© 1999 American Chemical Society, J. Am. Chem. Soc., Huang ja990621w Supporting Info Page 1

Supplementary Material for

JA990621W

Fourteen-Electron Four-Coordinate Ru(II) Carbyl Complexes and Their Five-Coordinate Precursors: Synthesis, Double Agostic Interactions, and Reactivity

Dejian Huang, William E. Streib, John C. Bollinger, Kenneth G. Caulton, Rainer F. Winter, Thomas Scheiring

---

Crystallographic Data
Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters
Anisotropic Thermal Parameters
Bond Distances and Angles

Table S1. Crystallographic Data for [RuPh(CO)(Pt-$Bu_2Me)_2$]BAr'_4, RuClPh(CO)($P^tBu_2Me)_2$, $RuCl_2$(CO)($P^iPr_3)_2$ and RuHCl(CO)($P^iPr_3)_2$

Empirical Formula		$C_{57}H_{59}BF_{24}OP_2Ru$	$C_{25}H_{47}ClOP_2Ru$	$C_{19}H_{92}Cl_2OP_2Ru$	$C_{19}H_{43}ClOP_2Ru$
Color		Red at room temperature Orange at low temperature	orange	red	orange
Crystal Dimensions (mm)		0.20 x 0.32 x 0.40 mm	.35 x .33 x .30 mm		
Space Group		$P2_12_12_1$	$P\bar{1}$	Cc	$P2_1/c$
Cell Dimensions		(at -70 °C, 67 peaks)	(at -164 °C, 44 reflns)	(at 183 °K)	(at 173 °K)
	a =	18.176(3) Å	16.680(3)	21.867(4)	8.0675(5) Å
	b =	18.495(3) Å	17.037(4)	8.648(2)	8.9312(7) Å
	c =	18.090(3) Å	10.772(2)	15.033(2)	16.6316(10) Å
	α =		90.81(1)		
	β =		92.85(1)	119.755(11)	92.492(5)
	γ =		112.68(1)		
Z		4	4	4	2
Volume		6081.46	2819.10	2468.1(7)	1197.21(14)
Calculated Density		1.518	1.324	1.401	1.348
Wavelength[a]		.71069	.71069	0.71073	0.71073
Molecular Weight		1389.89	562.12	520.44	485.99
Linear Absorption Coefficient		4.227	7.7	9.9	6.9
Number of Unique Intensities		4419	7358	3675	3500
Number with F > 0.0		4272	6987		
Number with F > 3*σ(F)		3443			
Number with F > 2.33σ(F)			5696		
R for Averaging		.098	.042		
Final Residuals					
	R(F)[b]	.0618	.0655		
	R_w(F)[c]	.0620	.0464		
	R1			0.0265	.0341
	wR2			0.0727	.0664
Goodness of Fit for the last cycle		1.427	2.28	1.152	1.093
Maximum Δ/σ for last cycle		.10	.02		

[a] Graphite monochromator. [b] $R = \Sigma \| F_o| - |F_c \| / \Sigma |F_o|$ [c] $R_w = [\Sigma w(|F_o| - |F_c|)^2 / \Sigma w |F_o|^2]^{1/2}$ where $w = 1/\sigma^2(|F_o|)$

© 1999 American Chemical Society, J. Am. Chem. Soc., Huang ja990621w Supporting Info Page 2

Table S2. Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters for [RuPh(CO)(Pt-$Bu_2Me)_2$]BAr'_4

Atom	10^4x	10^4y	10^4z	10 B_{iso}
Ru(1)	2740(1)	2505(1)	2409.8(5)	15
C(2)	2832(12)	3055(9)	3225(8)	38
O(3)	2871(7)	3442(6)	3730(6)	40
C(4)	1609(6)	2511(10)	2445(7)	21
C(5)	1262(9)	2004(8)	2053(8)	26
C(6)	497(9)	1943(8)	2024(8)	24
C(7)	84(7)	2418(9)	2445(8)	30
C(8)	442(8)	2967(8)	2869(8)	22
C(9)	1186(10)	2999(8)	2843(7)	25
P(10)	2905(2)	1404(2)	3083(2)	28
C(11)	3926(9)	1432(9)	3164(9)	34
C(12)	4146(11)	1886(11)	3864(10)	46
C(13)	4166(9)	1840(9)	2462(10)	40
C(14)	4299(12)	703(11)	3183(10)	51
C(15)	2431(12)	1150(10)	3921(9)	47
C(16)	1622(12)	998(10)	3682(11)	47
C(17)	2793(17)	469(10)	4260(11)	75
C(18)	2407(13)	1776(10)	4473(11)	55
C(19)	2767(11)	615(9)	2444(9)	41
P(20)	2753(3)	3484(2)	1568(2)	28
C(21)	3338(11)	4273(10)	1712(10)	41
C(22)	2861(15)	4757(11)	2276(10)	60
C(23)	4095(11)	4062(11)	2028(11)	49
C(24)	3464(12)	4725(11)	1010(10)	49(4)
C(25)	3036(10)	2943(10)	729(9)	37
C(26)	3871(10)	2906(11)	658(9)	42
C(27)	2718(11)	3272(9)	-21(8)	39(3)
C(28)	2689(12)	2230(11)	841(8)	48
C(29)	1796(13)	3838(10)	1298(10)	51
B(30)	2354(8)	2449(9)	7463(6)	15
C(31)	2897(9)	3158(8)	7360(7)	19
C(32)	3090(7)	3644(7)	7931(7)	14
C(33)	3621(10)	4182(8)	7835(8)	28
C(34)	4000(8)	4259(8)	7158(9)	23
C(35)	3792(9)	3793(9)	6587(8)	25
C(36)	3292(8)	3277(8)	6690(7)	20
C(37)	3801(9)	4647(8)	8500(10)	27
F(38)	3215(6)	4908(5)	8809(5)	45
F(39)	4226(6)	5231(5)	8297(5)	45
F(40)	4178(6)	4304(5)	8995(5)	36
C(41)	4174(10)	3892(9)	5848(9)	30
F(42)	3881(10)	4420(8)	5476(7)	93
F(43)	4853(8)	4046(10)	5892(7)	93
F(44)	4133(10)	3315(7)	5435(7)	92
C(45)	1789(7)	2360(7)	6756(6)	15
C(46)	1627(7)	2893(7)	6239(7)	14
C(47)	1103(9)	2767(8)	5676(7)	24
C(48)	760(9)	2104(8)	5596(8)	20

C(49)	906(8)	1574(8)	6132(7)	21
C(50)	1410(9)	1706(7)	6688(7)	19
C(51)	940(9)	3366(9)	5145(8)	29
F(52)	635(7)	3930(5)	5435(5)	43
F(53)	1564(6)	3630(7)	4828(6)	61
F(54)	513(8)	3165(5)	4583(5)	60
C(55)	530(11)	869(10)	6066(9)	35
F(56)	747(10)	490(7)	5504(7)	86
F(57)	581(8)	486(6)	6675(6)	63
F(58)	-176(6)	955(6)	5960(7)	60
C(59)	2930(8)	1784(6)	7532(7)	13
C(60)	3098(8)	1334(7)	6938(7)	17
C(61)	3640(8)	792(7)	7009(7)	17
C(62)	4028(9)	689(8)	7648(9)	28
C(63)	3860(8)	1146(8)	8251(8)	23
C(64)	3326(8)	1672(8)	8184(7)	20
C(65)	3798(8)	335(8)	6331(7)	18
F(66)	4190(6)	679(6)	5835(5)	43
F(67)	3206(6)	115(5)	6005(5)	45
F(68)	4197(6)	-253(5)	6499(5)	41
C(69)	4257(10)	1068(8)	8966(9)	26
F(70)	3842(8)	838(9)	9480(6)	75
F(71)	4537(7)	1679(6)	9206(5)	58
F(72)	4788(9)	621(9)	8939(7)	95
C(73)	1812(7)	2558(8)	8179(6)	16
C(74)	1654(8)	1976(7)	8653(7)	18
C(75)	1128(8)	2052(7)	9228(7)	14(2)
C(76)	787(8)	2694(7)	9346(7)	21
C(77)	927(8)	3270(7)	8878(7)	16(3)
C(78)	1432(8)	3202(7)	8313(7)	14
C(79)	971(9)	1404(8)	9678(7)	24
F(80)	531(7)	1577(5)	10276(5)	47
F(81)	1559(6)	1075(5)	9935(5)	45
F(82)	579(8)	901(6)	9328(6)	57
C(83)	570(10)	3992(9)	9024(9)	30
F(84)	590(7)	4427(5)	8422(6)	52
F(85)	-147(6)	3918(6)	9148(6)	45
F(86)	840(7)	4325(7)	9586(7)	71

Notes:

1) Fractional coordinates are X 10**4 for nonhydrogen atoms and X 10**3 for hydrogen atoms. Biso values are X 10.
2) Isotropic values for those atoms refined anisotropically are calculated using the formula given by W. C. Hamilton, *Acta Cryst.* **1959**, *12*, 609.
3) Parameters marked by an asterisk (*) were not varied.

