 (12)	C(17)-C(18)	1.373 (10)
C(19)-C(20)	1.374 (8)	C(19)-C(24)	1.379 (9)
C(20)-C(21)	1.385 (9)	C(21)-C(22)	1.362 (11)
C(22)-C(23)	1.355 (11)	C(23)-C(24)	1.390 (9)
C(25)-C(26)	1.375 (9)	C(25)-C(30)	1.375 (10)
C(26)-C(27)	1.375 (12)	C(27)-C(28)	1.372 (16)
C(28)-C(29)	1.355 (13)	C(29)-C(30)	1.383 (12)
C(31)-C(32)	1.376 (9)	C(31)-C(36)	1.376 (11)
C(32)-C(33)	1.402 (11)	C(33)-C(34)	1.351 (16)
C(34)-C(35)	1.370 (12)	C(35)-C(36)	1.381 (11)
C(37)-C(38)	1.397 (8)	C(37)-C(42)	1.394 (7)
C(38)-C(39)	1.416 (7)	C(39)-C(40)	1.395 (8)
C(39)-C(44)	1.459 (9)	C(40)-C(41)	1.376 (9)
C(41)-C(42)	1.387 (7)	C(41)-C(43)	1.510 (8)
C(45)-C(46)	1.395 (10)	C(45)-C(50)	1.385 (9)
C(46)-C(47)	1.378 (12)	C(47)-C(48)	1.364 (12)
C(48)-C(49)	1.356 (12)	C(49)-C(50)	1.391 (11)

Table S3. Bond Angles (°) for $Ru(\eta^1\text{-PhL})(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}NO_2)$

