

ORGANOMETALLICS

Organometallics, 1997, 16(3), 482-489, DOI:[10.1021/om960037l](https://doi.org/10.1021/om960037l)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

TABLE FOR DEPOSITION

=====

C80 H136 O32 P4 Ru4

(RUPR)

Atomic coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters
 ($\text{\AA}^2 \times 10^4$), with e.s.d.'s in parentheses

Atom	X/a	Y/b	Z/c	Ueq
H1A	5760(9)	6916(8)	10285(5)	1074(117)
H1B	6349(9)	6137(8)	10002(5)	1074(117)
H3	8561(14)	6796(10)	11108(6)	1664(308)
H4A	10049(18)	5975(21)	10886(8)	3884(537)
H4B	9482(18)	6360(21)	10434(8)	3884(537)
H4C	9356(18)	5322(21)	10573(8)	3884(537)
H5A	7668(19)	5609(16)	11562(6)	6327(1677)
H5B	8309(19)	4859(16)	11285(6)	6327(1677)
H6A	9111(22)	5136(20)	12022(10)	4935(875)
H6B	9248(22)	6177(20)	11891(10)	4935(875)
H6C	9886(22)	5424(20)	11616(10)	4935(875)
H7A	4969(10)	7588(7)	9415(4)	1074(117)
H7B	5712(10)	7746(7)	8977(4)	1074(117)
H9	5185(24)	4730(15)	9008(12)	1664(308)
H10A	5748(33)	5151(22)	8203(16)	3884(537)
H10B	4573(33)	5351(22)	8067(16)	3884(537)
H10C	4939(33)	4340(22)	8169(16)	3884(537)
H13A	7619(10)	6283(7)	9354(4)	1074(117)
H13B	7750(10)	7123(7)	9006(4)	1074(117)
H15	10439(13)	7510(15)	9889(8)	1664(308)
H19A	4848(11)	7903(10)	11416(5)	1074(117)
H19B	4661(11)	8563(10)	11847(5)	1074(117)
H22A	1495(24)	9548(37)	11991(18)	3884(537)
H22B	526(24)	9056(37)	11759(18)	3884(537)
H22C	815(24)	10064(37)	11612(18)	3884(537)
H25A	6878(9)	8221(9)	11244(4)	1074(117)
H25B	7377(9)	9191(9)	11341(4)	1074(117)
H27	6931(16)	8456(19)	12750(6)	1664(308)
H28A	8640(26)	9222(22)	12807(10)	3884(537)
H28B	9210(26)	8268(22)	12772(10)	3884(537)
H28C	8536(26)	8508(22)	13221(10)	3884(537)
H29A	7518(30)	7132(24)	13109(11)	6327(1677)
H29B	8168(30)	6879(24)	12649(11)	6327(1677)
H30A	6448(34)	6193(26)	12596(15)	4935(875)
H30B	6575(34)	6923(26)	12191(15)	4935(875)
H30C	5932(34)	7167(26)	12648(15)	4935(875)
H31A	4855(10)	10604(10)	11653(5)	1074(117)
H31B	5458(10)	9972(10)	12015(5)	1074(117)
H33	7984(22)	11793(14)	11650(6)	1664(308)
H34A	9314(23)	11467(24)	12190(12)	3884(537)
H34B	8695(23)	10563(24)	12070(12)	3884(537)
H34C	8481(23)	11080(24)	12548(12)	3884(537)
H35A	7520(39)	12549(26)	12579(10)	6327(1677)
H35B	8374(39)	12977(26)	12245(10)	6327(1677)
H36A	6975(41)	13775(35)	12252(17)	4935(875)
H36B	6315(41)	12925(35)	12084(17)	4935(875)
H36C	7169(41)	13352(35)	11748(17)	4935(875)
H1R	6079(40)	9373(34)	9526(20)	183(143)
H2R	6305(71)	8904(59)	10246(31)	872(294)

TABLE FOR DEPOSITION

=====

C80 H136 O32 P4 Ru4

(RUPR)

