

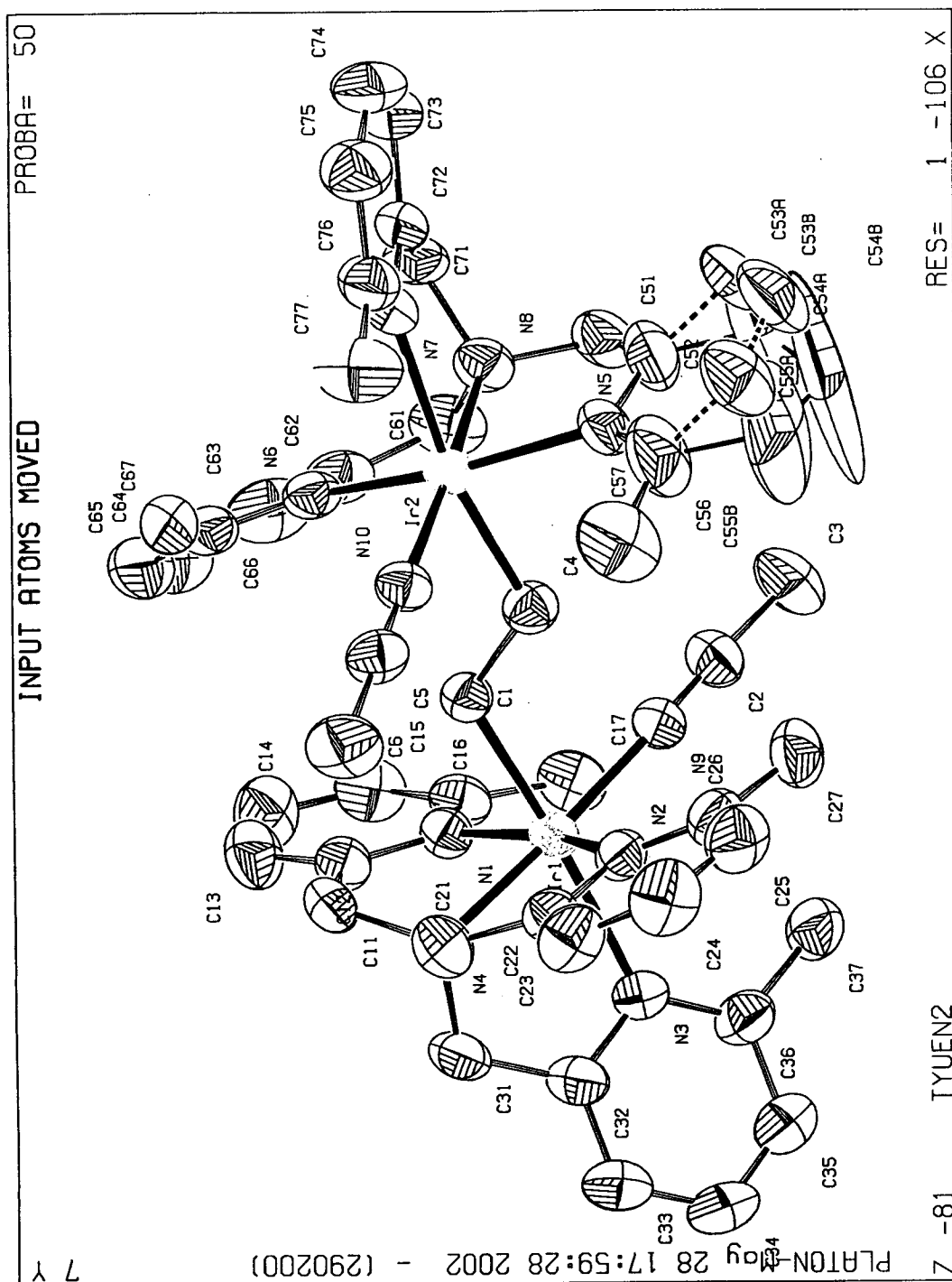


Figure 1. ORTEP-plot of **5** (thermal ellipsoids at the 50% probability level)

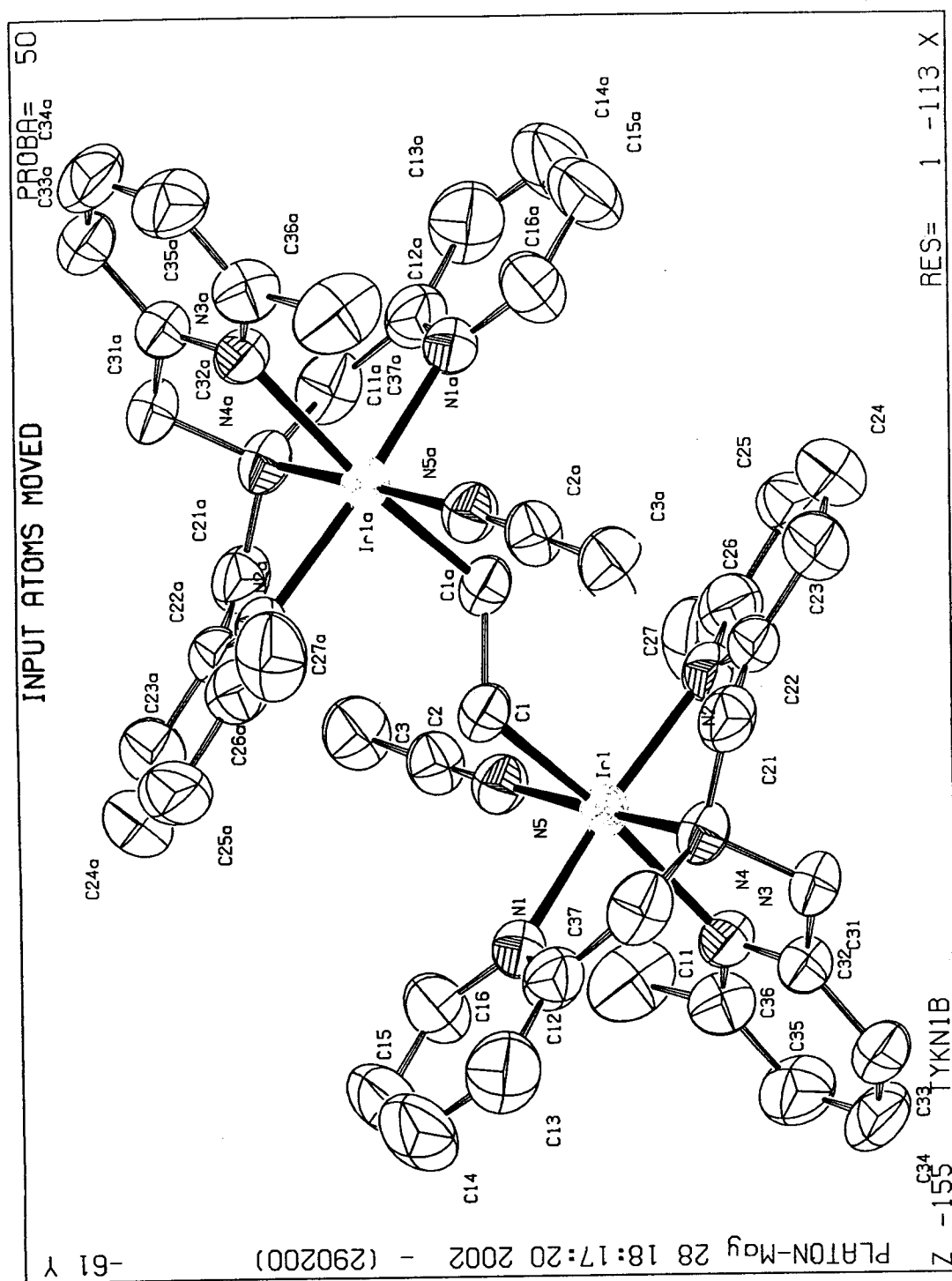


Figure 2. ORTEP-plot of $[6b](PF_6)_4 \cdot DMSO$ (thermal ellipsoids at the 50% probability level)

Table 1. Crystallographic data for [5](PF₆)₄.MeCN and [6b](PF₆)₄.DMSO.