P(1)-Ru-P(2)	178.5(1)	P(1)-Ru-O(4)	85.4(1)
P(2)-Ru-O(4)	93.2(1)	P(1)-Ru-O(3)	92.7(1)
P(2)-Ru-O(3)	86.6(1)	O(4)-Ru-O(3)	56.3(1)
P(1)-Ru-C(37)	89.8(2)	P(2)-Ru-C(37)	90.2(2)
O(4)-Ru-C(37)	99.1(2)	O(3)-Ru-C(37)	154.9(2)
P(1)-Ru-C(51)	93.9(2)	P(2)-Ru-C(51)	87.6(2)
O(4)-Ru-C(51)	164.5(2)	O(3)-Ru-C(51)	108.4(2)
C(37)-Ru-C(51)	96.3(2)	Ru-P(1)-C(1)	112.9(2)
Ru-P(1)-C(7)	119.3(2)	C(1)-P(1)-C(7)	102.4(3)
Ru-P(1)-C(13)	112.6(2)	C(1)-P(1)-C(13)	106.3(2)
C(7)-P(1)-C(13)	101.9(3)	Ru-P(2)-C(19)	114.4(2)
Ru-P(2)-C(25)	112.2(2)	C(19)-P(2)-C(25)	104.9(3)
Ru-P(2)-C(31)	117.2(2)	C(19)-P(2)-C(31)	101.3(3)
C(25)-P(2)-C(31)	105.5(3)	Ru-O(4)-N(2)	97.3(3)
Ru-O(3)-N(2)	95.3(3)	O(4)-N(2)-O(3)	111.1(5)
C(44)-N(1)-C(45)	119.3(5)	P(1)-C(1)-C(2)	121.5(4)
P(1)-C(1)-C(6)	121.1(4)	C(2)-C(1)-C(6)	117.1(5)
C(1)-C(2)-C(3)	120.4(6)	C(2)-C(3)-C(4)	120.1(6)
C(3)-C(4)-C(5)	120.6(6)	C(4)-C(5)-C(6)	120.0(7)
C(1)-C(6)-C(5)	121.7(6)	P(1)-C(7)-C(8)	120.8(5)
P(1)-C(7)-C(12)	121.1(5)	C(8)-C(7)-C(12)	118.0(6)
C(7)-C(8)-C(9)	120.7(7)	C(8)-C(9)-C(10)	120.5(8)
C(9)-C(10)-C(11)	119.7(8)	C(10)-C(11)-C(12)	120.4(8)
C(7)-C(12)-C(11)	120.6(6)	P(1)-C(13)-C(14)	127.3(4)
P(1)-C(13)-C(18)	114.5(4)	C(14)-C(13)-C(18)	118.3(6)
C(13)-C(14)-C(15)	120.7(6)	C(14)-C(15)-C(16)	120.2(7)
C(15)-C(16)-C(17)	120.7(8)	C(16)-C(17)-C(18)	119.4(6)
C(13)-C(18)-C(17)	120.6(6)	P(2)-C(19)-C(20)	120.5(4)
P(2)-C(19)-C(24)	122.2(4)	C(20)-C(19)-C(24)	117.3(5)
C(19)-C(20)-C(21)	121.1(6)	C(20)-C(21)-C(22)	121.1(7)
C(21)-C(22)-C(23)	118.4(6)	C(22)-C(23)-C(24)	121.2(7)
C(19)-C(24)-C(23)	120.9(6)	P(2)-C(25)-C(26)	117.7(5)
P(2)-C(25)-C(30)	122.2(5)	C(26)-C(25)-C(30)	120.0(6)
C(25)-C(26)-C(27)	119.9(7)	C(26)-C(27)-C(28)	120.1(8)
C(27)-C(28)-C(29)	119.9(8)	C(28)-C(29)-C(30)	120.9(9)
C(25)-C(30)-C(29)	119.2(6)	P(2)-C(31)-C(32)	124.3(6)
P(2)-C(31)-C(36)	117.5(4)	C(32)-C(31)-C(36)	118.2(6)
C(31)-C(32)-C(33)	120.2(8)	C(32)-C(33)-C(34)	120.1(7)
C(33)-C(34)-C(35)	120.6(8)	C(34)-C(35)-C(36)	119.2(9)
C(31)-C(36)-C(35)	121.6(7)	Ru-C(37)-C(38)	130.1(4)
Ru-C(37)-C(42)	113.8(4)	C(38)-C(37)-C(42)	115.9(5)
O(1)-C(38)-C(37)	120.2(4)	O(1)-C(38)-C(39)	119.2(5)
C(37)-C(38)-C(39)	120.5(5)	C(38)-C(39)-C(40)	120.4(5)
C(38)-C(39)-C(44)	121.2(5)	C(40)-C(39)-C(44)	118.4(5)
C(39)-C(40)-C(41)	120.0(5)	C(40)-C(41)-C(42)	118.1(5)
C(40)-C(41)-C(43)	121.5(5)	C(42)-C(41)-C(43)	120.4(5)
C(37)-C(42)-C(41)	124.9(5)	N(1)-C(44)-C(39)	124.1(5)
N(1)-C(45)-C(46)	118.8(6)	N(1)-C(45)-C(50)	121.5(6)
C(46)-C(45)-C(50)	119.7(7)	C(45)-C(46)-C(47)	120.1(7)
C(46)-C(47)-C(48)	120.0(8)	C(47)-C(48)-C(49)	120.2(8)
C(48)-C(49)-C(50)	121.7(7)	C(45)-C(50)-C(49)	118.2(6)
Ru-C(51)-O(2)	174.1(5)		