Anisotropic displacement parameters U_{ij} ($\times 10^4 \text{ \AA}^2$) $\exp(-2\pi^2(U_{11}h^2(a^*)^2 + \dots + 2U_{12}hk(a^*)(b^*) + \dots))$

The isotropic parameters are for atoms strongly disordered

Atom	U11	U22	U33	U23	U13	U12
RU1	548(4)	529(4)	730(5)	-18(5)	-7(4)	9(4)
RU2	531(4)	675(5)	723(5)	52(5)	39(4)	-12(4)
P1	774(18)	553(14)	824(21)	-74(13)	-102(14)	-58(12)
P2	672(17)	939(22)	734(18)	112(15)	56(14)	22(14)
O11C	714(49)	994(55)	1215(67)	-48(51)	-315(50)	159(43)
O12C	962(58)	1206(74)	983(62)	4(50)	384(51)	-37(49)
O21C	691(51)	1344(72)	1746(91)	96(71)	-307(56)	-453(56)
O22C	1197(72)	1119(69)	1292(85)	0(58)	-10(58)	-467(59)
O1	1472(82)	795(54)	1178(67)	254(53)	-501(68)	-262(54)
O2	3774(246)	1302(102)	4778(309)	272(158)	-2787(254)	-231(142)
O3	1424(88)	793(59)	1708(89)	-361(59)	-708(75)	-2(56)
O4	2664(222)	1689(152)	3896(289)	-1042(165)	-1719(213)	132(138)
O5	904(63)	1078(62)	1290(74)	-188(59)	202(64)	121(52)
O6	1465(114)	3379(224)	1464(110)	-446(127)	365(103)	-215(120)
O7	1168(105)	3316(223)	1252(100)	906(114)	-17(81)	-719(120)
O8	1510(150)	2930(247)	4641(414)	1442(244)	463(191)	830(157)
O9	1006(73)	1948(97)	802(62)	420(62)	0(50)	298(66)
O10	1248(103)	3928(240)	1322(106)	708(120)	-74(83)	987(131)
O11	1236(69)	1152(62)	743(55)	-166(52)	-22(50)	-86(62)
O12	4354(326)	5674(412)	1399(139)	226(194)	-353(167)	-3657(326)
C11C	614(64)	623(58)	848(76)	-37(50)	-11(56)	21(45)
C12C	684(64)	663(62)	967(82)	-103(57)	119(62)	127(57)
C21C	551(60)	913(78)	1205(101)	152(73)	76(62)	7(60)
C22C	759(77)	941(82)	967(90)	99(66)	41(63)	-204(63)
C1	841(75)	699(70)	1360(108)	198(77)	-241(85)	-171(61)
C2	1969(198)	1135(142)	2688(257)	717(159)	-1248(191)	-718(134)
C3	1094(115)	1032(115)	1573(153)	98(100)	-77(114)	172(85)
C4	1558(195)	3858(367)	1847(201)	734(242)	-396(175)	-115(244)
C5	2486(231)	2172(209)	1113(133)	369(142)	-615(143)	-388(181)
C6	2595(128)	-	-	-	-	-
C7	1197(99)	522(62)	1123(92)	-234(62)	-174(78)	-66(62)
C8	1839(220)	1132(167)	2936(297)	-579(173)	-850(211)	131(143)
C9	2692(282)	1468(172)	3497(396)	-1283(225)	-2209(301)	331(185)
C10	4243(557)	2336(326)	4618(657)	-1895(393)	-872(521)	373(355)
C11	3880(271)	-	-	-	-	-
C12	4909(768)	5840(1062)	6597(1039)	3509(930)	3086(808)	940(656)
C13	871(87)	782(71)	944(83)	-186(62)	8(67)	79(62)
C14	1337(159)	1175(113)	1404(152)	-216(112)	-288(150)	283(116)
C15	996(121)	2166(208)	1739(165)	-167(166)	248(131)	546(133)
C16	3016(227)	-	-	-	-	-
C17	1354(212)	3400(391)	7245(867)	2690(497)	-46(310)	-964(234)
C18	4762(632)	3940(566)	3440(560)	639(460)	1763(488)	2553(550)
C19	950(99)	1411(114)	930(88)	350(80)	-29(84)	-236(94)
C20	1783(338)	12596(1753)	1807(293)	-213(600)	755(269)	-2068(664)
C21	699(131)	5623(710)	2905(396)	2028(472)	-371(189)	-625(251)
C22	1372(245)	6417(1083)	7174(1143)	-2143(847)	780(443)	687(413)
C23	2255(380)	4776(645)	4713(696)	-181(626)	-1728(456)	-404(412)
C24	3632(235)	-	-	-	-	-
C25	815(84)	1080(94)	951(93)	177(72)	44(65)	137(66)
C26	973(134)	2259(204)	1559(190)	407(153)	62(128)	567(133)
C27	1618(183)	2559(256)	893(126)	413(146)	-364(113)	496(167)
C28	3496(415)	3094(370)	2354(312)	845(253)	-1264(314)	-610(327)
C29	3397(468)	2602(302)	2026(270)	439(253)	-125(271)	1184(336)
C30	3375(221)	-	-	-	-	-
C31	933(87)	1216(104)	935(90)	-16(84)	132(76)	68(91)