Table S3. Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters for $RuClPh(CO)(P^tBu_2Me)_2$

Atom	10^4x	10^4y	10^4z	$10\,B_{iso}$
Ru(1)	2804.4(4)	2650.7(4)	5396(1)	11
Cl(2)	2966(1)	4132(1)	5651(2)	20
P(3)	1668(1)	2471(1)	3814(2)	14
C(4)	1175(6)	3255(5)	3917(8)	20
C(5)	2225(5)	2724(5)	2301(7)	16
C(6)	1751(6)	3034(6)	1303(8)	24
C(7)	2358(6)	1939(6)	1775(8)	27
C(8)	3117(7)	3413(7)	2625(9)	31
C(9)	670(6)	1449(5)	3627(8)	20
C(10)	147(6)	1350(6)	2395(8)	26
C(11)	42(7)	1460(6)	4644(8)	30
C(12)	899(7)	681(6)	3825(9)	29
P(13)	4080(1)	2903(1)	6783(2)	13
C(14)	4042(6)	1934(5)	7528(7)	19
C(15)	5093(6)	3213(5)	5862(8)	20
C(16)	5922(6)	3447(6)	6655(9)	29
C(17)	5146(6)	3940(6)	5019(9)	27
C(18)	4993(7)	2436(7)	5031(9)	33
C(19)	4293(6)	3659(5)	8178(7)	18
C(20)	3420(6)	3507(6)	8701(7)	21
C(21)	4869(6)	3505(6)	9224(8)	26
C(22)	4725(6)	4599(6)	7820(9)	26
C(23)	1970(5)	2059(5)	6724(7)	16
C(24)	1881(5)	1294(5)	7261(7)	16
C(25)	1340(6)	976(5)	8221(7)	18
C(26)	848(6)	1400(5)	8660(7)	19
C(27)	917(6)	2158(5)	8132(7)	17
C(28)	1461(6)	2479(5)	7189(7)	16
C(29)	2866(5)	1640(6)	4949(7)	20
O(30)	2902(4)	1038(4)	4681(5)	18
Ru(1)'	7747.2(4)	2467.4(4)	559(1)	12
Cl(2)'	9319(2)	2840(1)	880(2)	23
P(3)'	7674(2)	1350(1)	-905(2)	16
C(4)'	8561(6)	993(5)	-608(8)	20
C(5)'	7912(6)	1851(5)	-2470(7)	21
C(6)'	8343(7)	1432(6)	-3337(8)	27
C(7)'	7088(6)	1884(6)	-3126(8)	25
C(8)'	8543(7)	2766(6)	-2193(8)	31
C(9)'	6711(6)	322(5)	-1059(7)	19
C(10)'	6685(6)	-220(6)	-2224(8)	25
C(11)'	6708(7)	-231(6)	66(8)	28
C(12)'	5850(6)	457(6)	-1070(8)	26
P(13)'	7872(1)	3695(1)	1842(2)	14
C(14)'	6845(6)	3568(6)	2457(8)	23
C(15)'	8124(6)	4666(5)	865(7)	19
C(16)'	8253(6)	5480(5)	1612(8)	24
C(17)'	8915(7)	4802(6)	133(8)	26
C(18)'	7343(6)	4487(6)	-65(8)	25
C(19)'	8604(6)	3980(5)	3310(8)	21
C(20)'	8557(7)	3148(6)	3875(8)	29

C(21)'	8353(7)	4494(6)	4281(8)	28
C(22)'	9566(6)	4493(6)	3038(8)	26
C(23)'	7200(5)	1633(5)	1914(7)	14
C(24)'	6376(6)	1413(5)	2330(7)	17
C(25)'	6072(6)	849(5)	3270(8)	20
C(26)'	6615(6)	489(5)	3831(7)	23
C(27)'	7407(7)	685(5)	3443(7)	22
C(28)'	7738(6)	1262(5)	2498(7)	20
C(29)'	6674(7)	2388(5)	1(8)	25
O(30)'	6055(4)	2375(4)	-350(5)	20
H(1)	162*	381*	393*	30
H(2)	78*	318*	322*	30
H(3)	87*	318*	466*	30
H(4)	178*	358*	154*	34
H(5)	202*	307*	54*	34
H(6)	116*	265*	120*	34
H(7)	210*	147*	229*	37
H(8)	210*	180*	96*	37
H(9)	296*	206*	176*	37
H(10)	342*	322*	324*	41
H(11)	344*	354*	190*	41
H(12)	305*	391*	293*	41
H(13)	-8*	178*	235*	36
H(14)	51*	140*	173*	36
H(15)	-32*	81*	234*	36
H(16)	37*	166*	541*	40
H(17)	-24*	183*	441*	40
H(18)	-38*	90*	473*	40
H(19)	38*	18*	374*	39
H(20)	129*	66*	322*	39
H(21)	117*	72*	463*	39
H(22)	367*	182*	820*	29
H(23)	383*	147*	694*	29
H(24)	461*	201*	784*	29
H(25)	587*	300*	720*	38
H(26)	639*	353*	614*	38
H(27)	603*	396*	713*	38
H(28)	521*	443*	551*	37
H(29)	563*	407*	452*	37
H(30)	463*	378*	450*	37
H(31)	448*	228*	450*	43
H(32)	548*	257*	454*	43
H(33)	495*	197*	554*	43
H(34)	349*	393*	933*	31
H(35)	303*	354*	805*	31
H(36)	319*	296*	904*	31
H(37)	457*	296*	955*	36
H(38)	540*	353*	890*	36
H(39)	499*	393*	987*	36
H(40)	527*	470*	749*	36
H(41)	436*	472*	721*	36
H(42)	481*	496*	854*	36
H(43)	220*	98*	696*	26
H(44)	131*	46*	858*	28
H(45)	47*	118*	931*	29
H(46)	58*	246*	843*	27

H(47)	150*	300*	684*	26
H(48)	858*	85*	24*	30
H(49)	847*	51*	-113*	30
H(50)	910*	143*	-78*	30
H(51)	794*	88*	-359*	37
H(52)	852*	176*	-405*	37
H(53)	884*	139*	-291*	37
H(54)	679*	209*	-256*	35
H(55)	724*	225*	-381*	35
H(56)	672*	133*	-342*	35
H(57)	902*	277*	-168*	40
H(58)	875*	303*	-295*	40
H(59)	825*	307*	-178*	40
H(60)	619*	-74*	-224*	34
H(61)	666*	9*	-295*	34
H(62)	719*	-34*	-221*	34
H(63)	616*	-69*	8*	37
H(64)	715*	-45*	0*	37
H(65)	682*	11*	81*	37
H(66)	582*	74*	-31*	36
H(67)	582*	80*	-175*	36
H(68)	537*	-8*	-115*	36
H(69)	690*	408*	287*	33
H(70)	641*	343*	180*	33
H(71)	669*	312*	303*	33
H(72)	881*	568*	205*	34
H(73)	822*	590*	106*	34
H(74)	781*	536*	219*	34
H(75)	881*	431*	-37*	36
H(76)	902*	528*	-38*	36
H(77)	941*	491*	69*	36
H(78)	744*	497*	-56*	35
H(79)	727*	401*	-59*	35
H(80)	683*	437*	37*	35
H(81)	799*	286*	417*	39
H(82)	867*	280*	326*	39
H(83)	898*	327*	455*	39
H(84)	867*	451*	505*	38
H(85)	849*	506*	401*	38
H(86)	775*	423*	439*	38
H(87)	993*	454*	377*	36
H(88)	973*	421*	239*	36
H(89)	963*	505*	279*	36
H(90)	600*	166*	196*	27
H(91)	550*	71*	353*	30
H(92)	642*	11*	449*	33
H(93)	777*	43*	382*	32
H(94)	831*	140*	226*	30

Notes:

1) Fractional coordinates are X 10**4 for nonhydrogen atoms and X 10**3 for hydrogen atoms. Biso values are X 10.
2) Isotropic values for those atoms refined anisotropically are calculated using the formula given by W. C. Hamilton, *Acta Cryst.* **1959**, *12*, 609.
3) Parameters marked by an asterisk (*) were not varied.