Table S4. Anisotropic Displacement Coefficients ($Å^2x10^3$) for $Ru(\eta^1\text{-PhL})(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}NO_2)$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ru	35(1)	33(1)	29(1)	-4(1)	6(1)	1(1)
P(1)	34(1)	34(1)	37(1)	-4(1)	8(1)	0(1)
P(2)	44(1)	35(1)	39(1)	2(1)	4(1)	-1(1)
O(4)	42(2)	54(3)	49(3)	-3(2)	15(2)	-3(2)
O(3)	61(3)	55(3)	36(2)	-3(2)	14(2)	-3(2)
O(1)	41(2)	68(3)	42(2)	-12(2)	6(2)	12(2)
O(2)	44(2)	64(3)	56(3)	-12(2)	0(2)	7(2)
N(2)	66(4)	60(4)	52(4)	-3(3)	16(3)	-3(3)
N(1)	57(3)	81(4)	42(3)	-16(3)	16(3)	10(3)
C(1)	43(4)	25(3)	44(3)	0(3)	6(3)	-6(3)
C(2)	37(4)	49(4)	58(4)	8(3)	-1(3)	-9(3)
C(3)	46(4)	54(4)	72(5)	1(3)	-10(4)	-8(4)
C(4)	80(6)	60(5)	48(4)	4(4)	-10(4)	-10(3)
C(5)	92(6)	63(5)	41(4)	-1(4)	14(4)	-8(3)
C(6)	56(4)	46(4)	42(4)	-6(3)	9(3)	-6(3)
C(7)	44(4)	44(4)	50(4)	-4(3)	12(3)	-7(3)
C(8)	47(4)	56(4)	102(6)	10(4)	20(4)	5(4)
C(9)	62(5)	64(6)	162(8)	28(5)	25(5)	4(5)
C(10)	49(5)	102(8)	180(10)	21(5)	41(6)	-9(7)
C(11)	53(5)	85(6)	136(7)	-7(5)	52(5)	-7(6)
C(12)	55(4)	57(4)	76(5)	-1(4)	30(4)	-2(4)
C(13)	47(4)	38(3)	37(3)	8(3)	15(3)	11(3)
C(14)	56(4)	43(4)	79(5)	-16(3)	13(4)	12(3)
C(15)	77(5)	64(5)	110(7)	-15(4)	38(5)	33(5)
C(16)	123(7)	68(6)	83(6)	17(6)	52(6)	36(5)
C(17)	125(7)	64(5)	49(4)	12(5)	19(5)	16(4)
C(18)	84(5)	46(4)	48(4)	-10(4)	8(4)	11(3)
C(19)	39(4)	40(4)	51(4)	3(3)	7(3)	-6(3)
C(20)	63(4)	47(4)	53(4)	-4(3)	-4(3)	-6(3)
C(21)	87(6)	74(6)	58(5)	10(5)	-11(4)	-7(4)
C(22)	62(5)	62(5)	77(5)	3(4)	-21(4)	-26(4)
C(23)	80(5)	53(5)	89(6)	-9(4)	-6(5)	-25(4)
C(24)	71(5)	45(4)	61(4)	-1(4)	0(4)	-5(3)
C(25)	39(4)	42(4)	66(4)	5(3)	4(3)	-4(3)
C(26)	53(5)	67(5)	82(5)	8(4)	-14(4)	-12(4)
C(27)	60(6)	92(7)	116(8)	1(5)	-22(5)	-10(6)
C(28)	40(5)	91(7)	179(11)	-1(5)	20(6)	10(7)
C(29)	82(6)	108(7)	106(7)	11(6)	48(6)	2(6)
C(30)	57(5)	78(5)	72(5)	5(4)	19(4)	-5(4)
C(31)	64(4)	26(3)	49(4)	3(3)	12(3)	4(3)
C(32)	107(6)	41(4)	61(5)	-6(4)	0(4)	4(4)
C(33)	123(8)	54(5)	65(5)	6(5)	-14(5)	20(4)
C(34)	178(10)	51(5)	65(5)	-13(7)	39(7)	9(4)
C(35)	133(8)	55(5)	95(6)	-10(5)	53(6)	0(5)
C(36)	102(6)	42(4)	78(5)	7(4)	44(5)	8(4)
C(37)	48(4)	35(3)	30(3)	-5(3)	9(3)	1(2)
C(38)	42(3)	38(4)	35(3)	-6(3)	7(3)	-1(3)
C(39)	50(4)	44(4)	36(3)	-7(3)	11(3)	1(3)
C(40)	57(4)	57(4)	32(3)	-6(4)	3(3)	4(3)
C(41)	43(4)	50(4)	39(3)	-3(3)	1(3)	5(3)
C(42)	46(3)	35(4)	35(3)	-8(3)	7(3)	0(3)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
C(43)	59(4)	79(5)	50(4)	-8(4)	-5(3)	14(3)
C(44)	56(4)	58(4)	37(3)	-9(3)	10(3)	8(3)
C(45)	48(4)	73(5)	49(4)	-9(4)	9(3)	14(4)
C(46)	82(6)	122(7)	58(5)	-41(5)	19(4)	-8(5)
C(47)	118(7)	108(7)	89(6)	-73(6)	33(6)	-18(5)
C(48)	82(6)	128(8)	65(5)	-49(6)	27(4)	3(5)
C(49)	67(5)	113(7)	53(4)	-23(5)	23(4)	-1(4)
C(50)	67(5)	77(5)	55(4)	-14(4)	18(4)	-2(4)
C(51)	52(4)	33(4)	43(3)	-2(3)	8(3)	1(3)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
$-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \ldots + 2hka^*b^*U_{12})$