	[5](PF ₆) ₄ .MeCN	[6b](PF ₆) ₄ .DMSO
Empirical formula	C ₅₀ H ₆₁ F ₂₄ N ₁₁ P ₄ Ir ₂	C ₂₅ H ₃₃ F ₁₂ N ₅ P ₂ OSIr
Crystal size [mm]	0.42 x 0.26 x 0.18	0.50 x 0.18 x 0.11
Formula weight	1780.38	933.76
T [K]	293(2)	293(2)
Crystal system	Triclinic	Triclinic
Space group	P -1	P -1
a [Å]	12.1371(10)	12.500(2)
b [Å]	14.9716(12)	12.837(4)
c [Å]	19.096(2)	13.093(5)
α [°]	73.115(8)	61.49(3)
β [°]	80.005(8)	75.105(19)
γ [°]	73.965(8)	68.503(18)
V [Å ³]	3174.7(5)	1709.0(9)
ρ _{calcd.} [gcm ⁻³]	1.862	1.815
Z	2	2
Diffractionmeter (scan)	Enraf-Nonius CAD4 (ω/2 th -scan)	Enraf-Nonius CAD4 (ω/2 th -scan)
Radiation	Mo-K _α	Mo-K _α
Wavelength [Å]	0.71073	0.71073
F(000)	1736	914
θ range [°]	2.70 to 27.49	2.93 to 27.47
Index ranges	-15 ≤ h ≤ 15 0 ≤ k ≤ 19 -23 ≤ l ≤ 24	-16 ≤ h ≤ 0 -16 ≤ k ≤ 15 -16 ≤ l ≤ 16
Measured reflections	15112	8189
Unique reflections	14554 (R _{int} = 0.0204)	7831 (R _{int} = 0.0149)
Observed refl. [I _o > 2σ(I _o)]	11003	6621
Refined parameters	857	430
Goodness-of-fit on F ²	1.065	1.093
R ₁ [I _o > 2σ(I _o)]	0.0379	0.0408
wR ₂ [all data]	0.0966	0.1101
ρ _{fin} (max/min) [e. Å ⁻³]	1.162 / -0.809	1.159 / -0.914

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{5}](\text{PF}_6)_4 \cdot \text{MeCN}$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalised U_{ij} tensor

	x	y	z	U(eq)
Ir(1)	2270(1)	1641(1)	1673(1)	37(1)
N(1)	3562(4)	363(3)	1853(2)	41(1)
N(2)	1382(4)	3085(3)	1307(2)	43(1)
N(3)	1467(4)	1352(3)	797(2)	44(1)
N(4)	3429(4)	1994(3)	792(2)	43(1)
C(1)	3072(5)	2072(4)	2371(3)	43(1)
N(9)	1222(4)	1214(3)	2573(2)	44(1)
C(2)	675(5)	938(5)	3097(3)	52(1)
C(3)	-62(7)	584(7)	3739(4)	83(2)
C(11)	4606(5)	1511(4)	1037(3)	48(1)
C(12)	4607(5)	533(4)	1520(3)	48(1)
C(13)	5614(6)	-153(5)	1638(4)	64(2)
C(14)	5603(6)	-1039(5)	2097(4)	71(2)
C(15)	4560(6)	-1234(5)	2393(4)	63(2)
C(16)	3539(5)	-540(4)	2261(3)	48(1)
C(17)	2420(6)	-811(4)	2550(4)	58(2)
C(21)	3248(6)	3059(4)	555(4)	56(2)
C(22)	2055(5)	3567(4)	753(3)	48(1)
C(23)	1712(6)	4529(5)	422(4)	64(2)
C(24)	665(7)	5038(5)	664(5)	74(2)
C(25)	-29(6)	4576(5)	1208(4)	68(2)
C(26)	327(5)	3596(5)	1526(4)	53(1)
C(27)	-455(5)	3126(5)	2114(4)	66(2)
C(31)	3312(6)	1593(5)	187(3)	56(2)
C(32)	2107(6)	1583(5)	142(3)	51(1)
C(33)	1713(7)	1707(6)	-515(4)	73(2)
C(34)	651(8)	1554(8)	-521(4)	92(3)
C(35)	30(7)	1270(6)	136(4)	74(2)
C(36)	427(5)	1187(5)	787(3)	52(1)
C(37)	-278(6)	878(5)	1491(4)	64(2)
Ir(2)	3034(1)	3176(1)	3552(1)	36(1)
N(5)	1331(4)	3834(4)	3844(3)	51(1)
N(6)	4586(4)	2178(3)	3481(2)	47(1)
N(7)	3498(4)	3772(4)	4389(2)	47(1)
N(8)	2795(4)	2129(4)	4480(3)	50(1)
C(4)	2310(5)	2631(4)	2885(3)	45(1)
N(10)	3402(4)	4093(3)	2588(2)	43(1)
C(5)	3630(5)	4527(4)	2024(3)	50(1)
C(6)	3907(7)	5123(5)	1295(4)	72(2)
C(51)	1538(6)	2273(6)	4726(4)	67(2)
C(52)	913(6)	3261(6)	4462(4)	76(2)
C(53A)	-20(19)	3772(18)	4925(10)	66(7)
C(54A)	-550(2)	4690(2)	4656(13)	94(10)
C(55A)	-240(3)	5213(19)	3990(14)	81(8)
C(53B)	-220(2)	3310(3)	4720(2)	170(17)
C(54B)	-980(3)	4130(4)	4310(4)	350(5)
C(55B)	-560(2)	4790(3)	3780(3)	200(2)
C(56)	662(7)	4699(7)	3529(5)	91(3)
C(57)	1006(8)	5311(6)	2821(5)	94(3)