Table S4. Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters for $RuCl_2(CO)(P^iPr_3)_2$

Atom	10^4x	10^4y	10^4z	$10\ B_{iso}$
Ru	2896(1)	2364(1)	2057(1)	19(1)
P(1)	3916(1)	2125(4)	1855(2)	22(1)
P(2)	1879(1)	2127(4)	2266(2)	21(1)
Cl(1)	2142(1)	2043(5)	281(2)	34(1)
Cl(2)	3659(1)	2016(4)	3850(2)	34(1)
C(1)	2944(6)	4413(4)	2078(12)	30(1)
O(1)	2969(5)	5752(3)	2165(10)	47(2)
C(11)	3445(6)	-828(14)	1123(8)	46(3)
C(12)	4129(4)	33(8)	1821(5)	22(1)
C(13)	4446(6)	-783(15)	2932(8)	49(3)
C(14)	3802(6)	4661(11)	575(9)	46(2)
C(15)	3789(5)	2832(14)	606(8)	28(2)
C(16)	4251(6)	2137(15)	173(8)	40(2)
C(17)	5378(6)	2740(15)	2747(8)	44(3)
C(18)	4754(4)	2930(14)	2952(7)	31(2)
C(19)	4699(6)	4550(16)	3199(9)	56(3)
C(21)	2344(6)	-887(14)	3019(9)	46(3)
C(22)	1693(4)	32(13)	2235(7)	38(2)
C(23)	1308(6)	-660(12)	1237(8)	39(2)
C(24)	1091(5)	4597(10)	893(8)	41(2)
C(25)	1052(5)	2899(13)	1239(7)	31(2)
C(26)	402(5)	2656(15)	1346(10)	56(4)
C(27)	2008(5)	4578(13)	3540(7)	43(2)
C(28)	2049(5)	2870(15)	3534(8)	28(2)
C(29)	1619(6)	2172(15)	3948(9)	44(2)
H(11A)	3227(6)	-384(14)	432(8)	69
H(11B)	3122(6)	-728(14)	1394(8)	69
H(11C)	3548(6)	-1924(14)	1093(8)	69
H(12)	4466(4)	-77(8)	1558(5)	26
H(13A)	4887(6)	-272(15)	3419(8)	74
H(13B)	4537(6)	-1878(15)	2876(8)	74
H(13C)	4107(6)	-692(15)	3175(8)	74
H(14A)	3512(6)	5081(11)	848(9)	69
H(14B)	3614(6)	5007(11)	-134(9)	69
H(14C)	4287(6)	5027(11)	993(9)	69
H(15)	3294(5)	2541(14)	94(8)	34
H(16A)	4235(6)	1005(15)	190(8)	60
H(16B)	4739(6)	2486(15)	595(8)	60
H(16C)	4069(6)	2484(15)	-535(8)	60
H(17A)	5414(6)	1656(15)	2589(8)	67
H(17B)	5816(6)	3055(15)	3357(8)	67
H(17C)	5299(6)	3391(15)	2166(8)	67
H(18)	4866(4)	2300(14)	3573(7)	38
H(19A)	4305(6)	4660(16)	3330(9)	84
H(19B)	4618(6)	5210(16)	2620(9)	84
H(19C)	5137(6)	4861(16)	3809(9)	84
H(21A)	2572(6)	-336(14)	3675(9)	69
H(21B)	2677(6)	-995(14)	2764(9)	69

H(21C)	2197(6)	-1915(14)	3114(9)	69
H(22)	1361(4)	-32(13)	2510(7)	46
H(23A)	903(6)	-9(12)	794(8)	59
H(23B)	1143(6)	-1688(12)	1297(8)	59
H(23C)	1616(6)	-756(12)	939(8)	59
H(24A)	1516(5)	4711(10)	834(8)	62
H(24B)	1109(5)	5330(10)	1403(8)	62
H(24C)	674(5)	4806(10)	228(8)	62
H(25)	957(5)	2255(13)	631(7)	37
H(26A)	397(5)	1591(15)	1566(10)	84
H(26B)	-22(5)	2843(15)	685(10)	84
H(26C)	414(5)	3377(15)	1857(10)	84
H(27A)	2293(5)	5020(13)	3265(7)	65
H(27B)	2187(5)	4942(13)	4244(7)	65
H(27C)	1517(5)	4904(13)	3114(7)	65
H(28)	2550(5)	2601(15)	4034(8)	34
H(29A)	1647(6)	1043(15)	3932(9)	66
H(29B)	1127(6)	2498(15)	3527(9)	66
H(29C)	1799(6)	2517(15)	4655(9)	66

Notes:

1) Fractional coordinates are X 10**4 for nonhydrogen atoms and X 10**3 for hydrogen atoms. Biso values are X 10.
2) Isotropic values for those atoms refined anisotropically are calculated using the formula given by W. C. Hamilton, *Acta Cryst.* **1959**, *12*, 609.
3) Parameters marked by an asterisk (*) were not varied.

Table S5. Fractional Coordinates and Isotropic Thermal Parameters for $RuHCl(CO)(P^iPr_3)_2$

Atom	10^4x	10^4y	10^4z	$10\ B_{iso}$
Ru(1)	0	0	0	19(1)
P(1)	1251(1)	1648(1)	973(1)	19(1)
Cl(2)	165(4)	-2001(2)	983(1)	66(1)
C(11)	2339(2)	3248(2)	520(1)	30(1)
C(12)	-303(2)	2562(2)	1598(1)	25(1)
C(13)	2647(3)	693(2)	1724(1)	33(1)
C(111)	2960(4)	4497(3)	1083(2)	49(1)
C(112)	3699(4)	2764(4)	-29(2)	55(1)
C(121)	-1318(3)	1402(3)	2035(1)	41(1)
C(122)	-1441(3)	3595(3)	1102(2)	44(1)
C(131)	4021(4)	-185(4)	1319(2)	64(1)
C(132)	3385(4)	1638(3)	2415(2)	50(1)
C(3)	-19(7)	1437(6)	-717(3)	43(1)
O(3)	-58(11)	2403(7)	-1187(4)	66(2)

Notes:

4) Fractional coordinates are X 10**4 for nonhydrogen atoms and X 10**3 for hydrogen atoms. Biso values are X 10.
5) Isotropic values for those atoms refined anisotropically are calculated using the formula given by W. C. Hamilton, *Acta Cryst.* **1959**, *12*, 609.
6) Parameters marked by an asterisk (*) were not varied.

© 1999 American Chemical Society, J. Am. Chem. Soc., Huang ja990621w Supporting Info Page 11