C32	2388(255)	2642(263)	649(113)	-158(136)	304(132)	-1073(214)
C33	2172(225)	1770(171)	917(119)	-322(115)	120(139)	-792(176)
C34	2447(330)	3403(464)	3101(399)	-7(335)	-1153(308)	96(315)
C35	4974(688)	3081(407)	1352(203)	-1010(254)	182(319)	-726(502)
C36	3909(376)	-	-	-	-	-

TABLE FOR DEPOSITION

=====

Bond distances (Å) and angles (°) with e.s.d.'s in parentheses.

' = x, 2-y, 2-z

C80 H136 O32 P4 Ru4

(RUPR)

Ru1-Ru1'	2.779(2)	Ru2-Ru2'	2.790(2)
Ru1-Ru2	2.973(1)	Ru1-Ru2'	2.988(1)
Ru1-P1	2.310(3)	Ru2-P2	2.296(3)
Ru1-C11C	1.858(11)	Ru2-C21C	1.851(11)
Ru1-C12C	1.872(12)	Ru2-C22C	1.845(12)
P1-C1	1.825(13)	P2-C19	1.814(15)
P1-C7	1.834(13)	P2-C25	1.816(12)
P1-C13	1.833(12)	P2-C31	1.830(14)
O11C-C11C	1.161(13)	O21C-C21C	1.156(15)
O12C-C12C	1.126(14)	O22C-C22C	1.169(15)
O1-C1	1.423(16)	O7-C19	1.420(20)
O3-C7	1.444(13)	O9-C25	1.451(15)
O5-C13	1.446(16)	O11-C31	1.450(17)
O1-C2	1.197(24)	O7-C20	1.202(46)
O3-C8	1.260(29)	O9-C26	1.282(23)
O5-C14	1.304(24)	O11-C32	1.314(23)
O2-C2	1.222(28)	O8-C20	1.738(81)
O4-C8	1.216(32)	O10-C26	1.189(25)
O6-C14	1.207(27)	O12-C32	1.166(30)
C2-C3	1.469(29)	C20-C21	1.599(76)
C8-C9	1.533(30)	C26-C27	1.499(28)
C14-C15	1.577(28)	C32-C33	1.454(36)
C3-C4	1.483(29)	C21-C22	1.398(61)
C9-C10	1.568(57)	C27-C28	1.608(38)
C15-C16	1.523(54)	C33-C34	1.472(40)
C3-C5	1.566(26)	C21-C23	1.427(73)
C9-C11	1.459(71)	C27-C29	1.431(44)
C15-C17	1.439(43)	C33-C35	1.592(41)
C5-C6	1.529(35)	C16-C18	1.055(69)
C11-C12	1.508(101)	C29-C30	1.557(56)
C9-C12	1.926(79)	C35-C36	1.301(67)
Ru2 -Ru1-Ru2'	55.8(0)	Ru1-Ru2-Ru1'	55.6(0)
Ru1'-Ru1-Ru2'	61.9(0)	Ru1'-Ru2-Ru2'	61.8(0)
Ru1'-Ru1-Ru2	62.5(0)	Ru1-Ru2-Ru2'	62.4(0)
P1-Ru1-C12C	95.3(3)	P2-Ru2-C22C	95.5(4)
P1-Ru1-C11C	93.8(3)	P2-Ru2-C21C	92.8(4)
Ru2'-Ru1-P1	110.6(1)	Ru1 -Ru2-P2	112.8(1)
Ru2 -Ru1-P1	106.5(1)	Ru1'-Ru2-P2	109.2(1)
Ru1'-Ru1-P1	168.7(1)	Ru2'-Ru2-P2	170.9(1)