Table S5. H-atom Coordinates ($x10^4$) and Isotropic Displacement Coefficients ($Å^2x10^3$) for $Ru(\eta^1\text{-PhL})(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}NO_2)$

	x	y	z	U
H(1O)	3730	3104	61	80
H(2B)	853	-384	636	80
H(3B)	149	-969	-395	80
H(4A)	701	-1213	-1315	80
H(5A)	1938	-821	-1236	80
H(6A)	2653	-326	-212	80
H(8A)	3204	-1932	1455	80
H(9A)	4326	-2630	1299	80
H(10A)	5158	-1459	911	80
H(11A)	4806	331	548	80
H(12A)	3657	1021	662	80
H(14A)	1405	-1851	1248	80
H(15A)	1142	-2804	2173	80
H(16A)	1744	-2348	3238	80
H(17A)	2673	-1007	3399	80
H(18A)	2894	30	2483	80
H(20A)	2587	3122	2849	80
H(21A)	3297	3797	3844	80
H(22A)	3788	5592	3899	80
H(23A)	3505	6745	2970	80
H(24A)	2755	6096	1976	80
H(26A)	655	3842	667	80
H(27A)	-567	4201	738	80
H(28A)	-856	4765	1746	80
H(29A)	63	5055	2670	80
H(30A)	1296	4730	2607	80
H(32A)	1242	5782	691	80
H(33A)	1581	7035	-107	80
H(34A)	2755	7014	-305	80
H(35A)	3627	5798	280	80
H(36A)	3283	4523	1042	80
H(40A)	1625	3180	-1510	80
H(42A)	1065	2026	182	80
H(43A)	165	2091	-767	80
H(43B)	240	3088	-1250	80
H(43C)	434	1867	-1439	80
H(44A)	2853	3735	-1530	80
H(46A)	4533	5484	-501	80
H(47A)	5248	6425	-1162	80
H(48A)	5339	5712	-2204	80
H(49A)	4730	4096	-2594	80
H(50A)	3945	3193	-1986	80

Table S6. Atomic Coordinates (x10^4) and Equivalent Isotropic[a] Displacement Coefficients (Å^{2}x10^3) for Ru(η^1-PhL)(PPh_3)$_2$(CO)(η^2-NO_3).

	x	y	z	U(eq)[a]
Ru	2708(1)	2955(2)	3728(1)	26(1)
P(1)	2582(3)	4918(5)	3937(2)	32(2)
P(2)	2898(3)	1006(5)	3524(2)	34(2)
O(1)	1585(6)	2228(11)	4762(5)	45(6)
O(2)	1130(6)	2542(11)	3284(6)	52(6)
O(3)	3115(7)	3292(11)	2783(6)	36(6)
O(4)	3849(6)	3363(10)	3753(6)	39(5)
O(5)	4265(8)	3688(15)	2852(6)	78(8)
N(1)	1311(8)	1281(15)	5834(6)	49(7)
N(2)	3762(12)	3453(15)	3118(8)	50(9)
C(1)	2825(8)	5806(11)	3285(6)	41(5)
C(2)	3368	6636	3401	68(7)
C(3)	3550	7203	2863	82(8)
C(4)	3191	6940	2207	66(7)
C(5)	2649	6109	2090	81(8)
C(6)	2466	5543	2629	61(7)
C(7)	3150(7)	5320(11)	4747(5)	41(6)
C(8)	2826	5465	5294	45(6)
C(9)	3255	5763	5919	48(6)
C(10)	4008	5916	5996	53(6)
C(11)	4332	5771	5449	55(6)
C(12)	3903	5473	4824	39(6)
C(13)	1682(6)	5459(13)	3968(6)	41(6)
C(14)	1205	4785	4235	55(6)
C(15)	520	5202	4281	70(7)
C(16)	313	6293	4060	103(10)
C(17)	790	6967	3793	107(9)
C(18)	1475	6550	3747	72(7)
C(19)	3819(5)	756(12)	3460(7)	37(5)
C(20)	4370	920	4035	52(6)
C(21)	5103	806	4004	75(7)
C(22)	5286	530	3397	81(8)
C(23)	4736	367	2822	91(9)
C(24)	4002	480	2853	46(6)
C(25)	2345(6)	434(13)	2745(6)	37(6)
C(26)	2170	1127	2180	70(7)
C(27)	1746	707	1581	67(7)
C(28)	1497	-406	1547	80(8)
C(29)	1672	-1100	2112	72(7)
C(30)	2096	-680	2711	72(8)
C(31)	2705(8)	5(11)	4137(6)	44(6)
C(32)	3227	-751	4481	64(7)
C(33)	3040	-1509	4938	74(8)
C(34)	2332	-1512	5052	58(7)
C(35)	1811	-755	4708	71(7)
C(36)	1997	3	4250	58(6)
C(37)	2806(9)	2631(14)	4733(7)	22(5)
C(38)	2299(9)	2273(17)	5090(8)	41(5)
C(39)	2502(9)	1939(18)	5768(8)	34(5)
C(40)	3224(9)	1979(18)	6103(9)	44(5)
C(41)	3742(10)	2443(15)	5796(8)	35(5)
C(42)	3510(9)	2680(15)	5109(8)	32(5)
C(43)	4538(9)	2537(17)	6153(9)	59(7)
C(44)	1967(10)	1449(16)	6107(9)	46(6)