Table S6. Anisotropic Thermal Parameters for [RuPh(CO)(Pt-$Bu_2Me)_2$]BAr'_4

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Ru(1)	22(1)	19(1)	14(1)	2(1)	-1(1)	-1(1)
C(2)	79(15)	45(10)	21(8)	-7(11)	-10(10)	2(8)
O(3)	60(9)	53(7)	36(6)	15(7)	3(6)	-17(6)
C(4)	23(6)	31(7)	27(6)	7(10)	-2(6)	1(10)
C(5)	25(10)	34(10)	38(9)	-1(8)	7(7)	6(7)
C(6)	27(9)	29(9)	34(8)	10(7)	9(7)	3(7)
C(7)	28(7)	45(10)	42(8)	-20(9)	-3(7)	29(10)
C(8)	17(9)	29(9)	36(9)	5(7)	7(6)	17(7)
C(9)	45(11)	24(9)	27(8)	0(8)	2(7)	2(6)
P(10)	42(3)	28(2)	38(2)	-6(2)	-19(2)	9(2)
C(11)	36(10)	51(11)	41(9)	0(9)	-6(8)	-4(9)
C(12)	47(13)	69(14)	60(11)	-18(11)	-25(10)	3(10)
C(13)	46(11)	46(10)	59(11)	23(9)	-15(10)	-5(10)
C(14)	70(15)	71(14)	52(11)	34(12)	-17(11)	-9(10)
C(15)	80(17)	52(11)	45(10)	29(11)	3(9)	22(9)
C(16)	62(14)	38(11)	78(13)	0(10)	-13(11)	20(10)
C(17)	163(26)	50(12)	73(13)	5(16)	-72(17)	26(10)
C(18)	86(17)	48(11)	74(13)	-6(11)	3(12)	-15(10)
C(19)	63(12)	49(10)	45(9)	-24(11)	-8(11)	-21(8)
P(20)	32(2)	36(2)	37(2)	9(2)	12(2)	15(2)
C(21)	59(13)	44(11)	55(11)	14(10)	4(9)	-3(9)
C(22)	126(21)	57(12)	43(10)	42(14)	20(13)	-15(9)
C(23)	48(13)	67(14)	70(12)	-6(11)	5(10)	9(11)
C(25)	55(13)	58(12)	27(9)	-4(10)	-7(8)	9(8)
C(26)	44(11)	75(13)	41(10)	10(10)	16(9)	4(9)
C(28)	56(13)	97(16)	28(8)	-6(13)	10(9)	-17(8)
C(29)	104(19)	42(11)	49(11)	-3(11)	29(11)	9(9)
B(30)	31(7)	19(7)	9(6)	-21(9)	3(6)	-3(7)
C(31)	22(9)	33(8)	16(7)	4(7)	0(7)	-3(6)
C(32)	9(7)	26(8)	19(7)	-6(6)	-5(5)	12(6)
C(33)	50(12)	20(8)	35(9)	9(8)	-29(9)	4(7)
C(34)	19(9)	21(8)	47(10)	-6(7)	12(8)	6(7)
C(35)	25(9)	47(10)	25(8)	0(8)	6(7)	14(8)
C(36)	30(10)	27(9)	20(7)	-8(8)	11(7)	3(6)
C(37)	19(9)	12(8)	71(12)	-2(7)	-6(9)	1(8)
F(38)	55(8)	52(7)	64(6)	-3(6)	-10(5)	-32(5)
F(39)	77(8)	35(6)	58(6)	-22(6)	-21(6)	0(5)
F(40)	62(8)	43(6)	33(5)	-5(6)	-24(5)	9(5)
C(41)	43(12)	33(10)	38(9)	-15(9)	20(8)	5(8)
F(42)	192(17)	111(11)	52(7)	60(12)	80(9)	48(8)
F(43)	71(11)	201(18)	83(9)	-51(12)	37(8)	-3(10)
F(44)	202(17)	59(8)	89(9)	-39(10)	111(11)	-15(8)
C(45)	23(8)	25(9)	10(6)	-4(7)	8(5)	-8(6)
C(46)	15(8)	22(7)	17(7)	5(7)	5(6)	2(6)
C(47)	39(10)	36(10)	15(7)	2(8)	-1(7)	9(6)
C(48)	33(10)	15(8)	29(8)	11(7)	-13(7)	-3(6)
C(49)	21(8)	31(8)	30(8)	-11(7)	-2(7)	5(7)
C(50)	36(10)	21(8)	16(7)	-1(7)	0(7)	-1(6)
C(51)	36(10)	36(10)	37(9)	7(9)	-11(8)	8(8)
F(52)	84(8)	38(6)	39(6)	13(6)	-7(5)	8(5)

F(53)	61(8)	102(10)	68(7)	-10(7)	-6(6)	63(7)
F(54)	129(11)	49(6)	48(6)	0(7)	-62(7)	16(5)
C(55)	44(13)	44(11)	44(11)	-13(9)	-17(9)	3(9)
F(56)	190(17)	59(8)	76(9)	-43(10)	36(10)	-40(7)
F(57)	127(12)	55(7)	58(7)	-51(8)	-52(7)	26(6)
F(58)	58(9)	66(8)	104(9)	-44(7)	-37(7)	29(7)
C(59)	23(9)	10(7)	16(7)	4(6)	5(6)	9(6)
C(60)	32(9)	21(8)	11(7)	-7(7)	4(6)	1(6)
C(61)	17(9)	25(9)	22(7)	-4(7)	12(7)	-3(6)
C(62)	37(10)	26(8)	44(10)	14(8)	1(9)	1(8)
C(63)	12(8)	35(9)	40(9)	7(8)	-4(7)	13(7)
C(64)	28(9)	31(9)	16(7)	-13(7)	-2(6)	-8(6)
C(65)	23(9)	25(9)	21(8)	12(7)	5(7)	5(7)
F(66)	81(9)	42(6)	40(6)	0(6)	30(6)	-7(5)
F(67)	69(8)	60(7)	41(5)	17(6)	3(5)	-36(5)
F(68)	73(8)	39(6)	42(5)	20(6)	1(5)	-13(4)
C(69)	36(11)	24(9)	37(9)	19(9)	-11(8)	5(8)
F(70)	95(10)	153(14)	37(6)	-38(10)	-34(7)	52(8)
F(71)	128(11)	45(7)	48(6)	-19(7)	-51(7)	1(5)
F(72)	146(15)	137(13)	78(9)	90(12)	-78(10)	-39(9)
C(73)	32(8)	10(7)	18(6)	-1(8)	6(5)	0(7)
C(74)	32(10)	14(8)	25(8)	-6(7)	8(7)	-6(6)
C(76)	35(9)	31(10)	14(6)	-19(7)	14(6)	-7(6)
C(78)	16(8)	22(8)	17(7)	-2(7)	0(6)	2(6)
C(79)	44(11)	28(9)	17(7)	-10(8)	12(7)	0(7)
F(80)	97(9)	45(6)	35(5)	-8(6)	38(5)	14(5)
F(81)	59(7)	50(6)	62(6)	9(6)	7(6)	44(5)
F(82)	123(12)	49(7)	45(7)	-38(8)	-8(7)	10(6)
C(83)	45(12)	41(11)	28(10)	-5(9)	0(8)	0(8)
F(84)	95(9)	32(6)	71(7)	20(6)	37(7)	21(5)
F(85)	48(7)	51(6)	71(7)	17(6)	13(6)	9(5)
F(86)	97(10)	76(9)	98(9)	7(8)	-49(8)	-56(8)

Form of the anisotropic thermal parameter:

Exp[-2(pi**2)[(h**2)((a*)**2)U11+(k**2)((b*)**2)U22+(l**2)((c*)**2)U33
+2hk(a*)(b*)U12+2hl(a*)(c*)U13+2kl(b*)(c*)U23]]

All values are X 10**3

© 1999 American Chemical Society, J. Am. Chem. Soc., Huang ja990621w Supporting Info Page 13