Ru2 -Ru1-C11C	106.5(3)	Ru1'-Ru2-C21C	105.9(3)
Ru2 -Ru1-C12C	151.3(4)	Ru1'-Ru2-C22C	147.4(4)
Ru1'-Ru1-C11C	92.0(3)	Ru2'-Ru2-C21C	90.6(4)
Ru1'-Ru1-C12C	94.3(3)	Ru1 -Ru2-C22C	95.7(4)
Ru2'-Ru1-C11C	152.7(3)	Ru1 -Ru2-C21C	151.8(4)
Ru2'-Ru1-C12C	99.4(3)	Ru2'-Ru2-C22C	92.6(4)
Ru1-P1-C1	119.8(4)	Ru2-P2-C31	119.1(4)
Ru1-P1-C7	115.1(4)	Ru2-P2-C19	115.9(4)
Ru1-P1-C13	117.7(4)	Ru2-P2-C25	118.1(4)
Ru1-C11C-O11C	178.3(9)	Ru2-C21C-O21C	175.8(10)
Ru1-C12C-O12C	178.6(10)	Ru2-C22C-O22C	177.5(11)
C11C-Ru1-C12C	89.9(5)	C21C-Ru2-C22C	93.5(5)
C7-P1-C13	99.3(5)	C19-P2-C31	99.9(6)
C1-P1-C13	101.1(5)	C25-P2-C31	100.4(6)
C1-P1-C7	100.6(6)	C19-P2-C25	100.0(6)
P1-C1-O1	107.7(9)	P2-C19-O7	114.2(11)
P1-C7-O3	108.9(8)	P2-C25-O9	110.3(8)
P1-C13-O5	107.0(8)	P2-C31-O11	109.9(9)

C1-O1-C2	123.3 (14)	C19-O7-C20	139.4 (23)
C7-O3-C8	119.8 (13)	C25-O9-C26	118.3 (13)
C13-O5-C14	116.1 (13)	C31-O11-C32	121.4 (14)
O1-C2-O2	114.8 (19)	O7-C20-O8	66.8 (26)
O3-C8-O4	117.4 (24)	O9-C26-O10	120.9 (18)
O5-C14-O6	122.1 (20)	O11-C32-O12	114.2 (18)
O1-C2-C3	119.9 (19)	O7-C20-C21	119.3 (31)
O3-C8-C9	117.8 (19)	O9-C26-C27	112.4 (17)
O5-C14-C15	111.2 (16)	O11-C32-C33	118.3 (19)
O2-C2-C3	122.4 (21)	O8-C20-C21	83.5 (26)
O4-C8-C9	124.8 (20)	O10-C26-C27	126.5 (19)
O6-C14-C15	126.7 (19)	O12-C32-C33	125.4 (23)
C2-C3-C4	108.3 (16)	C20-C21-C22	119.3 (29)
C8-C9-C10	105.2 (22)	C26-C27-C28	110.0 (17)
C14-C15-C16	103.9 (23)	C32-C33-C34	106.6 (22)
C2-C3-C5	107.5 (16)	C20-C21-C23	104.4 (30)
C8-C9-C11	112.2 (30)	C26-C27-C29	111.3 (20)
C14-C15-C17	112.5 (18)	C32-C33-C35	108.0 (22)
C4-C3-C5	112.1 (16)	C22-C21-C23	131.3 (43)
C10-C9-C11	96.2 (34)	C28-C27-C29	105.8 (24)
C16-C15-C17	111.3 (27)	C34-C33-C35	109.8 (24)
C3-C5-C6	111.3 (17)	C21-C23-C24	61.6 (31)
C9-C11-C12	80.9 (43)	C27-C29-C30	103.0 (27)
C15-C16-C18	113.3 (48)	C33-C35-C36	115.4 (35)