C(61)	3314(7)	1204(4)	4261(4)	63(2)
C(62)	4434(6)	1258(5)	3812(3)	58(2)
C(63)	5267(8)	466(6)	3707(5)	81(2)
C(64)	6262(8)	568(7)	3277(5)	93(3)
C(65)	6455(7)	1468(7)	3007(5)	84(3)
C(66)	5634(5)	2275(5)	3134(3)	58(2)
C(67)	5905(6)	3233(6)	2934(4)	68(2)
C(71)	3463(6)	2156(5)	5063(3)	57(2)
C(72)	3457(5)	3145(5)	5058(3)	52(1)
C(73)	3501(6)	3384(6)	5703(4)	64(2)
C(74)	3597(7)	4279(7)	5665(4)	80(2)
C(75)	3654(7)	4936(6)	4987(4)	73(2)
C(76)	3591(6)	4676(5)	4346(4)	58(2)
C(77)	3614(8)	5391(6)	3637(4)	84(3)
P(1)	6783(2)	3131(1)	650(1)	58(1)
F(1)	5738(4)	3074(3)	1296(2)	75(1)
F(2)	7618(5)	3101(5)	1202(3)	121(2)
F(3)	7777(4)	3221(3)	-21(3)	85(1)
F(4)	5916(4)	3164(3)	97(2)	73(1)
F(5)	7123(4)	1999(3)	808(3)	93(1)
F(6)	6406(4)	4268(3)	469(3)	91(2)
P(2)	852(2)	1741(2)	7135(1)	70(1)
F(7)	-184(6)	1676(8)	7697(5)	203(4)
F(8)	1621(6)	965(5)	7720(4)	147(3)
F(9)	1974(9)	1732(8)	6632(5)	236(6)
F(10)	188(10)	2505(6)	6558(5)	230(5)
F(11)	683(12)	980(8)	6844(7)	264(6)
F(12)	1011(8)	2503(5)	7473(6)	191(4)
P(3)	3467(2)	3924(1)	8017(1)	67(1)
F(13)	4554(8)	4264(9)	7803(6)	231(5)
F(14)	2804(9)	4810(5)	7496(4)	185(4)
F(15)	2368(9)	3611(9)	8253(8)	264(7)
F(16)	4102(7)	3000(5)	8542(3)	168(3)
F(17)	3127(9)	4434(7)	8625(4)	207(4)
F(18)	3786(10)	3420(5)	7401(4)	196(4)
P(4)	7152(2)	1642(2)	5167(1)	90(1)
F(19)	6353(11)	2546(9)	5033(12)	372(12)
F(20)	6642(16)	1100(12)	5851(4)	349(11)
F(21)	7930(10)	708(8)	5178(11)	363(11)
F(22)	7809(10)	2068(8)	4441(5)	223(5)
F(23)	6425(11)	1270(7)	4813(6)	237(5)
F(24)	7874(17)	1917(13)	5534(7)	386(13)
N(91)	3529(12)	9261(8)	464(6)	147(4)
C(92)	3148(11)	8654(8)	781(6)	105(3)
C(93)	2699(12)	7824(9)	1244(6)	134(4)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for [5](PF₆)₄.MeCN.

Ir(1)-N(9)	2.007(4)
Ir(1)-N(4)	2.041(4)
Ir(1)-N(1)	2.093(4)
Ir(1)-N(2)	2.103(5)
Ir(1)-C(1)	2.105(5)
Ir(1)-N(3)	2.270(4)
N(1)-C(16)	1.356(7)
N(1)-C(12)	1.372(7)
N(2)-C(26)	1.364(7)
N(2)-C(22)	1.374(7)
N(3)-C(36)	1.356(7)
N(3)-C(32)	1.359(7)
N(4)-C(21)	1.488(7)
N(4)-C(31)	1.491(7)
N(4)-C(11)	1.499(7)
C(1)-C(4)	1.501(7)
N(9)-C(2)	1.138(7)
C(2)-C(3)	1.445(8)
C(11)-C(12)	1.487(8)
C(12)-C(13)	1.366(9)
C(13)-C(14)	1.364(10)
C(14)-C(15)	1.366(10)
C(15)-C(16)	1.387(9)
C(16)-C(17)	1.493(8)
C(21)-C(22)	1.478(9)
C(22)-C(23)	1.372(8)
C(23)-C(24)	1.370(10)
C(24)-C(25)	1.366(10)
C(25)-C(26)	1.390(9)
C(26)-C(27)	1.482(9)
C(31)-C(32)	1.484(9)
C(32)-C(33)	1.365(9)
C(33)-C(34)	1.371(11)
C(34)-C(35)	1.363(11)
C(35)-C(36)	1.372(9)
C(36)-C(37)	1.487(8)
Ir(2)-N(10)	2.014(4)
Ir(2)-N(8)	2.035(5)
Ir(2)-N(6)	2.068(5)
Ir(2)-N(5)	2.085(5)
Ir(2)-C(4)	2.109(5)
Ir(2)-N(7)	2.256(5)
N(5)-C(52)	1.353(9)
N(5)-C(56)	1.354(9)
N(6)-C(66)	1.353(8)
N(6)-C(62)	1.387(8)
N(7)-C(72)	1.350(7)
N(7)-C(76)	1.367(8)
N(8)-C(51)	1.491(8)
N(8)-C(61)	1.501(8)
N(8)-C(71)	1.503(8)
N(10)-C(5)	1.117(7)
C(5)-C(6)	1.459(8)
C(51)-C(52)	1.448(11)
C(52)-C(53B)	1.37(2)
C(52)-C(53A)	1.49(2)
C(53A)-C(54A)	1.33(3)
C(54A)-C(55A)	1.34(4)

C(55A)-C(56)	1.47(2)
C(53B)-C(54B)	1.43(5)
C(54B)-C(55B)	1.34(4)
C(55B)-C(56)	1.46(3)
C(56)-C(57)	1.463(12)
C(61)-C(62)	1.485(10)
C(62)-C(63)	1.370(9)
C(63)-C(64)	1.357(13)
C(64)-C(65)	1.365(13)
C(65)-C(66)	1.392(10)
C(66)-C(67)	1.486(10)
C(71)-C(72)	1.475(9)
C(72)-C(73)	1.392(9)
C(73)-C(74)	1.356(11)
C(74)-C(75)	1.383(11)
C(75)-C(76)	1.408(9)
C(76)-C(77)	1.464(10)
P(1)-F(2)	1.568(5)
P(1)-F(5)	1.579(5)
P(1)-F(6)	1.585(5)
P(1)-F(4)	1.597(4)
P(1)-F(3)	1.602(5)
P(1)-F(1)	1.611(4)
P(2)-F(11)	1.478(8)
P(2)-F(10)	1.495(7)
P(2)-F(7)	1.511(7)
P(2)-F(9)	1.523(7)
P(2)-F(12)	1.532(7)
P(2)-F(8)	1.575(7)
P(3)-F(15)	1.489(9)
P(3)-F(13)	1.493(8)
P(3)-F(17)	1.509(7)
P(3)-F(18)	1.515(6)
P(3)-F(14)	1.523(7)
P(3)-F(16)	1.546(6)
P(4)-F(19)	1.414(12)
P(4)-F(24)	1.417(9)
P(4)-F(21)	1.451(11)
P(4)-F(20)	1.459(8)
P(4)-F(23)	1.497(9)
P(4)-F(22)	1.533(9)
N(91)-C(92)	1.106(13)
C(92)-C(93)	1.481(15)

N(9)-Ir(1)-N(4)	175.87(18)
N(9)-Ir(1)-N(1)	95.69(18)
N(4)-Ir(1)-N(1)	80.36(18)
N(9)-Ir(1)-N(2)	100.08(18)
N(4)-Ir(1)-N(2)	83.72(18)
N(1)-Ir(1)-N(2)	162.99(17)
N(9)-Ir(1)-C(1)	85.8(2)
N(4)-Ir(1)-C(1)	92.8(2)
N(1)-Ir(1)-C(1)	86.67(19)
N(2)-Ir(1)-C(1)	88.2(2)
N(9)-Ir(1)-N(3)	100.90(18)
N(4)-Ir(1)-N(3)	80.84(18)
N(1)-Ir(1)-N(3)	96.90(17)
N(2)-Ir(1)-N(3)	86.39(17)
C(1)-Ir(1)-N(3)	172.04(19)
C(16)-N(1)-C(12)	117.8(5)
C(16)-N(1)-Ir(1)	131.5(4)