Table S7. Anisotropic Thermal Parameters for $RuClPh(CO)(P^tBu_2Me)_2$

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Ru(1)	19.8(4)	13.3(4)	11.7(4)	7.8(3)	2.8(3)	2.3(3)
Cl(2)	30(1)	22(1)	26(1)	11(1)	2(1)	3(1)
P(3)	26(1)	15(1)	13(1)	10(1)	2(1)	3(1)
C(4)	29(6)	23(5)	28(5)	16(4)	-2(4)	0(4)
C(5)	11(5)	33(5)	17(4)	7(4)	-2(3)	5(4)
C(6)	39(6)	34(5)	20(5)	16(5)	5(4)	9(4)
C(7)	36(6)	53(6)	23(5)	29(5)	7(4)	8(5)
C(8)	48(7)	46(6)	26(5)	18(6)	8(5)	7(5)
C(9)	30(6)	14(5)	27(5)	3(4)	-6(4)	4(4)
C(10)	38(6)	26(5)	33(5)	10(5)	-6(5)	8(4)
C(11)	46(7)	40(6)	28(5)	15(5)	3(5)	9(5)
C(12)	39(6)	24(5)	39(6)	5(5)	-4(5)	9(4)
P(13)	20(1)	17(1)	16(1)	9(1)	3(1)	3(1)
C(14)	28(5)	25(5)	21(5)	13(4)	-1(4)	4(4)
C(15)	26(5)	28(5)	29(5)	15(4)	10(4)	10(4)
C(16)	23(6)	45(6)	47(6)	19(5)	8(5)	12(5)
C(17)	33(6)	38(6)	34(6)	13(5)	13(5)	15(5)
C(18)	43(7)	48(7)	37(6)	18(6)	25(5)	1(5)
C(19)	28(5)	21(5)	19(5)	10(4)	-4(4)	-5(4)
C(20)	37(6)	38(5)	13(4)	24(5)	1(4)	-4(4)
C(21)	41(6)	39(6)	23(5)	22(5)	-4(4)	-6(4)
C(22)	32(6)	28(5)	42(6)	16(5)	-4(5)	-5(4)
C(23)	26(5)	25(5)	12(4)	14(4)	0(4)	2(4)
C(24)	23(5)	22(5)	16(4)	10(4)	0(4)	0(4)
C(25)	27(5)	17(5)	17(4)	0(4)	0(4)	3(4)
C(26)	26(5)	27(5)	12(4)	1(4)	3(4)	2(4)
C(27)	23(5)	27(5)	13(4)	9(4)	2(4)	-4(4)
C(28)	25(5)	21(5)	18(4)	12(4)	-1(4)	1(4)
C(29)	15(5)	47(6)	11(4)	9(5)	-8(4)	11(4)
O(30)	29(4)	31(4)	12(3)	18(3)	-1(3)	-4(3)
Ru(1)'	20.1(4)	14.9(4)	11.9(4)	8.8(3)	3.2(3)	2.5(3)
Cl(2)'	34(1)	27(1)	29(1)	15(1)	4(1)	2(1)
P(3)'	31(1)	20(1)	13(1)	15(1)	4(1)	1(1)
C(4)'	33(6)	27(5)	23(5)	19(4)	2(4)	-2(4)
C(5)'	43(6)	27(5)	16(4)	20(5)	7(4)	4(4)
C(6)'	48(7)	48(6)	18(5)	29(6)	8(4)	2(4)
C(7)'	39(6)	42(6)	21(5)	25(5)	5(4)	3(4)
C(8)'	61(8)	43(6)	18(5)	25(6)	12(5)	10(4)
C(9)'	34(6)	22(5)	18(5)	11(4)	5(4)	2(4)
C(10)'	39(6)	31(5)	26(5)	17(5)	0(4)	-5(4)
C(11)'	51(7)	28(5)	25(5)	14(5)	3(5)	2(4)
C(12)'	40(6)	33(6)	24(5)	12(5)	4(4)	-6(4)
P(13)'	25(1)	18(1)	15(1)	11(1)	3(1)	2(1)
C(14)'	38(6)	26(5)	27(5)	17(5)	12(4)	-1(4)
C(15)'	39(6)	16(5)	20(5)	14(4)	7(4)	5(4)
C(16)'	44(6)	22(5)	31(5)	17(5)	9(4)	5(4)
C(17)'	46(7)	26(5)	30(5)	16(5)	12(5)	6(4)
C(18)'	32(6)	26(5)	34(5)	7(5)	-2(4)	9(4)
C(19)'	40(6)	26(5)	20(5)	18(5)	-1(4)	-1(4)
C(20)'	62(7)	36(6)	17(5)	26(6)	-6(5)	-1(4)

C(21)'	46(7)	43(6)	23(5)	23(5)	-5(4)	-6(4)
C(22)'	34(6)	31(5)	33(5)	13(5)	-7(4)	-4(4)
C(23)'	18(5)	21(5)	15(4)	10(4)	0(4)	-1(4)
C(24)'	29(6)	23(5)	14(4)	10(4)	1(4)	-2(4)
C(25)'	24(5)	25(5)	21(5)	3(4)	5(4)	2(4)
C(26)'	47(7)	25(5)	12(4)	12(5)	8(4)	4(4)
C(27)'	55(7)	19(5)	16(5)	19(5)	4(4)	1(4)
C(28)'	45(6)	22(5)	15(4)	18(5)	5(4)	-2(4)
C(29)'	64(8)	13(5)	16(5)	12(5)	16(5)	-2(4)
O(30)'	44(4)	26(3)	16(3)	26(3)	-10(3)	-3(3)

Form of the anisotropic thermal parameter:

Exp[-2(pi**2)[(h**2)((a*)**2)U11+(k**2)((b*)**2)U22+(l**2)((c*)**2)U33
+2hk(a*)(b*)U12+2hl(a*)(c*)U13+2kl(b*)(c*)U23]]

All values are X 10**3

© 1999 American Chemical Society, J. Am. Chem. Soc., Huang ja990621w Supporting Info Page 15

Table S8. Anisotropic Thermal Parameters for $RuCl_2(CO)(P^iPr_3)_2$

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Ru	17(1)	18(1)	23(1)	-1(1)	10(1)	1(1)
P(1)	21(1)	20(1)	26(1)	1(1)	14(1)	0(1)
P(2)	15(1)	21(1)	28(1)	3(1)	11(1)	2(1)
Cl(1)	25(1)	53(2)	20(1)	2(1)	8(1)	-1(1)
Cl(2)	23(1)	46(2)	32(1)	4(1)	13(1)	6(1)
C(1)	20(2)	29(1)	49(2)	-3(4)	22(2)	0(3)
O(1)	41(3)	22(1)	85(5)	2(2)	36(3)	1(2)
C(11)	68(6)	20(4)	45(5)	0(4)	23(5)	3(4)
C(12)	33(3)	11(2)	28(3)	7(2)	20(2)	9(2)
C(13)	48(4)	44(5)	40(4)	17(3)	11(3)	13(4)
C(14)	53(5)	17(3)	68(6)	11(3)	31(5)	4(3)
C(15)	21(3)	33(5)	32(4)	0(4)	14(3)	-10(3)
C(16)	48(4)	51(5)	41(4)	-10(4)	36(4)	-1(4)
C(17)	26(5)	65(7)	36(4)	7(4)	11(3)	-7(4)
C(18)	6(2)	45(5)	36(4)	-6(3)	6(2)	-10(3)
C(19)	47(5)	67(8)	50(6)	-24(5)	21(5)	-24(6)
C(21)	51(5)	29(5)	58(6)	13(4)	26(5)	15(4)
C(22)	34(3)	42(5)	51(5)	10(4)	32(3)	3(3)
C(23)	60(5)	20(3)	49(4)	-9(3)	36(4)	-13(3)
C(24)	32(4)	24(4)	55(6)	16(4)	11(4)	11(3)
C(25)	35(4)	31(4)	27(3)	3(3)	16(3)	1(3)
C(26)	15(4)	76(8)	77(7)	21(5)	23(4)	7(4)
C(27)	45(4)	53(6)	35(4)	-15(4)	23(4)	6(4)
C(28)	30(4)	31(4)	27(4)	-5(4)	18(3)	-4(3)
C(29)	38(4)	52(5)	54(5)	-17(4)	32(4)	-5(3)

Form of the anisotropic thermal parameter:

Exp[-2(pi**2)[(h**2)((a*)**2)U11+(k**2)((b*)**2)U22+(l**2)((c*)**2)U33
+2hk(a*)(b*)U12+2hl(a*)(c*)U13+2kl(b*)(c*)U23]]

All values are X 10**3

Table S9. Anisotropic Thermal Parameters for $RuHCl(CO)(P^iPr_3)_2$

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ru(1)	22(1)	17(1)	17(1)	-1(1)	0(1)	-1(1)
P(1)	20(1)	20(1)	18(1)	-2(1)	1(1)	-2(1)
Cl(2)	127(2)	28(1)	40(1)	14(1)	-38(1)	-27(1)
C(11)	32(1)	31(1)	28(1)	-2(1)	6(1)	-11(1)
C(12)	25(1)	26(1)	25(1)	-6(1)	4(1)	-2(1)
C(13)	32(1)	33(1)	32(1)	-1(1)	-10(1)	4(1)
C(111)	65(2)	39(1)	45(1)	-9(1)	10(1)	-29(1)
C(112)	48(1)	63(2)	57(2)	-9(1)	31(1)	-19(1)
C(121)	40(1)	46(1)	37(1)	-4(1)	17(1)	-9(1)
C(122)	43(1)	42(1)	48(1)	1(1)	5(1)	18(1)
C(131)	49(2)	80(2)	61(2)	-11(2)	-15(1)	38(2)
C(132)	54(1)	52(1)	41(1)	-6(1)	-26(1)	2(1)
C(3)	71(3)	23(2)	34(2)	4(2)	-20(2)	-11(2)
O(3)	109(4)	37(3)	49(3)	14(2)	-32(3)	-23(3)

Form of the anisotropic thermal parameter:

Exp[-2(pi**2)[(h**2)((a*)**2)U11+(k**2)((b*)**2)U22+(l**2)((c*)**2)U33
+2hk(a*)(b*)U12+2hl(a*)(c*)U13+2kl(b*)(c*)U23]]