TABLE FOR DEPOSITION

=====

C80 H136 O32 P4 Ru4

(RUPR)

Torsion angles (degrees)

(right-hand rule, Klyne & Prelog.(1960). Experientia,16,521)

(e.s.d. following Stanford & Waser, Acta Cryst.(1972).A28,213)

	Angle	e.s.d.		Angle	e.s.d.
Ru2 -Ru1-P1 -C1	-50.19	0.48	C19 -O7 -C20-C24	-131.14	7.45
Ru2 -Ru1-P1 -C7	69.88	0.44	O8 -O7 -C20-C24	145.38	9.69
Ru2 -Ru1-P1 -C13	-173.58	0.43	C19 -O7 -C20-O8	83.48	4.29
P1 -Ru1-Ru2-C22C	-14.04	0.38	C19 -O7 -O8 -C20	-139.02	3.38
P1 -Ru1-Ru2-C21C	-122.51	0.78	O7 -O8 -C20-C21	-125.82	4.24
P1 -Ru1-Ru2-P2	84.41	0.12	O7 -O8 -C20-C24	-154.93	7.28
C11C-Ru1-Ru2-C22C	-113.25	0.49	C26 -O9 -C25-P2	-176.04	1.27
C11C-Ru1-Ru2-C21C	138.28	0.84	C25 -O9 -C26-C27	176.18	1.42
C11C-Ru1-Ru2-P2	-14.81	0.34	C25 -O9 -C26-O10	1.32	2.70
C12C-Ru1-Ru2-C22C	124.07	0.79	C32 -O11-C31-P2	-144.24	1.41
C12C-Ru1-Ru2-C21C	15.60	1.05	C31 -O11-C32-C33	173.91	1.61
C12C-Ru1-Ru2-P2	-137.48	0.70	C31 -O11-C32-O12	9.27	2.92
C11C-Ru1-P1 -C13	-65.09	0.54	O2 -C2 -C3 -C4	69.11	2.76
C11C-Ru1-P1 -C7	178.38	0.53	O1 -C2 -C3 -C4	-90.32	2.36
C11C-Ru1-P1 -C1	58.30	0.57	O2 -C2 -C3 -C5	-52.20	2.74
C12C-Ru1-P1 -C13	25.20	0.55	O1 -C2 -C3 -C5	148.38	1.91
C12C-Ru1-P1 -C7	-91.34	0.55	C2 -C3 -C5 -C6	-174.65	1.86
C12C-Ru1-P1 -C1	148.59	0.58	C4 -C3 -C5 -C6	66.40	2.32
H1R -Ru1-P1 -C13	117.07	1.92	O4 -C8 -C9 -C10	68.98	3.50
H1R -Ru1-P1 -C7	0.53	1.92	O3 -C8 -C9 -C10	-112.31	2.72
H1R -Ru1-P1 -C1	-119.54	1.93	O4 -C8 -C9 -C11	-34.41	4.53
H2R -Ru1-P1 -C13	-154.87	3.41	O3 -C8 -C9 -C11	144.29	3.39
H2R -Ru1-P1 -C7	88.59	3.41	O4 -C8 -C9 -C12	-88.06	3.64
H2R -Ru1-P1 -C1	-31.49	3.41	O3 -C8 -C9 -C12	90.65	3.23
C22C-Ru2-H2R-Ru1	125.70	6.43	C8 -C9 -C12-C11	105.38	4.16
P2 -Ru2-H2R-Ru1	-139.44	5.99	C8 -C9 -C11-C12	-93.72	4.03