C(12)-N(1)-Ir(1)	110.5(4)
C(26)-N(2)-C(22)	117.7(5)
C(26)-N(2)-Ir(1)	132.4(4)
C(22)-N(2)-Ir(1)	109.8(4)
C(36)-N(3)-C(32)	117.7(5)
C(36)-N(3)-Ir(1)	132.4(4)
C(32)-N(3)-Ir(1)	108.5(4)
C(21)-N(4)-C(31)	112.0(5)
C(21)-N(4)-C(11)	111.7(4)
C(31)-N(4)-C(11)	107.0(5)
C(21)-N(4)-Ir(1)	109.0(3)
C(31)-N(4)-Ir(1)	110.2(3)
C(11)-N(4)-Ir(1)	106.9(3)
C(4)-C(1)-Ir(1)	117.7(4)
C(2)-N(9)-Ir(1)	176.5(5)
N(9)-C(2)-C(3)	177.0(7)
C(12)-C(11)-N(4)	109.7(5)
C(13)-C(12)-N(1)	122.0(6)
C(13)-C(12)-C(11)	120.9(6)
N(1)-C(12)-C(11)	117.1(5)
C(14)-C(13)-C(12)	120.2(7)
C(13)-C(14)-C(15)	118.1(6)
C(14)-C(15)-C(16)	121.3(6)
N(1)-C(16)-C(15)	120.2(6)
N(1)-C(16)-C(17)	120.6(5)
C(15)-C(16)-C(17)	119.1(6)
C(22)-C(21)-N(4)	112.7(5)
C(23)-C(22)-N(2)	122.8(6)
C(23)-C(22)-C(21)	117.8(6)
N(2)-C(22)-C(21)	119.0(5)
C(24)-C(23)-C(22)	118.7(7)
C(25)-C(24)-C(23)	119.8(6)
C(24)-C(25)-C(26)	120.6(7)
N(2)-C(26)-C(25)	120.3(6)
N(2)-C(26)-C(27)	121.0(6)
C(25)-C(26)-C(27)	118.7(6)
C(32)-C(31)-N(4)	113.2(5)
N(3)-C(32)-C(33)	122.6(6)
N(3)-C(32)-C(31)	115.7(5)
C(33)-C(32)-C(31)	121.5(6)
C(32)-C(33)-C(34)	119.3(7)
C(35)-C(34)-C(33)	118.5(7)
C(34)-C(35)-C(36)	120.9(7)
N(3)-C(36)-C(35)	120.9(6)
N(3)-C(36)-C(37)	119.9(5)
C(35)-C(36)-C(37)	119.2(6)
N(10)-Ir(2)-N(8)	173.40(19)
N(10)-Ir(2)-N(6)	94.08(19)
N(8)-Ir(2)-N(6)	79.9(2)
N(10)-Ir(2)-N(5)	101.83(19)
N(8)-Ir(2)-N(5)	83.9(2)
N(6)-Ir(2)-N(5)	163.1(2)
N(10)-Ir(2)-C(4)	83.1(2)
N(8)-Ir(2)-C(4)	94.3(2)
N(6)-Ir(2)-C(4)	91.7(2)
N(5)-Ir(2)-C(4)	84.7(2)
N(10)-Ir(2)-N(7)	103.20(18)
N(8)-Ir(2)-N(7)	80.24(19)
N(6)-Ir(2)-N(7)	95.88(18)
N(5)-Ir(2)-N(7)	85.96(19)
C(4)-Ir(2)-N(7)	169.66(19)

C(52)-N(5)-C(56)	120.1(6)
C(52)-N(5)-Ir(2)	109.5(4)
C(56)-N(5)-Ir(2)	130.5(5)
C(66)-N(6)-C(62)	118.4(5)
C(66)-N(6)-Ir(2)	131.5(4)
C(62)-N(6)-Ir(2)	109.9(4)
C(72)-N(7)-C(76)	118.5(5)
C(72)-N(7)-Ir(2)	109.6(4)
C(76)-N(7)-Ir(2)	130.7(4)
C(51)-N(8)-C(61)	113.4(5)
C(51)-N(8)-C(71)	111.7(5)
C(61)-N(8)-C(71)	108.2(5)
C(51)-N(8)-Ir(2)	108.9(4)
C(61)-N(8)-Ir(2)	104.7(3)
C(71)-N(8)-Ir(2)	109.6(4)
C(1)-C(4)-Ir(2)	120.5(4)
C(5)-N(10)-Ir(2)	173.1(5)
N(10)-C(5)-C(6)	178.0(7)
C(52)-C(51)-N(8)	112.2(5)
N(5)-C(52)-C(53B)	126.9(15)
N(5)-C(52)-C(51)	120.1(6)
C(53B)-C(52)-C(51)	107.2(15)
N(5)-C(52)-C(53A)	115.1(11)
C(53B)-C(52)-C(53A)	39.9(18)
C(51)-C(52)-C(53A)	123.0(10)
C(54A)-C(53A)-C(52)	120.2(17)
C(53A)-C(54A)-C(55A)	123(2)
C(54A)-C(55A)-C(56)	116(2)
C(52)-C(53B)-C(54B)	113(2)
C(55B)-C(54B)-C(53B)	120(2)
C(54B)-C(55B)-C(56)	124(2)
N(5)-C(56)-C(57)	123.2(7)
N(5)-C(56)-C(55B)	113.1(16)
C(57)-C(56)-C(55B)	119.2(16)
N(5)-C(56)-C(55A)	119.5(13)
C(57)-C(56)-C(55A)	114.1(13)
C(55B)-C(56)-C(55A)	41(2)
C(62)-C(61)-N(8)	109.4(5)
C(63)-C(62)-N(6)	120.9(7)
C(63)-C(62)-C(61)	123.4(7)
N(6)-C(62)-C(61)	115.6(5)
C(64)-C(63)-C(62)	120.3(8)
C(63)-C(64)-C(65)	118.6(7)
C(64)-C(65)-C(66)	121.4(8)
N(6)-C(66)-C(65)	119.3(7)
N(6)-C(66)-C(67)	119.3(6)
C(65)-C(66)-C(67)	121.3(7)
C(72)-C(71)-N(8)	112.6(5)
N(7)-C(72)-C(73)	122.6(6)
N(7)-C(72)-C(71)	116.0(5)
C(73)-C(72)-C(71)	121.2(6)
C(74)-C(73)-C(72)	119.3(7)
C(73)-C(74)-C(75)	119.6(7)
C(74)-C(75)-C(76)	119.8(7)
N(7)-C(76)-C(75)	120.3(6)
N(7)-C(76)-C(77)	120.7(6)
C(75)-C(76)-C(77)	119.0(7)
F(2)-P(1)-F(5)	91.4(3)
F(2)-P(1)-F(6)	90.9(3)
F(5)-P(1)-F(6)	177.7(3)
F(2)-P(1)-F(4)	179.0(3)