All values are X 10**3

Table S10. Bond Distances and Angles for [RuPh(CO)(Pt-$Bu_2Me)_2$]BAr'_4

Ru(1)	P(10)	2.3920(22)	C(25)	C(26)	1.525(25)
Ru(1)	P(20)	2.3653(28)	C(25)	C(27)	1.595(24)
Ru(1)	C(2)	1.799(14)	C(25)	C(28)	1.476(12)
Ru(1)	C(4)	2.058(12)	C(31)	C(32)	1.412(15)
P(10)	C(11)	1.862(17)	C(31)	C(36)	1.426(20)
P(10)	C(15)	1.806(17)	C(31)	B(30)	1.653(13)
P(10)	C(19)	1.878(10)	C(32)	C(33)	1.398(15)
P(20)	C(21)	1.824(12)	C(33)	C(34)	1.412(21)
P(20)	C(25)	1.888(16)	C(33)	C(37)	1.515(16)
P(20)	C(29)	1.922(23)	C(34)	C(35)	1.399(16)
F(38)	C(37)	1.296(17)	C(35)	C(36)	1.330(15)
F(39)	C(37)	1.378(12)	C(35)	C(41)	1.517(24)
F(40)	C(37)	1.293(16)	C(45)	C(46)	1.392(13)
F(42)	C(41)	1.300(16)	C(45)	C(50)	1.398(10)
F(43)	C(41)	1.268(21)	C(45)	B(30)	1.648(19)
F(44)	C(41)	1.305(11)	C(46)	C(47)	1.413(21)
F(52)	C(51)	1.293(11)	C(47)	C(48)	1.382(10)
F(53)	C(51)	1.362(19)	C(47)	C(51)	1.496(15)
F(54)	C(51)	1.332(19)	C(48)	C(49)	1.405(15)
F(56)	C(55)	1.296(20)	C(49)	C(50)	1.383(19)
F(57)	C(55)	1.314(17)	C(49)	C(55)	1.475(11)
F(58)	C(55)	1.308(21)	C(59)	C(60)	1.394(15)
F(66)	C(65)	1.310(16)	C(59)	C(64)	1.398(19)
F(67)	C(65)	1.294(17)	C(59)	B(30)	1.619(13)
F(68)	C(65)	1.341(11)	C(60)	C(61)	1.412(14)
F(70)	C(69)	1.271(21)	C(61)	C(62)	1.368(21)
F(71)	C(69)	1.312(11)	C(61)	C(65)	1.516(16)
F(72)	C(69)	1.272(18)	C(62)	C(63)	1.413(16)
F(80)	C(79)	1.382(18)	C(63)	C(64)	1.379(15)
F(81)	C(79)	1.313(17)	C(63)	C(69)	1.490(23)
F(82)	C(79)	1.331(13)	C(73)	C(74)	1.406(12)
F(84)	C(83)	1.354(15)	C(73)	C(78)	1.397(10)
F(85)	C(83)	1.330(20)	C(73)	B(30)	1.641(22)
F(86)	C(83)	1.285(18)	C(74)	C(75)	1.419(20)
O(3)	C(2)	1.163(16)	C(75)	C(76)	1.357(10)
C(4)	C(5)	1.334(15)	C(75)	C(79)	1.477(12)
C(4)	C(9)	1.388(16)	C(76)	C(77)	1.385(12)
C(5)	C(6)	1.395(22)	C(77)	C(78)	1.380(19)
C(6)	C(7)	1.385(16)	C(77)	C(83)	1.508(11)
C(7)	C(8)	1.429(14)			
C(8)	C(9)	1.353(22)			
C(11)	C(12)	1.572(21)			
C(11)	C(13)	1.542(20)			
C(11)	C(14)	1.510(13)			
C(15)	C(16)	1.56(3)			
C(15)	C(17)	1.548(20)			
C(15)	C(18)	1.529(16)			
C(21)	C(22)	1.610(22)			
C(21)	C(23)	1.542(27)			
C(21)	C(24)	1.537(22)			

P(10)	Ru(1)	P(20)	167.98(14)	F(38)	C(37)	F(39)	106.5(5)
P(10)	Ru(1)	C(2)	93.0(3)	F(38)	C(37)	F(40)	108.6(12)
P(10)	Ru(1)	C(4)	96.52(28)	F(38)	C(37)	C(33)	112.2(13)
P(20)	Ru(1)	C(2)	95.5(3)	F(39)	C(37)	F(40)	105.8(12)
P(20)	Ru(1)	C(4)	91.5(3)	F(39)	C(37)	C(33)	110.7(11)
C(2)	Ru(1)	C(4)	93.7(8)	F(40)	C(37)	C(33)	112.7(6)
Ru(1)	P(10)	C(11)	98.1(3)	F(42)	C(41)	F(43)	105.2(12)
Ru(1)	P(10)	C(15)	126.1(4)	F(42)	C(41)	F(44)	107.1(13)
Ru(1)	P(10)	C(19)	109.4(4)	F(42)	C(41)	C(35)	111.1(13)
C(11)	P(10)	C(15)	114.6(9)	F(43)	C(41)	F(44)	105.9(15)
C(11)	P(10)	C(19)	101.7(7)	F(43)	C(41)	C(35)	114.7(15)
C(15)	P(10)	C(19)	104.5(6)	F(44)	C(41)	C(35)	112.3(10)
Ru(1)	P(20)	C(21)	121.7(6)	C(46)	C(45)	C(50)	116.8(11)
Ru(1)	P(20)	C(25)	96.6(3)	C(46)	C(45)	B(30)	125.6(6)
Ru(1)	P(20)	C(29)	114.6(5)	C(50)	C(45)	B(30)	117.5(8)
C(21)	P(20)	C(25)	112.4(7)	C(45)	C(46)	C(47)	120.6(6)
C(21)	P(20)	C(29)	106.8(6)	C(46)	C(47)	C(48)	121.8(9)
C(25)	P(20)	C(29)	102.9(8)	C(46)	C(47)	C(51)	118.3(8)
Ru(1)	C(2)	O(3)	176.0(11)	C(48)	C(47)	C(51)	119.9(13)
Ru(1)	C(4)	C(5)	116.9(9)	C(47)	C(48)	C(49)	117.5(13)
Ru(1)	C(4)	C(9)	125.0(10)	C(48)	C(49)	C(50)	120.2(8)
C(5)	C(4)	C(9)	118.1(12)	C(48)	C(49)	C(55)	118.3(12)
C(4)	C(5)	C(6)	123.2(11)	C(50)	C(49)	C(55)	121.4(9)
C(5)	C(6)	C(7)	117.9(10)	C(45)	C(50)	C(49)	122.9(9)
C(6)	C(7)	C(8)	119.9(12)	F(52)	C(51)	F(53)	103.8(6)
C(7)	C(8)	C(9)	117.9(10)	F(52)	C(51)	F(54)	106.6(13)
C(4)	C(9)	C(8)	122.9(10)	F(52)	C(51)	C(47)	114.9(13)
P(10)	C(11)	C(12)	109.4(11)	F(53)	C(51)	F(54)	105.3(13)
P(10)	C(11)	C(13)	103.3(11)	F(53)	C(51)	C(47)	111.8(13)
P(10)	C(11)	C(14)	115.2(9)	F(54)	C(51)	C(47)	113.6(6)
C(12)	C(11)	C(13)	109.2(9)	F(56)	C(55)	F(57)	110.1(7)
C(12)	C(11)	C(14)	110.2(13)	F(56)	C(55)	F(58)	104.5(14)
C(13)	C(11)	C(14)	109.2(12)	F(56)	C(55)	C(49)	113.6(15)
P(10)	C(15)	C(16)	105.3(13)	F(57)	C(55)	F(58)	104.9(15)
P(10)	C(15)	C(17)	110.0(13)	F(57)	C(55)	C(49)	112.1(12)
P(10)	C(15)	C(18)	111.4(8)	F(58)	C(55)	C(49)	111.0(7)
C(16)	C(15)	C(17)	111.4(12)	C(60)	C(59)	C(64)	116.7(10)
C(16)	C(15)	C(18)	106.9(14)	C(60)	C(59)	B(30)	122.4(11)
C(17)	C(15)	C(18)	111.7(15)	C(64)	C(59)	B(30)	120.7(9)
P(20)	C(21)	C(22)	102.8(12)	C(59)	C(60)	C(61)	120.5(12)
P(20)	C(21)	C(23)	111.8(4)	C(60)	C(61)	C(62)	122.4(10)
P(20)	C(21)	C(24)	113.8(12)	C(60)	C(61)	C(65)	117.1(11)
C(22)	C(21)	C(23)	112.7(16)	C(62)	C(61)	C(65)	120.5(10)
C(22)	C(21)	C(24)	107.6(8)	C(61)	C(62)	C(63)	117.2(11)
C(23)	C(21)	C(24)	108.1(15)	C(62)	C(63)	C(64)	120.4(14)
P(20)	C(25)	C(26)	111.2(11)	C(62)	C(63)	C(69)	120.5(10)
P(20)	C(25)	C(27)	112.5(7)	C(64)	C(63)	C(69)	119.1(10)
P(20)	C(25)	C(28)	104.2(12)	C(59)	C(64)	C(63)	122.8(11)
C(26)	C(25)	C(27)	107.9(15)	F(66)	C(65)	F(67)	107.0(12)
C(26)	C(25)	C(28)	113.3(9)	F(66)	C(65)	F(68)	104.7(11)
C(27)	C(25)	C(28)	107.7(13)	F(66)	C(65)	C(61)	112.7(6)
C(32)	C(31)	C(36)	113.5(10)	F(67)	C(65)	F(68)	107.3(5)
C(32)	C(31)	B(30)	124.8(12)	F(67)	C(65)	C(61)	112.8(12)
C(36)	C(31)	B(30)	121.2(9)	F(68)	C(65)	C(61)	111.8(11)
C(31)	C(32)	C(33)	122.2(12)	F(70)	C(69)	F(71)	106.1(11)
C(32)	C(33)	C(34)	121.2(10)	F(70)	C(69)	F(72)	105.1(9)
C(32)	C(33)	C(37)	117.0(12)	F(70)	C(69)	C(63)	112.3(14)
C(34)	C(33)	C(37)	121.8(11)	F(71)	C(69)	F(72)	106.2(15)
C(33)	C(34)	C(35)	116.5(11)	F(71)	C(69)	C(63)	113.0(7)
C(34)	C(35)	C(36)	121.6(14)	F(72)	C(69)	C(63)	113.4(12)
C(34)	C(35)	C(41)	116.9(10)	C(74)	C(73)	C(78)	116.6(12)
C(36)	C(35)	C(41)	121.5(11)	C(74)	C(73)	B(30)	120.6(6)
C(31)	C(36)	C(35)	125.0(11)	C(78)	C(73)	B(30)	122.6(8)