Ru1 -Ru2-P2 -C19	-114.99	0.51	C10 -C9 -C12-C11	-37.95	6.13
Ru1 -Ru2-P2 -C25	3.62	0.47	C10 -C9 -C11-C12	157.06	3.84
Ru1 -Ru2-P2 -C31	125.73	0.50	O6 -C14-C15-C16	-57.39	3.16
C21C-Ru2-P2 -C31	-41.89	0.62	O5 -C14-C15-C16	122.22	2.46
C21C-Ru2-P2 -C25	-164.00	0.58	O6 -C14-C15-C17	63.11	3.16
C21C-Ru2-P2 -C19	77.39	0.63	O5 -C14-C15-C17	-117.29	2.39
C22C-Ru2-P2 -C31	-135.72	0.62	C14 -C15-C16-C18	-123.70	4.70
C22C-Ru2-P2 -C25	102.17	0.59	C17 -C15-C16-C18	114.97	5.00
C22C-Ru2-P2 -C19	-16.44	0.63	O8 -C20-C24-C21	34.30	4.96
Ru1 -P1 -C13-O5	44.11	0.86	O7 -C20-C24-C21	-96.28	9.61
Ru1 -P1 -C7 -O3	175.68	0.63	O8 -C20-C24-C23	76.60	5.59
Ru1 -P1 -C1 -O1	-55.70	0.91	O7 -C20-C24-C23	-53.98	9.30
C7 -P1 -C13-O5	168.90	0.78	O8 -C20-C21-C22	-66.80	4.53
C1 -P1 -C13-O5	-88.33	0.84	O7 -C20-C21-C22	-125.54	5.30
C13 -P1 -C7 -O3	49.08	0.89	O8 -C20-C21-C23	135.58	3.65
C1 -P1 -C7 -O3	-54.10	0.90	O7 -C20-C21-C23	76.84	5.89
C13 -P1 -C1 -O1	75.41	0.88	O8 -C20-C21-C24	-157.04	3.39
C7 -P1 -C1 -O1	177.18	0.80	O7 -C20-C21-C24	144.22	5.60
Ru2 -P2 -C31-O11	-71.65	0.92	C21 -C20-C24-C23	42.29	2.84
Ru2 -P2 -C25-O9	-179.08	0.62	C24 -C20-C21-C23	-67.38	3.70
Ru2 -P2 -C19-O7	-40.23	1.24	C24 -C20-C21-C22	90.24	4.49
C25 -P2 -C31-O11	58.93	0.95	C23 -C21-C24-C20	111.65	3.98
C19 -P2 -C31-O11	161.15	0.88	C22 -C21-C24-C20	-117.92	4.18
C31 -P2 -C25-O9	49.72	0.93	C20 -C21-C24-C23	-111.65	3.98
C19 -P2 -C25-O9	-52.40	0.94	C20 -C21-C23-C24	65.32	3.60
C31 -P2 -C19-O7	89.08	1.19	C22 -C21-C24-C23	130.42	4.38
C25 -P2 -C19-O7	-168.39	1.11	C22 -C21-C23-C24	-88.47	5.51
C2 -O1 -C1 -P1	-145.12	1.53	C21 -C23-C24-C20	-47.35	3.17
C1 -O1 -C2 -C3	173.55	1.44	O10 -C26-C27-C28	43.63	3.10
C1 -O1 -C2 -O2	12.63	2.87	O9 -C26-C27-C28	-130.89	2.00
C8 -O3 -C7 -P1	178.63	1.53	O10 -C26-C27-C29	-73.28	3.13