F(5)-P(1)-F(4)	88.8(3)
F(6)-P(1)-F(4)	88.9(3)
F(2)-P(1)-F(3)	91.4(3)
F(5)-P(1)-F(3)	91.2(3)
F(6)-P(1)-F(3)	88.8(3)
F(4)-P(1)-F(3)	89.6(2)
F(2)-P(1)-F(1)	91.0(3)
F(5)-P(1)-F(1)	90.3(3)
F(6)-P(1)-F(1)	89.5(2)
F(4)-P(1)-F(1)	88.1(2)
F(3)-P(1)-F(1)	177.1(3)
F(11)-P(2)-F(10)	91.0(6)
F(11)-P(2)-F(7)	92.1(7)
F(10)-P(2)-F(7)	94.5(6)
F(11)-P(2)-F(9)	88.4(7)
F(10)-P(2)-F(9)	91.6(6)
F(7)-P(2)-F(9)	173.9(6)
F(11)-P(2)-F(12)	177.2(7)
F(10)-P(2)-F(12)	90.9(5)
F(7)-P(2)-F(12)	85.8(6)
F(9)-P(2)-F(12)	93.6(6)
F(11)-P(2)-F(8)	90.7(6)
F(10)-P(2)-F(8)	176.3(6)
F(7)-P(2)-F(8)	88.7(5)
F(9)-P(2)-F(8)	85.2(5)
F(12)-P(2)-F(8)	87.5(5)
F(15)-P(3)-F(13)	177.5(8)
F(15)-P(3)-F(17)	86.6(7)
F(13)-P(3)-F(17)	90.9(7)
F(15)-P(3)-F(18)	92.6(7)
F(13)-P(3)-F(18)	89.9(7)
F(17)-P(3)-F(18)	178.9(6)
F(15)-P(3)-F(14)	87.6(6)
F(13)-P(3)-F(14)	92.2(6)
F(17)-P(3)-F(14)	89.9(5)
F(18)-P(3)-F(14)	89.3(4)
F(15)-P(3)-F(16)	90.2(6)
F(13)-P(3)-F(16)	90.1(6)
F(17)-P(3)-F(16)	91.2(5)
F(18)-P(3)-F(16)	89.6(4)
F(14)-P(3)-F(16)	177.4(6)
F(19)-P(4)-F(24)	94.7(11)
F(19)-P(4)-F(21)	169.9(13)
F(24)-P(4)-F(21)	93.6(11)
F(19)-P(4)-F(20)	103.0(10)
F(24)-P(4)-F(20)	93.2(6)
F(21)-P(4)-F(20)	82.4(9)
F(19)-P(4)-F(23)	89.4(9)
F(24)-P(4)-F(23)	175.4(8)
F(21)-P(4)-F(23)	82.5(9)
F(20)-P(4)-F(23)	83.9(6)
F(19)-P(4)-F(22)	85.3(8)
F(24)-P(4)-F(22)	87.7(7)
F(21)-P(4)-F(22)	89.2(7)
F(20)-P(4)-F(22)	171.6(9)
F(23)-P(4)-F(22)	94.6(6)
N(91)-C(92)-C(93)	176.0(15)

Table 4. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\mathbf{5}](\text{PF}_6)_4 \cdot \text{MeCN}$.

	x	y	z	U (eq)
H(1A)	3546	1499	2665	51
H(1B)	3585	2458	2065	51
H(3A)	-596	1117	3889	124
H(3B)	400	204	4132	124
H(3C)	-479	195	3624	124
H(11A)	5165	1465	611	58
H(11B)	4822	1889	1302	58
H(13)	6308	-15	1405	76
H(14)	6286	-1498	2206	85
H(15)	4534	-1845	2688	76
H(17A)	2153	-659	3015	88
H(17B)	2525	-1488	2613	88
H(17C)	1861	-460	2207	88
H(21A)	3775	3246	782	67
H(21B)	3428	3256	26	67
H(23)	2182	4831	41	77
H(24)	426	5696	459	89
H(25)	-745	4921	1367	81
H(27A)	-533	2561	2004	99
H(27B)	-1198	3563	2141	99
H(27C)	-141	2948	2577	99
H(31A)	3601	1972	-278	67
H(31B)	3786	941	261	67
H(33)	2159	1893	-954	88
H(34)	362	1642	-962	110
H(35)	-672	1130	141	88
H(37A)	199	374	1825	95
H(37B)	-888	646	1398	95
H(37C)	-602	1414	1703	95
H(4A)	1836	2222	3210	54
H(4B)	1795	3172	2591	54
H(6A)	3305	5700	1191	107
H(6B)	3976	4774	934	107
H(6C)	4623	5287	1282	107
H(51A)	1226	1860	4547	80
H(51B)	1428	2089	5259	80
H(53A)	-235	3451	5403	79
H(54A)	-1162	4976	4945	112
H(55A)	-575	5866	3829	98
H(53B)	-467	2862	5125	204
H(54B)	-1775	4201	4419	420
H(55B)	-1085	5334	3547	235
H(57A)	1602	5586	2877	140
H(57B)	353	5816	2650	140
H(57C)	1289	4932	2469	140
H(61A)	3430	672	4696	76
H(61B)	2795	1094	3978	76
H(63)	5150	-146	3931	97
H(64)	6801	37	3168	111
H(65)	7151	1542	2732	101
H(67A)	6669	3159	3049	103

H(67B)	5362	3640	3207	103
H(67C)	5859	3517	2417	103
H(71A)	3135	1844	5542	69
H(71B)	4254	1798	4988	69
H(73)	3465	2935	6155	77
H(74)	3623	4449	6091	96
H(75)	3734	5547	4956	87
H(77A)	4152	5108	3283	126
H(77B)	3846	5929	3691	126
H(77C)	2860	5606	3470	126
H(93A)	3223	7442	1602	202
H(93B)	2623	7439	939	202
H(93C)	1959	8052	1491	202

Table 5. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\mathbf{5}](\text{PF}_6)_4 \cdot \text{MeCN}$.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ir(1)	39(1)	39(1)	31(1)	-9(1)	0(1)	-11(1)
N(1)	44(2)	40(2)	40(2)	-12(2)	-2(2)	-10(2)
N(2)	42(2)	46(3)	41(2)	-9(2)	-8(2)	-11(2)
N(3)	51(3)	44(3)	39(2)	-13(2)	-8(2)	-12(2)
N(4)	48(3)	46(3)	36(2)	-10(2)	1(2)	-16(2)
C(1)	42(3)	46(3)	41(3)	-15(2)	-4(2)	-7(2)
N(9)	45(3)	48(3)	37(2)	-8(2)	-2(2)	-13(2)
C(2)	53(3)	55(4)	48(3)	-14(3)	3(3)	-17(3)
C(3)	81(5)	106(6)	56(4)	-16(4)	23(4)	-36(5)
C(11)	44(3)	53(3)	48(3)	-18(3)	7(3)	-12(3)
C(12)	47(3)	49(3)	50(3)	-20(3)	-3(3)	-9(3)
C(13)	49(4)	61(4)	77(5)	-27(4)	1(3)	-3(3)
C(14)	59(4)	58(4)	88(5)	-22(4)	-14(4)	7(3)
C(15)	75(5)	46(4)	61(4)	-11(3)	-9(3)	-2(3)
C(16)	60(4)	42(3)	43(3)	-15(2)	-2(3)	-10(3)
C(17)	74(4)	44(3)	52(4)	-5(3)	-2(3)	-16(3)
C(21)	61(4)	48(3)	54(4)	-4(3)	4(3)	-22(3)
C(22)	51(3)	49(3)	44(3)	-6(3)	-8(3)	-18(3)
C(23)	69(4)	50(4)	66(4)	2(3)	-20(4)	-14(3)
C(24)	80(5)	43(4)	84(5)	5(4)	-23(4)	-4(4)
C(25)	61(4)	60(4)	75(5)	-17(4)	-19(4)	6(3)
C(26)	49(3)	55(4)	53(4)	-15(3)	-14(3)	-4(3)
C(27)	41(3)	74(5)	72(5)	-18(4)	-3(3)	-1(3)
C(31)	64(4)	70(4)	38(3)	-20(3)	8(3)	-26(3)
C(32)	62(4)	57(4)	37(3)	-14(3)	-1(3)	-18(3)
C(33)	80(5)	99(6)	39(4)	-13(4)	-6(3)	-25(4)
C(34)	86(6)	151(9)	54(5)	-35(5)	-19(4)	-38(6)
C(35)	64(4)	104(6)	62(4)	-23(4)	-16(4)	-27(4)
C(36)	59(4)	57(4)	49(3)	-12(3)	-14(3)	-21(3)
C(37)	57(4)	80(5)	55(4)	-5(3)	-8(3)	-31(4)
Ir(2)	40(1)	36(1)	29(1)	-7(1)	-3(1)	-5(1)
N(5)	42(3)	58(3)	48(3)	-20(2)	3(2)	0(2)
N(6)	51(3)	48(3)	36(2)	-11(2)	-12(2)	1(2)
N(7)	46(3)	60(3)	35(2)	-14(2)	3(2)	-15(2)
N(8)	59(3)	49(3)	37(2)	-2(2)	-2(2)	-14(2)
C(4)	48(3)	44(3)	46(3)	-16(3)	-7(3)	-8(2)
N(10)	50(3)	40(2)	36(2)	-7(2)	-4(2)	-8(2)
C(5)	59(4)	43(3)	43(3)	-3(3)	-14(3)	-6(3)
C(6)	94(5)	61(4)	48(4)	12(3)	-11(4)	-24(4)
C(51)	71(4)	89(5)	46(4)	-13(3)	13(3)	-43(4)
C(52)	46(4)	103(6)	63(4)	-10(4)	8(3)	-10(4)
C(53A)	64(12)	63(13)	50(10)	-9(8)	20(8)	-4(10)
C(54A)	69(15)	110(2)	65(14)	-18(12)	20(10)	18(13)
C(55A)	78(17)	62(13)	80(15)	-19(10)	11(11)	10(11)
C(53B)	76(14)	130(2)	250(3)	-30(2)	77(18)	-9(15)
C(54B)	71(18)	240(5)	490(8)	110(5)	140(3)	50(2)
C(55B)	55(14)	180(4)	260(4)	-10(3)	10(2)	53(18)
C(56)	57(4)	95(6)	89(6)	-18(5)	4(4)	19(4)
C(57)	101(7)	61(5)	87(6)	-8(4)	-7(5)	17(4)