C(73)	C(74)	C(75)	120.5(7)	F(82)	C(79)	C(75)	114.1(11)
C(74)	C(75)	C(76)	120.6(8)	F(84)	C(83)	F(85)	102.9(13)
C(74)	C(75)	C(79)	117.0(7)	F(84)	C(83)	F(86)	109.9(7)
C(76)	C(75)	C(79)	122.3(12)	F(84)	C(83)	C(77)	111.9(13)
C(75)	C(76)	C(77)	119.6(13)	F(85)	C(83)	F(86)	106.9(15)
C(76)	C(77)	C(78)	120.3(8)	F(85)	C(83)	C(77)	111.1(8)
C(76)	C(77)	C(83)	119.7(12)	F(86)	C(83)	C(77)	113.4(13)
C(78)	C(77)	C(83)	119.8(8)	C(31)	B(30)	C(45)	111.4(9)
C(73)	C(78)	C(77)	122.3(8)	C(31)	B(30)	C(59)	103.0(9)
F(80)	C(79)	F(81)	107.5(11)	C(31)	B(30)	C(73)	110.5(7)
F(80)	C(79)	F(82)	103.0(13)	C(45)	B(30)	C(59)	112.8(8)
F(80)	C(79)	C(75)	110.8(6)	C(45)	B(30)	C(73)	104.5(10)
F(81)	C(79)	F(82)	106.2(6)	C(59)	B(30)	C(73)	114.9(9)
F(81)	C(79)	C(75)	114.3(12)				

Table S11. Bond Distances (Å) and Angles (°) for $RuClPh(CO)(P^tBu_2Me)_2$

Ru(1)	Cl(2)	2.4432(6)	C(15)'	C(18)'	1.5329(3)
Ru(1)	P(3)	2.4097(5)	C(19)'	C(20)'	1.5260(3)
Ru(1)	P(13)	2.4296(5)	C(19)'	C(21)'	1.5284(3)
Ru(1)	C(23)	2.0394(4)	C(19)'	C(22)'	1.5481(4)
Ru(1)	C(29)	1.8236(4)	C(23)'	C(24)'	1.3775(3)
Ru(1)'	Cl(2)'	2.4534(6)	C(23)'	C(28)'	1.4117(2)
Ru(1)'	P(3)'	2.4178(5)	C(24)'	C(25)'	1.3808(3)
Ru(1)'	P(13)'	2.4259(5)	C(25)'	C(26)'	1.3948(2)
Ru(1)'	C(23)'	2.0438(4)	C(26)'	C(27)'	1.3241(3)
Ru(1)'	C(29)'	1.8129(4)	C(27)'	C(28)'	1.4034(3)
P(3)	C(4)	1.8221(3)	C(15)	C(16)	1.5001(3)
P(3)	C(5)	1.8887(4)	C(15)	C(17)	1.5243(3)
P(3)	C(9)	1.8887(4)	C(15)	C(18)	1.5362(3)
P(13)	C(14)	1.8263(4)	C(19)	C(20)	1.5160(3)
P(13)	C(15)	1.9007(4)	C(19)	C(21)	1.5350(3)
P(13)	C(19)	1.8927(4)	C(19)	C(22)	1.5441(4)
P(3)'	C(4)'	1.8191(3)	C(23)	C(24)	1.3909(3)
P(3)'	C(5)'	1.8911(4)	C(23)	C(28)	1.4087(2)
P(3)'	C(9)'	1.8635(4)	C(24)	C(25)	1.3812(3)
P(13)'	C(14)'	1.8032(4)	C(25)	C(26)	1.3798(2)
P(13)'	C(15)'	1.8909(4)	C(26)	C(27)	1.3853(3)
P(13)'	C(19)'	1.8866(4)	C(27)	C(28)	1.3708(3)
O(30)	C(29)	1.0871(2)	C(5)'	C(6)'	1.5309(2)
O(30)'	C(29)'	1.0736(2)	C(5)'	C(7)'	1.5331(3)
C(5)	C(6)	1.5216(3)	C(5)'	C(8)'	1.5221(4)
C(5)	C(7)	1.5428(3)	C(9)'	C(10)'	1.5360(3)
C(5)	C(8)	1.5169(4)	C(9)'	C(11)'	1.5451(3)
C(9)	C(10)	1.5215(3)	C(9)'	C(12)'	1.5394(3)
C(9)	C(11)	1.5580(3)	C(15)'	C(16)'	1.5300(3)
C(9)	C(12)	1.5125(3)	C(15)'	C(17)'	1.5132(3)

Cl(2)	Ru(1)	P(3)	87.685(14)	C(5)	P(3)	C(9)	110.183(15)
Cl(2)	Ru(1)	P(13)	91.457(14)	Ru(1)	P(13)	C(14)	112.079(13)
Cl(2)	Ru(1)	C(23)	102.948(14)	Ru(1)	P(13)	C(15)	110.270(17)
Cl(2)	Ru(1)	C(29)	167.143(4)	Ru(1)	P(13)	C(19)	118.831(12)
P(3)	Ru(1)	P(13)	172.6580(20)	C(14)	P(13)	C(15)	103.112(13)
P(3)	Ru(1)	C(23)	94.563(18)	C(14)	P(13)	C(19)	101.263(18)
P(3)	Ru(1)	C(29)	92.293(14)	C(15)	P(13)	C(19)	109.883(14)
P(13)	Ru(1)	C(23)	92.736(18)	Ru(1)'	P(3)'	C(4)'	111.947(13)
P(13)	Ru(1)	C(29)	86.924(14)	Ru(1)'	P(3)'	C(5)'	106.624(17)
C(23)	Ru(1)	C(29)	89.874(15)	Ru(1)'	P(3)'	C(9)'	121.571(15)
Cl(2)'	Ru(1)'	P(3)'	88.912(14)	C(4)'	P(3)'	C(5)'	102.913(12)
Cl(2)'	Ru(1)'	P(13)'	90.199(14)	C(4)'	P(3)'	C(9)'	101.910(20)
Cl(2)'	Ru(1)'	C(23)'	105.167(13)	C(5)'	P(3)'	C(9)'	110.381(15)
Cl(2)'	Ru(1)'	C(29)'	165.042(5)	Ru(1)'	P(13)'	C(14)'	111.471(13)
P(3)'	Ru(1)'	P(13)'	173.6980(20)	Ru(1)'	P(13)'	C(15)'	110.430(18)
P(3)'	Ru(1)'	C(23)'	93.210(18)	Ru(1)'	P(13)'	C(19)'	119.773(13)
P(3)'	Ru(1)'	C(29)'	90.804(14)	C(14)'	P(13)'	C(15)'	103.100(13)
P(13)'	Ru(1)'	C(23)'	93.044(18)	C(14)'	P(13)'	C(19)'	100.710(16)
P(13)'	Ru(1)'	C(29)'	88.446(14)	C(15)'	P(13)'	C(19)'	109.756(15)
C(23)'	Ru(1)'	C(29)'	89.782(15)	P(3)	C(5)	C(6)	114.501(15)
Ru(1)	P(3)	C(4)	114.408(13)	P(3)	C(5)	C(7)	110.348(14)
Ru(1)	P(3)	C(5)	105.760(17)	P(3)	C(5)	C(8)	105.817(16)
Ru(1)	P(3)	C(9)	121.222(15)	C(6)	C(5)	C(7)	108.712(15)
C(4)	P(3)	C(5)	102.613(13)	C(6)	C(5)	C(8)	109.434(17)
C(4)	P(3)	C(9)	101.220(20)	C(7)	C(5)	C(8)	107.810(18)