	x	y	z	U(eq) [a]
C(45)	842(11)	753(20)	6208(10)	59(7)
C(46)	470(12)	-252(21)	5955(11)	74(8)
C(47)	27(14)	-843(25)	6318(12)	108(10)
C(48)	-15(13)	-330(23)	6938(12)	90(9)
C(49)	366(12)	593(21)	7192(11)	69(8)
C(50)	820(11)	1121(19)	6848(9)	58(7)
C(51)	1743(9)	2700(15)	3482(7)	27(5)

[a] Equivalent isotropic U defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor

Table S7. Bond Lengths (Å) for $Ru(\eta^1\text{-PhL})(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}NO_3)$

Ru-P(1)	2.384 (6)	Ru-P(2)	2.386 (7)
Ru-O(3)	2.262 (14)	Ru-O(4)	2.179 (12)
Ru-C(37)	2.057 (15)	Ru-C(51)	1.790 (16)
P(1)-C(1)	1.832 (15)	P(1)-C(7)	1.821 (10)
P(1)-C(13)	1.816 (13)	P(2)-C(19)	1.782 (12)
P(2)-C(25)	1.825 (12)	P(2)-C(31)	1.817 (14)
O(1)-C(38)	1.357 (19)	O(2)-C(51)	1.145 (19)
O(3)-N(2)	1.268 (23)	O(4)-N(2)	1.276 (20)
O(5)-N(2)	1.217 (27)	N(1)-C(44)	1.246 (21)
N(1)-C(45)	1.430 (28)	C(37)-C(38)	1.384 (26)
C(37)-C(42)	1.373 (21)	C(38)-C(39)	1.409 (23)
C(39)-C(40)	1.374 (22)	C(39)-C(44)	1.457 (27)
C(40)-C(41)	1.379 (27)	C(41)-C(42)	1.402 (22)
C(41)-C(43)	1.512 (23)	C(45)-C(46)	1.417 (33)
C(45)-C(50)	1.387 (29)	C(46)-C(47)	1.414 (38)
C(47)-C(48)	1.422 (37)	C(48)-C(49)	1.346 (34)
C(49)-C(50)	1.367 (33)		

Table S8. Bond Angles (°) for $Ru(\eta^1\text{-PhL})(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}NO_3)$.