C(61)	94(5)	36(3)	48(4)	4(3)	-7(3)	-11(3)
C(62)	71(4)	46(3)	45(3)	-7(3)	-22(3)	9(3)
C(63)	105(7)	55(4)	71(5)	-22(4)	-37(5)	22(4)
C(64)	88(6)	88(6)	78(6)	-36(5)	-27(5)	43(5)
C(65)	60(4)	110(7)	67(5)	-40(5)	-14(4)	27(4)
C(66)	49(3)	79(5)	38(3)	-17(3)	-13(3)	4(3)
C(67)	53(4)	101(6)	50(4)	-16(4)	-3(3)	-23(4)
C(71)	69(4)	66(4)	29(3)	-4(3)	-7(3)	-12(3)
C(72)	43(3)	73(4)	34(3)	-13(3)	-1(2)	-10(3)
C(73)	62(4)	89(5)	40(3)	-17(3)	-7(3)	-15(4)
C(74)	93(6)	112(7)	53(4)	-41(4)	-6(4)	-34(5)
C(75)	84(5)	86(5)	66(5)	-36(4)	-1(4)	-36(4)
C(76)	61(4)	73(4)	51(4)	-27(3)	4(3)	-27(3)
C(77)	132(8)	72(5)	63(5)	-15(4)	-5(5)	-52(5)
P(1)	61(1)	64(1)	52(1)	-9(1)	-7(1)	-25(1)
F(1)	91(3)	92(3)	51(2)	-17(2)	6(2)	-45(2)
F(2)	115(4)	176(6)	98(4)	-24(4)	-41(3)	-69(4)
F(3)	61(2)	94(3)	98(3)	-26(3)	17(2)	-28(2)
F(4)	74(3)	100(3)	49(2)	-9(2)	-11(2)	-35(2)
F(5)	82(3)	65(3)	119(4)	-4(3)	-19(3)	-14(2)
F(6)	98(3)	67(3)	106(4)	-25(3)	28(3)	-36(2)
P(2)	79(1)	71(1)	57(1)	-13(1)	11(1)	-28(1)
F(7)	79(4)	349(13)	158(7)	-63(8)	32(4)	-44(6)
F(8)	112(5)	142(6)	142(6)	16(5)	-22(4)	-4(4)
F(9)	202(9)	250(11)	164(8)	-3(8)	118(7)	-40(9)
F(10)	338(13)	147(7)	130(7)	12(5)	-105(8)	60(8)
F(11)	371(16)	206(10)	312(14)	-153(10)	-140(13)	-70(10)
F(12)	240(10)	111(5)	256(10)	-89(6)	-79(8)	-19(6)
P(3)	82(1)	61(1)	57(1)	-16(1)	1(1)	-21(1)
F(13)	167(8)	301(13)	234(11)	-25(10)	30(7)	-147(9)
F(14)	264(10)	101(5)	155(7)	-24(5)	-92(7)	48(6)
F(15)	164(8)	217(11)	409(19)	-26(11)	3(10)	-118(8)
F(16)	208(8)	140(6)	80(4)	17(4)	-11(4)	29(5)
F(17)	277(11)	219(9)	134(6)	-122(7)	-24(7)	10(8)
F(18)	338(12)	115(5)	113(5)	-67(4)	-73(7)	51(6)
P(4)	83(2)	118(2)	67(1)	-19(1)	-20(1)	-17(2)
F(19)	218(12)	182(11)	700(3)	-232(17)	131(17)	-12(9)
F(20)	590(2)	550(2)	79(5)	-81(9)	76(9)	-470(2)
F(21)	147(9)	165(10)	590(3)	71(14)	48(13)	25(7)
F(22)	242(11)	217(10)	155(8)	-5(7)	56(7)	-58(9)
F(23)	366(15)	196(9)	198(9)	-17(7)	-165(10)	-97(10)
F(24)	560(3)	470(2)	237(12)	146(13)	-249(15)	-430(2)
N(91)	220(13)	100(7)	127(9)	-62(7)	30(8)	-43(8)
C(92)	144(10)	91(7)	88(7)	-51(6)	8(7)	-26(7)
C(93)	187(13)	131(10)	106(8)	-65(8)	25(8)	-59(9)