P(3)	C(9)	C(10)	113.981(15)
P(3)	C(9)	C(11)	107.875(16)
P(3)	C(9)	C(12)	111.391(19)
C(10)	C(9)	C(11)	105.234(17)
C(10)	C(9)	C(12)	110.375(13)
C(11)	C(9)	C(12)	107.572(13)
P(13)	C(15)	C(16)	113.860(17)
P(13)	C(15)	C(17)	109.854(13)
P(13)	C(15)	C(18)	107.090(14)
C(16)	C(15)	C(17)	110.082(14)
C(16)	C(15)	C(18)	107.763(14)
C(17)	C(15)	C(18)	107.968(18)
P(13)	C(19)	C(20)	107.183(14)
P(13)	C(19)	C(21)	113.280(15)
P(13)	C(19)	C(22)	111.871(17)
C(20)	C(19)	C(21)	107.171(16)
C(20)	C(19)	C(22)	109.231(13)
C(21)	C(19)	C(22)	107.948(15)
Ru(1)	C(23)	C(24)	126.188(11)
Ru(1)	C(23)	C(28)	117.328(15)
C(24)	C(23)	C(28)	116.413(14)
C(23)	C(24)	C(25)	121.691(11)
C(24)	C(25)	C(26)	120.790(13)
C(25)	C(26)	C(27)	118.678(14)
C(26)	C(27)	C(28)	120.564(11)
C(23)	C(28)	C(27)	121.842(13)
Ru(1)	C(29)	O(30)	179.850(12)
P(3)'	C(5)'	C(6)'	114.328(14)
P(3)'	C(5)'	C(7)'	111.159(13)
P(3)'	C(5)'	C(8)'	105.628(16)
C(6)'	C(5)'	C(7)'	110.073(15)
C(6)'	C(5)'	C(8)'	107.901(17)
C(7)'	C(5)'	C(8)'	107.377(16)
P(3)'	C(9)'	C(10)'	113.862(15)
P(3)'	C(9)'	C(11)'	110.180(16)
P(3)'	C(9)'	C(12)'	111.844(18)
C(10)'	C(9)'	C(11)'	106.344(18)
C(10)'	C(9)'	C(12)'	108.000(12)
C(11)'	C(9)'	C(12)'	106.183(11)
P(13)'	C(15)'	C(16)'	113.878(17)
P(13)'	C(15)'	C(17)'	110.401(13)
P(13)'	C(15)'	C(18)'	107.128(14)
C(16)'	C(15)'	C(17)'	109.874(13)
C(16)'	C(15)'	C(18)'	107.356(14)
C(17)'	C(15)'	C(18)'	107.960(18)
P(13)'	C(19)'	C(20)'	107.370(15)
P(13)'	C(19)'	C(21)'	114.031(15)
P(13)'	C(19)'	C(22)'	111.743(16)
C(20)'	C(19)'	C(21)'	108.638(16)
C(20)'	C(19)'	C(22)'	107.308(14)
C(21)'	C(19)'	C(22)'	107.519(16)
Ru(1)'	C(23)'	C(24)'	126.972(10)
Ru(1)'	C(23)'	C(28)'	115.814(15)
C(24)'	C(23)'	C(28)'	117.198(15)
C(23)'	C(24)'	C(25)'	122.411(10)
C(24)'	C(25)'	C(26)'	119.373(14)
C(25)'	C(26)'	C(27)'	119.410(15)
C(26)'	C(27)'	C(28)'	122.543(10)
C(23)'	C(28)'	C(27)'	119.047(14)
Ru(1)'	C(29)'	O(30)'	176.8400(10)

© 1999 American Chemical Society, J. Am. Chem. Soc., Huang ja990621w Supporting Info Page 22

Table S12. Bond Distances (Å) and Angles (°) for $RuCl_2(CO)(P^iPr_3)_2$

Ru-C(1)	177.4(4)	C(11)-C(12)	152.8(14)
Ru-Cl(1)	235.8(2)	C(12)-C(13)	161.8(12)
Ru-Cl(2)	238.2(3)	C(14)-C(15)	158.3(14)
Ru-P(2)	240.2(2)	C(15)-C(16)	156.9(14)
Ru-P(1)	240.6(3)	C(17)-C(18)	154.9(14)
P(1)-C(15)	186.0(11)	C(18)-C(19)	147(2)
P(1)-C(12)	187.5(8)	C(21)-C(22)	154.4(14)
P(1)-C(18)	188.8(9)	C(22)-C(23)	143.6(13)
P(2)-C(25)	182.6(10)	C(24)-C(25)	157.4(14)
P(2)-C(22)	185.2(11)	C(25)-C(26)	152.1(14)
P(2)-C(28)	186.6(10)	C(27)-C(28)	148(2)
C(1)-O(1)	116.4(5)	C(28)-C(29)	148.9(14)

C(1)-Ru-Cl(1)	98.0(5)	C(28)-P(2)-Ru	112.1(3)
C(1)-Ru-Cl(2)	96.0(5)	O(1)-C(1)-Ru	174(2)
Cl(1)-Ru-Cl(2)	165.97(3)	C(11)-C(12)-C(13)	105.6(7)
C(1)-Ru-P(2)	97.7(4)	C(11)-C(12)-P(1)	108.5(6)
Cl(1)-Ru-P(2)	88.06(9)	C(13)-C(12)-P(1)	112.2(6)
Cl(2)-Ru-P(2)	90.89(9)	C(16)-C(15)-C(14)	110.2(9)
C(1)-Ru-P(1)	92.1(4)	C(16)-C(15)-P(1)	119.2(8)
Cl(1)-Ru-P(1)	90.99(9)	C(14)-C(15)-P(1)	111.3(8)
Cl(2)-Ru-P(1)	87.66(9)	C(19)-C(18)-C(17)	109.9(9)
P(2)-Ru-P(1)	170.15(2)	C(19)-C(18)-P(1)	114.0(7)
C(15)-P(1)-C(12)	101.8(5)	C(17)-C(18)-P(1)	110.9(7)
C(15)-P(1)-C(18)	110.8(5)	C(23)-C(22)-C(21)	115.0(10)
C(12)-P(1)-C(18)	103.5(4)	C(23)-C(22)-P(2)	116.2(7)
C(15)-P(1)-Ru	114.6(3)	C(21)-C(22)-P(2)	112.1(7)
C(12)-P(1)-Ru	110.2(3)	C(26)-C(25)-C(24)	111.8(9)
C(18)-P(1)-Ru	114.7(3)	C(26)-C(25)-P(2)	116.5(7)
C(25)-P(2)-C(22)	102.9(5)	C(24)-C(25)-P(2)	115.3(7)
C(25)-P(2)-C(28)	110.5(5)	C(29)-C(28)-C(27)	110.4(9)
C(22)-P(2)-C(28)	107.0(5)	C(29)-C(28)-P(2)	116.1(8)
C(25)-P(2)-Ru	116.8(3)	C(27)-C(28)-P(2)	111.6(7)
C(22)-P(2)-Ru	106.7(3)		