P(1)-Ru-P(2)	177.2(2)	P(1)-Ru-O(3)	92.7(4)
P(2)-Ru-O(3)	86.0(4)	P(1)-Ru-O(4)	85.1(4)
P(2)-Ru-O(4)	92.1(4)	O(3)-Ru-O(4)	57.9(4)
P(1)-Ru-C(37)	89.6(5)	P(2)-Ru-C(37)	90.6(5)
O(3)-Ru-C(37)	155.9(6)	O(4)-Ru-C(37)	98.5(5)
P(1)-Ru-C(51)	94.7(6)	P(2)-Ru-C(51)	88.1(6)
O(3)-Ru-C(51)	107.3(6)	O(4)-Ru-C(51)	165.2(6)
C(37)-Ru-C(51)	96.4(7)	Ru-P(1)-C(1)	112.3(5)
Ru-P(1)-C(7)	110.9(5)	C(1)-P(1)-C(7)	108.8(6)
Ru-P(1)-C(13)	118.6(5)	C(1)-P(1)-C(13)	101.8(7)
C(7)-P(1)-C(13)	103.7(6)	Ru-P(2)-C(19)	110.9(5)
Ru-P(2)-C(25)	115.7(5)	C(19)-P(2)-C(25)	104.3(6)
Ru-P(2)-C(31)	116.8(5)	C(19)-P(2)-C(31)	106.5(7)
C(25)-P(2)-C(31)	101.4(6)	Ru-O(3)-N(2)	91.5(11)
Ru-O(4)-N(2)	95.1(11)	C(44)-N(1)-C(45)	119.4(15)
O(3)-N(2)-O(4)	115.5(18)	O(3)-N(2)-O(5)	122.2(15)
O(4)-N(2)-O(5)	122.3(17)	P(1)-C(1)-C(2)	124.6(4)
P(1)-C(1)-C(6)	115.2(4)	P(1)-C(7)-C(8)	119.4(4)
P(1)-C(7)-C(12)	120.6(4)	P(1)-C(13)-C(14)	119.4(5)
P(1)-C(13)-C(18)	120.6(5)	P(2)-C(19)-C(20)	117.6(4)
P(2)-C(19)-C(24)	122.3(4)	P(2)-C(25)-C(26)	119.1(5)
P(2)-C(25)-C(30)	120.9(5)	P(2)-C(31)-C(32)	122.9(5)
P(2)-C(31)-C(36)	117.1(5)	Ru-C(37)-C(38)	131.5(11)
Ru-C(37)-C(42)	114.5(12)	C(38)-C(37)-C(42)	113.7(14)
O(1)-C(38)-C(37)	117.8(14)	O(1)-C(38)-C(39)	119.8(16)
C(37)-C(38)-C(39)	122.5(15)	C(38)-C(39)-C(40)	120.1(17)
C(38)-C(39)-C(44)	120.9(14)	C(40)-C(39)-C(44)	118.7(15)
C(39)-C(40)-C(41)	120.0(16)	C(40)-C(41)-C(42)	116.1(15)
C(40)-C(41)-C(43)	121.8(15)	C(42)-C(41)-C(43)	121.5(17)
C(37)-C(42)-C(41)	126.8(17)	N(1)-C(44)-C(39)	124.2(16)
N(1)-C(45)-C(46)	118.9(19)	N(1)-C(45)-C(50)	121.0(19)
C(46)-C(45)-C(50)	119.6(21)	C(45)-C(46)-C(47)	121.5(22)
C(46)-C(47)-C(48)	114.2(24)	C(47)-C(48)-C(49)	124.1(25)
C(48)-C(49)-C(50)	120.7(22)	C(45)-C(50)-C(49)	119.4(20)
Ru-C(51)-O(2)	175.7(14)		

Table S9. Anisotropic Displacement Coefficients ($Å^2x10^3$) for $Ru(\eta^1\text{-PhL})(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}NO_3)$