Table 6. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **[6b](PF₆)₄.DMSO**. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalised Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Ir(1)	1373(1)	607(1)	3130(1)	39(1)
N(1)	1052(5)	2449(5)	2649(4)	53(1)
N(2)	1300(5)	-1098(5)	3409(4)	51(1)
N(3)	2587(4)	926(5)	1471(4)	47(1)
N(4)	224(4)	1178(5)	1984(4)	47(1)
N(5)	2439(4)	34(5)	4340(4)	49(1)
C(1)	78(5)	614(5)	4534(5)	47(1)
C(2)	2952(5)	-282(6)	5088(5)	52(1)
C(3)	3620(7)	-738(7)	6045(6)	70(2)
C(11)	-456(6)	2500(6)	1750(6)	63(2)
C(12)	152(7)	3147(6)	1983(6)	63(2)
C(13)	-185(10)	4439(8)	1583(8)	100(3)
C(14)	428(12)	4960(8)	1890(9)	110(4)
C(15)	1309(11)	4249(8)	2562(9)	101(3)
C(16)	1611(7)	2983(7)	2931(7)	71(2)
C(21)	-492(6)	307(7)	2543(6)	64(2)
C(22)	289(7)	-973(7)	3082(5)	61(2)
C(23)	-67(10)	-1959(10)	3281(8)	92(3)
C(24)	663(14)	-3147(10)	3867(10)	111(4)
C(25)	1671(10)	-3271(7)	4119(8)	89(3)
C(26)	2014(7)	-2231(6)	3881(6)	68(2)
C(27)	3181(8)	-2409(8)	4098(8)	90(3)
C(31)	846(5)	1051(6)	879(5)	52(1)
C(32)	2009(5)	1288(5)	564(5)	49(1)
C(33)	2469(7)	1719(7)	-581(5)	64(2)
C(34)	3582(8)	1792(9)	-819(6)	79(2)
C(35)	4187(7)	1421(9)	104(7)	80(2)
C(36)	3674(6)	1016(6)	1230(6)	59(2)
C(37)	4325(7)	683(10)	2212(8)	90(3)
P(1)	7458(2)	2199(2)	9658(2)	66(1)
F(1)	7491(12)	944(8)	10715(8)	203(5)
F(2)	6130(5)	2741(7)	9964(6)	127(2)
F(3)	7376(8)	3465(7)	8593(8)	179(4)
F(4)	8748(5)	1671(10)	9356(9)	180(4)
F(5)	7173(6)	1714(7)	8897(6)	123(2)
F(6)	7764(6)	2654(8)	10431(8)	163(4)
P(2)	3154(2)	2829(2)	5604(2)	72(1)
F(7)	3312(10)	3897(8)	4450(9)	226(6)
F(8)	4351(8)	2086(11)	5570(15)	301(10)
F(9)	2990(9)	1734(7)	6806(6)	166(3)
F(10)	1985(7)	3531(9)	5638(17)	316(11)
F(11)	3409(19)	3520(13)	6066(14)	321(10)
F(12)	2868(17)	2138(9)	5128(11)	304(10)
S(1)	3722(3)	5597(3)	7889(3)	128(1)
O(41)	2965(5)	6762(6)	7064(6)	99(2)
C(42)	4599(11)	4690(11)	7122(11)	120(4)
C(43)	4744(16)	5846(15)	8225(15)	198(10)

Table 7. Bond lengths [Å] and angles [°] for [6b](PF₆)₄.DMSO.

Ir(1)-N(5)	2.020(5)
Ir(1)-N(4)	2.034(5)
Ir(1)-N(1)	2.041(5)
Ir(1)-N(2)	2.073(5)
Ir(1)-C(1)	2.116(5)
Ir(1)-N(3)	2.258(5)
N(1)-C(16)	1.349(9)
N(1)-C(12)	1.360(9)
N(2)-C(26)	1.330(9)
N(2)-C(22)	1.368(9)
N(3)-C(36)	1.348(8)
N(3)-C(32)	1.349(7)
N(4)-C(21)	1.484(8)
N(4)-C(11)	1.509(8)
N(4)-C(31)	1.509(7)
N(5)-C(2)	1.135(7)
C(1)-C(1)#1	1.510(11)
C(2)-C(3)	1.446(8)
C(11)-C(12)	1.477(10)
C(12)-C(13)	1.405(11)
C(13)-C(14)	1.410(15)
C(14)-C(15)	1.347(15)
C(15)-C(16)	1.382(11)
C(21)-C(22)	1.491(11)
C(22)-C(23)	1.379(10)
C(23)-C(24)	1.404(16)
C(24)-C(25)	1.319(16)
C(25)-C(26)	1.420(12)
C(26)-C(27)	1.473(12)
C(31)-C(32)	1.507(8)
C(32)-C(33)	1.371(8)
C(33)-C(34)	1.373(11)
C(34)-C(35)	1.384(12)
C(35)-C(36)	1.372(10)
C(36)-C(37)	1.503(10)
P(1)-F(4)	1.531(6)
P(1)-F(1)	1.537(8)
P(1)-F(3)	1.544(8)
P(1)-F(6)	1.561(6)
P(1)-F(5)	1.563(5)
P(1)-F(2)	1.575(6)
P(2)-F(10)	1.411(9)
P(2)-F(11)	1.440(9)
P(2)-F(8)	1.452(9)
P(2)-F(12)	1.475(8)
P(2)-F(7)	1.507(8)
P(2)-F(9)	1.558(7)
S(1)-O(41)	1.497(7)
S(1)-C(43)	1.629(17)
S(1)-C(42)	1.784(10)
N(5)-Ir(1)-N(4)	176.76(17)
N(5)-Ir(1)-N(1)	95.2(2)
N(4)-Ir(1)-N(1)	84.8(2)
N(5)-Ir(1)-N(2)	99.3(2)
N(4)-Ir(1)-N(2)	80.4(2)
N(1)-Ir(1)-N(2)	164.7(2)
N(5)-Ir(1)-C(1)	83.0(2)

N(4)-Ir(1)-C(1)	93.8(2)
N(1)-Ir(1)-C(1)	86.6(2)
N(2)-Ir(1)-C(1)	90.2(2)
N(5)-Ir(1)-N(3)	102.42(19)
N(4)-Ir(1)-N(3)	80.82(18)
N(1)-Ir(1)-N(3)	85.18(19)
N(2)-Ir(1)-N(3)	96.46(18)
C(1)-Ir(1)-N(3)	170.55(18)
C(16)-N(1)-C(12)	120.8(6)
C(16)-N(1)-Ir(1)	127.4(5)
C(12)-N(1)-Ir(1)	111.8(4)
C(26)-N(2)-C(22)	118.0(6)
C(26)-N(2)-Ir(1)	131.6(5)
C(22)-N(2)-Ir(1)	110.3(4)
C(36)-N(3)-C(32)	117.6(5)
C(36)-N(3)-Ir(1)	131.1(4)
C(32)-N(3)-Ir(1)	110.1(4)
C(21)-N(4)-C(11)	113.8(5)
C(21)-N(4)-C(31)	106.7(5)
C(11)-N(4)-C(31)	112.0(5)
C(21)-N(4)-Ir(1)	106.3(4)
C(11)-N(4)-Ir(1)	107.4(4)
C(31)-N(4)-Ir(1)	110.5(3)
C(2)-N(5)-Ir(1)	173.9(5)
C(1)#1-C(1)-Ir(1)	118.0(5)
N(5)-C(2)-C(3)	177.6(7)
C(12)-C(11)-N(4)	113.4(5)
N(1)-C(12)-C(13)	119.0(8)
N(1)-C(12)-C(11)	118.0(6)
C(13)-C(12)-C(11)	123.0(7)
C(12)-C(13)-C(14)	118.4(9)
C(15)-C(14)-C(13)	121.5(8)
C(14)-C(15)-C(16)	118.0(9)
N(1)-C(16)-C(15)	122.3(8)
N(4)-C(21)-C(22)	108.2(5)
N(2)-C(22)-C(23)	123.8(8)
N(2)-C(22)-C(21)	117.0(5)
C(23)-C(22)-C(21)	119.1(8)
C(22)-C(23)-C(24)	116.7(10)
C(25)-C(24)-C(23)	119.6(9)
C(24)-C(25)-C(26)	121.8(9)
N(2)-C(26)-C(25)	119.8(8)
N(2)-C(26)-C(27)	120.4(7)
C(25)-C(26)-C(27)	119.8(8)
C(32)-C(31)-N(4)	112.7(5)
N(3)-C(32)-C(33)	123.9(6)
N(3)-C(32)-C(31)	115.7(5)
C(33)-C(32)-C(31)	120.0(6)
C(32)-C(33)-C(34)	118.2(7)
C(33)-C(34)-C(35)	118.6(6)
C(36)-C(35)-C(34)	120.5(7)
N(3)-C(36)-C(35)	121.1(6)
N(3)-C(36)-C(37)	119.2(6)
C(35)-C(36)-C(37)	119.6(7)
F(4)-P(1)-F(1)	88.2(7)
F(4)-P(1)-F(3)	93.7(6)
F(1)-P(1)-F(3)	177.7(6)
F(4)-P(1)-F(6)	89.6(4)
F(1)-P(1)-F(6)	89.7(5)
F(3)-P(1)-F(6)	91.5(5)
F(4)-P(1)-F(5)	89.4(4)