C7	-03	-C8	-C9	-176.82	1.77	O9	-C26-C27-C29	112.20	2.36
C7	-03	-C8	-O4	1.98	3.10	C26	-C27-C29-C30	-62.25	2.98
C14	-05	-C13-P1		-146.88	1.21	C28	-C27-C29-C30	178.30	2.46
C13	-05	-C14-C15		178.22	1.27	O12	-C32-C33-C34	51.06	3.45
C13	-05	-C14-O6		-2.15	2.56	O11	-C32-C33-C34	-111.70	2.39
O8	-07	-C19-P2		-86.09	1.41	O12	-C32-C33-C35	-66.88	3.42
C20	-07	-C19-P2		-159.45	4.79	O11	-C32-C33-C35	130.36	2.34
C19	-07	-C20-C21		150.99	3.26	C32	-C33-C35-C36	-64.87	4.10
O8	-07	-C20-C21		67.51	4.44	C34	-C33-C35-C36	179.31	3.58

Table 9
Atomic coordinates ($\times 10^4$) for (+)(S)-H₄Ru₄(CO)₈[P(CH₂OCOCH(CH₃)C₂H₅)₃]₄.

Atom	x	y	z
Ru1	7 070.6(6)	9 087.6(5)	9 853.8(3)
Ru2	5 308.1(6)	9 704.8(6)	10 470.6(3)
P1	6 734(2)	7 571(2)	9 665(1)
P2	5 561(2)	9 334(2)	11 254(1)
O11C	8 863(6)	8 608(5)	10 512(3)
O12C	8 581(7)	9 416(6)	9 054(3)
O21C	3 508(6)	10 954(7)	10 723(4)
O22C	3 917(7)	8 079(6)	10 253(3)
O1	7 255(8)	6 773(6)	10 470(3)
O2	7 221(18)	5 377(11)	10 530(9)
O3	5 549(9)	6 423(6)	9 149(4)
O4	4 214(16)	6 706(13)	8 724(8)
O5	8 749(8)	7 160(6)	9 555(4)
O6	9 489(12)	7 017(13)	8 855(6)
O7	3 574(11)	8 655(14)	11 355(4)
O8	3 198(16)	9 438(16)	11 759(12)
O9	6 804(8)	8 593(8)	11 925(3)
O10	8 403(12)	8 120(14)	11 868(5)
O11	6 407(7)	10 833(7)	11 666(3)
O12	6 521(21)	10 909(20)	12 402(7)
C11C	8 184(8)	8 800(6)	10 255(4)
C12C	8 022(9)	9 285(7)	9 357(4)
C21C	4 199(8)	10 486(8)	10 609(4)
C22C	4 437(9)	8 722(8)	10 338(4)
C1	6 419(9)	6 750(8)	10 134(5)
C2	7 552(17)	6 109(14)	10 682(9)
C3	8 491(14)	6 169(10)	10 985(6)
C4	9 427(18)	5 936(21)	10 694(8)
C5	8 334(19)	5 482(16)	11 407(6)
C6	9 228(22)	5 562(20)	11 767(10)
C7	5 616(10)	7 389(7)	9 264(4)
C8	4 821(21)	6 137(14)	8 884(10)
C9	4 750(24)	5 100(15)	8 794(12)
C10	5 030(33)	4 973(22)	8 256(16)
C11	3 662(51)	4 784(43)	8 756(22)
C12	3 841(52)	4 605(46)	9 277(28)
C13	7 750(10)	6 939(7)	9 337(4)
C14	9 560(17)	7 190(11)	9 273(8)
C15	10 592(13)	7 467(15)	9 549(8)
C16	11 340(41)	6 667(34)	9 459(17)
C17	11 032(20)	8 321(26)	9 385(19)
C18	11 622(41)	6 360(32)	9 773(17)
C19	4 632(11)	8 520(10)	11 504(5)
C20	2 696(31)	8 466(63)	11 481(13)

C21	1 746(19)	9 139(41)	11 346(16)
C22	1 094(24)	9 478(37)	11 705(18)
C23	1 542(31)	8 950(40)	10 858(21)
C24	1 279(43)	7 972(38)	11 325(19)
C25	6 793(9)	8 788(9)	11 420(4)
C26	7 645(15)	8 255(16)	12 106(8)
C27	7 567(16)	8 148(19)	12 633(6)
C28	8 592(26)	8 580(22)	12 884(10)
C29	7 552(30)	7 199(24)	12 767(11)
C30	6 529(34)	6 836(26)	12 528(15)
C31	5 489(10)	10 244(10)	11 701(5)
C32	6 845(20)	11 195(18)	12 044(7)
C33	7 823(22)	11 703(14)	11 986(6)
C34	8 650(23)	11 156(24)	12 219(12)
C35	7 698(39)	12 665(26)	12 250(10)
C36	6 993(41)	13 215(35)	12 072(17)