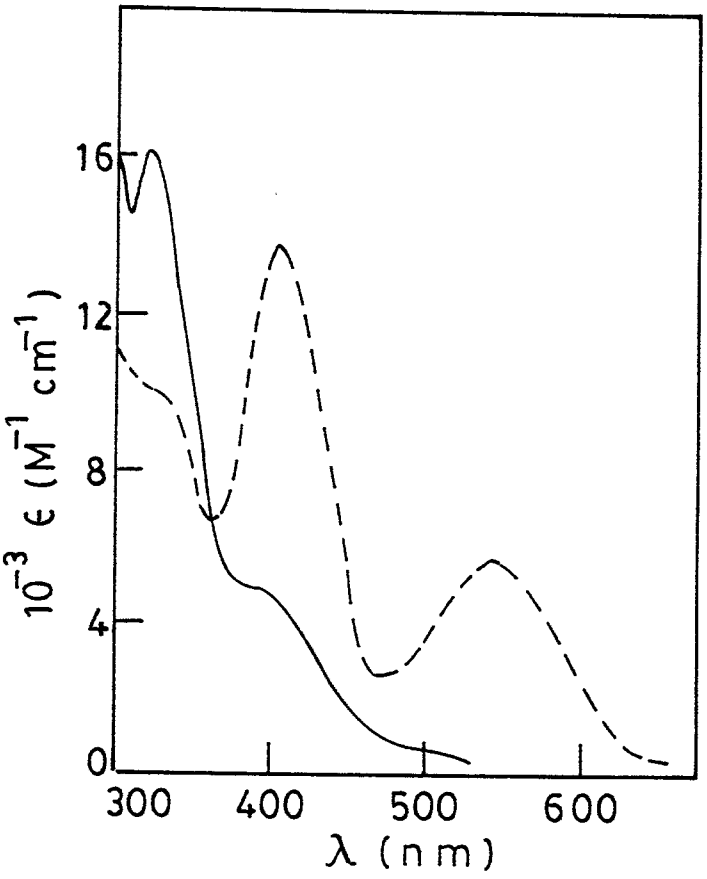
	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ru	32(1)	27(1)	22(1)	-4(1)	10(1)	3(1)
P(1)	31(4)	33(4)	32(3)	-1(4)	8(3)	2(3)
P(2)	32(4)	44(4)	27(3)	1(4)	7(3)	-8(3)
O(1)	57(9)	40(10)	43(8)	-9(9)	21(7)	0(8)
O(2)	30(8)	63(12)	58(8)	-20(8)	0(7)	-2(8)
O(3)	39(9)	34(11)	37(8)	-9(9)	11(7)	-3(8)
O(4)	50(9)	43(10)	25(7)	1(8)	10(7)	0(7)
O(5)	72(12)	129(16)	42(9)	-24(12)	31(9)	-10(10)
N(1)	34(10)	89(15)	28(9)	-31(11)	14(8)	7(10)
N(2)	74(16)	64(15)	22(11)	-20(14)	29(11)	-9(10)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11} + \ldots + 2hka^*b^*U_{12})$

Table S10. H-atom Coordinates (x10^4) and Isotropic Displacement Coefficients (Å^{2}x10^3) for Ru(η^1-PhL)(PPh_3)$_2$(CO)(η^2-NO_3).

	x	y	z	U
H(1O)	1243	1987	4978	80
H(2A)	3615	6817	3853	80
H(3A)	3924	7774	2943	80
H(4A)	3317	7330	1836	80
H(5A)	2402	5928	1639	80
H(6A)	2093	4971	2549	80
H(8A)	2308	5360	5241	80
H(9A)	3032	5863	6296	80
H(10A)	4303	6121	6426	80
H(11A)	4850	5877	5502	80
H(12A)	4126	5374	4447	80
H(14A)	1347	4034	4387	80
H(15A)	192	4738	4464	80
H(16A)	-158	6580	4091	80
H(17A)	648	7718	3641	80
H(18A)	1803	7014	3564	80
H(20A)	4244	1110	4452	80
H(21A)	5482	919	4400	80
H(22A)	5791	452	3376	80
H(23A)	4862	176	2405	80
H(24A)	3623	367	2458	80
H(26A)	2341	1893	2204	80
H(27A)	1625	1184	1193	80
H(28A)	1205	-696	1135	80
H(29A)	1501	-1866	2089	80
H(30A)	2217	-1157	3100	80
H(32A)	3714	-750	4402	80
H(33A)	3400	-2030	5175	80
H(34A)	2204	-2033	5367	80
H(35A)	1323	-757	4786	80
H(36A)	1638	523	4014	80
H(40A)	3367	1684	6550	80
H(42A)	3882	2900	4878	80
H(43A)	4590	2343	6617	80
H(43B)	4826	2031	5950	80
H(43C)	4703	3298	6119	80
H(44A)	2130	1242	6570	80
H(46A)	521	-538	5528	80
H(47A)	-225	-1530	6159	80
H(48A)	-336	-664	7191	80
H(49A)	319	884	7619	80
H(50A)	1121	1742	7047	80



Supplemental

Figure Electronic spectra of Ru(η^1-PhL)(PPh_3)$_2$(CO)(η^2-NO_2) (——) and Ru(η^2-PhL)(PPh_3)$_2$(CO)Cl (---) in dichloromethane solutions.