F(1)-P(1)-F(5)	89.4(5)
F(3)-P(1)-F(5)	89.5(5)
F(6)-P(1)-F(5)	178.7(4)
F(4)-P(1)-F(2)	179.7(4)
F(1)-P(1)-F(2)	91.9(6)
F(3)-P(1)-F(2)	86.2(5)
F(6)-P(1)-F(2)	90.6(3)
F(5)-P(1)-F(2)	90.3(3)
F(10)-P(2)-F(11)	88.7(10)
F(10)-P(2)-F(8)	178.8(8)
F(11)-P(2)-F(8)	92.4(11)
F(10)-P(2)-F(12)	90.1(10)
F(11)-P(2)-F(12)	178.8(11)
F(8)-P(2)-F(12)	88.8(9)
F(10)-P(2)-F(7)	85.7(7)
F(11)-P(2)-F(7)	83.3(8)
F(8)-P(2)-F(7)	94.9(7)
F(12)-P(2)-F(7)	96.4(8)
F(10)-P(2)-F(9)	94.1(7)
F(11)-P(2)-F(9)	96.0(7)
F(8)-P(2)-F(9)	85.3(6)
F(12)-P(2)-F(9)	84.3(6)
F(7)-P(2)-F(9)	179.2(6)
O(41)-S(1)-C(43)	112.4(7)
O(41)-S(1)-C(42)	108.9(5)
C(43)-S(1)-C(42)	98.6(7)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:
#1 -x,-y,-z+1

Table 8. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **[6b]**(PF₆)₄.DMSO.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	241	1024	4911	56
H(1B)	-654	1119	4208	56
H(3A)	3490	-1503	6643	105
H(3B)	3388	-141	6361	105
H(3C)	4426	-873	5768	105
H(11A)	-621	2949	940	75
H(11B)	-1188	2508	2235	75
H(13)	-797	4938	1126	120
H(14)	220	5815	1622	132
H(15)	1701	4598	2771	121
H(16)	2221	2482	3391	86
H(21A)	-898	376	1964	77
H(21B)	-1059	501	3136	77
H(23)	-756	-1841	3039	110
H(24)	437	-3843	4075	133
H(25)	2170	-4060	4463	107
H(27A)	3529	-1837	3427	136
H(27B)	3645	-3240	4242	136
H(27C)	3131	-2264	4766	136
H(31A)	950	222	979	63
H(31B)	372	1630	241	63
H(33)	2039	1955	-1179	77
H(34)	3922	2084	-1585	95
H(35)	4947	1446	-41	97
H(37A)	3927	1226	2588	135
H(37B)	5089	767	1908	135
H(37C)	4375	-157	2769	135
H(42A)	4126	4359	6951	181
H(42B)	5184	4023	7596	181
H(42C)	4957	5199	6405	181
H(43A)	4884	5295	9024	297
H(43B)	4513	6687	8125	297
H(43C)	5438	5704	7725	297

Table 9. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **[6b](PF₆)₄.DMSO**.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2hk a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ir(1)	41(1)	40(1)	34(1)	-17(1)	-7(1)	-7(1)
N(1)	67(3)	47(3)	44(3)	-20(2)	-4(2)	-16(2)
N(2)	63(3)	49(3)	41(2)	-24(2)	4(2)	-15(2)
N(3)	48(3)	53(3)	41(2)	-20(2)	-2(2)	-17(2)
N(4)	42(2)	61(3)	40(2)	-24(2)	-5(2)	-12(2)
N(5)	49(3)	51(3)	44(2)	-20(2)	-8(2)	-11(2)
C(1)	51(3)	49(3)	37(3)	-19(2)	-4(2)	-9(2)
C(2)	52(3)	51(3)	55(3)	-24(3)	-16(3)	-8(3)
C(3)	80(5)	63(4)	66(4)	-21(3)	-35(4)	-9(4)
C(11)	52(3)	66(4)	54(3)	-23(3)	-19(3)	5(3)
C(12)	80(5)	50(3)	47(3)	-16(3)	-9(3)	-10(3)
C(13)	142(9)	57(5)	73(5)	-19(4)	-33(6)	3(5)
C(14)	183(12)	47(4)	97(7)	-17(4)	-54(8)	-22(6)
C(15)	169(11)	56(5)	92(6)	-20(4)	-46(7)	-41(6)
C(16)	82(5)	60(4)	81(5)	-33(4)	-17(4)	-21(4)
C(21)	70(4)	92(5)	49(3)	-34(3)	-1(3)	-42(4)
C(22)	82(5)	75(4)	47(3)	-35(3)	17(3)	-48(4)
C(23)	127(8)	100(7)	78(5)	-48(5)	17(5)	-70(7)
C(24)	180(13)	85(7)	92(7)	-46(6)	19(8)	-75(8)
C(25)	123(8)	49(4)	79(6)	-28(4)	15(5)	-23(5)
C(26)	79(5)	49(4)	59(4)	-26(3)	7(3)	-7(3)
C(27)	100(7)	69(5)	92(6)	-42(5)	-36(5)	15(5)
C(31)	55(3)	67(4)	40(3)	-28(3)	-3(2)	-16(3)
C(32)	54(3)	50(3)	42(3)	-19(2)	-4(2)	-15(3)
C(33)	81(5)	75(4)	42(3)	-24(3)	0(3)	-34(4)
C(34)	89(6)	107(6)	48(4)	-34(4)	21(4)	-52(5)
C(35)	66(5)	107(6)	74(5)	-38(5)	16(4)	-46(5)
C(36)	52(4)	62(4)	58(4)	-21(3)	-6(3)	-17(3)
C(37)	57(4)	130(8)	77(5)	-28(5)	-14(4)	-38(5)
P(1)	58(1)	81(1)	72(1)	-46(1)	-12(1)	-12(1)
F(1)	330(14)	128(6)	125(6)	0(5)	-90(8)	-67(8)
F(2)	70(3)	183(7)	176(6)	-132(6)	0(4)	-20(4)
F(3)	181(8)	114(6)	195(8)	-23(5)	-4(7)	-61(6)
F(4)	57(3)	295(11)	267(10)	-216(10)	-25(5)	5(5)
F(5)	126(5)	152(6)	137(5)	-101(5)	-37(4)	-19(4)
F(6)	108(5)	253(9)	238(9)	-202(8)	-41(5)	-17(5)
P(2)	78(1)	62(1)	73(1)	-26(1)	-17(1)	-14(1)
F(7)	225(10)	116(6)	190(9)	16(6)	36(8)	-45(7)
F(8)	99(6)	171(10)	420(2)	-11(12)	13(9)	6(6)
F(9)	254(10)	120(6)	90(4)	-8(4)	-16(5)	-68(6)
F(10)	90(6)	124(7)	620(3)	-118(12)	45(11)	-20(5)
F(11)	590(3)	210(12)	289(15)	-92(11)	-218(19)	-150(17)
F(12)	590(3)	134(7)	259(13)	-78(8)	-273(16)	-33(11)
S(1)	126(3)	110(2)	98(2)	-44(2)	5(2)	7(2)
O(41)	79(4)	102(5)	108(5)	-56(4)	-13(3)	2(3)
C(42)	128(9)	108(8)	148(10)	-85(8)	-3(8)	-24(7)
C(43)	215(17)	169(14)	218(17)	-128(14)	-161(15)	93(13)