ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1996, 15(20), 4147-4152, DOI:10.1021/om960199h

Table S1. Bond Lengths (Å) for Ru(η^1-MeC_6H_4L) (PPh_3)$_2$(CO)(η^2-MeCO_2)

Ru-P(1)	2.387 (2)	Ru-P(2)	2.373 (2)
Ru-O(3)	2.258 (4)	Ru-O(4)	2.215 (4)
Ru-C(37)	2.060 (6)	Ru-C(52)	1.822 (6)
Ru-C(54)	2.577 (6)	P(1)-C(1)	1.826 (6)
P(1)-C(7)	1.830 (6)	P(1)-C(13)	1.828 (7)
P(2)-C(19)	1.827 (6)	P(2)-C(25)	1.825 (7)
P(2)-C(31)	1.819 (8)	O(1)-C(38)	1.372 (7)
O(2)-C(52)	1.150 (7)	O(3)-C(54)	1.256 (7)
O(4)-C(54)	1.250 (7)	N-C(44)	1.286 (8)
N-C(45)	1.416 (8)	C(1)-C(2)	1.406 (8)
C(1)-C(6)	1.377 (8)	C(2)-C(3)	1.382 (10)
C(3)-C(4)	1.371 (9)	C(4)-C(5)	1.358 (10)
C(5)-C(6)	1.379 (10)	C(7)-C(8)	1.380 (10)
C(7)-C(12)	1.398 (11)	C(8)-C(9)	1.405 (9)
C(9)-C(10)	1.358 (14)	C(10)-C(11)	1.377 (14)
C(11)-C(12)	1.382 (10)	C(13)-C(14)	1.381 (10)
C(13)-C(18)	1.390 (9)	C(14)-C(15)	1.385 (13)
C(15)-C(16)	1.375 (13)	C(16)-C(17)	1.352 (14)
C(17)-C(18)	1.384 (11)	C(19)-C(20)	1.384 (11)
C(19)-C(24)	1.374 (10)	C(20)-C(21)	1.380 (11)
C(21)-C(22)	1.348 (15)	C(22)-C(23)	1.395 (17)
C(23)-C(24)	1.401 (12)	C(25)-C(26)	1.368 (11)
C(25)-C(30)	1.398 (11)	C(26)-C(27)	1.396 (12)
C(27)-C(28)	1.369 (15)	C(28)-C(29)	1.357 (16)
C(29)-C(30)	1.389 (13)	C(31)-C(32)	1.375 (10)
C(31)-C(36)	1.392 (12)	C(32)-C(33)	1.380 (15)
C(33)-C(34)	1.373 (17)	C(34)-C(35)	1.338 (17)
C(35)-C(36)	1.392 (17)	C(37)-C(38)	1.408 (8)
C(37)-C(42)	1.388 (8)	C(38)-C(39)	1.394 (9)
C(39)-C(40)	1.415 (9)	C(39)-C(44)	1.462 (9)
C(40)-C(41)	1.371 (9)	C(41)-C(42)	1.395 (9)
C(41)-C(43)	1.508 (10)	C(45)-C(46)	1.359 (10)
C(45)-C(50)	1.371 (11)	C(46)-C(47)	1.401 (10)
C(47)-C(48)	1.363 (11)	C(48)-C(49)	1.379 (10)
C(48)-C(51)	1.504 (10)	C(49)-C(50)	1.395 (11)
C(53)-C(54)	1.503 (10)		

Table S2. Bond Angles (°) for Ru(η^1-MeC$_6$H$_4$L) (PPh$_3$)$_2$(CO)(η^2-MeCO$_2$)

P(1)-Ru-P(2)	178.0(1)	P(1)-Ru-O(3)	92.0(1)
P(2)-Ru-O(3)	87.0(1)	P(1)-Ru-O(4)	84.6(1)
P(2)-Ru-O(4)	93.5(1)	O(3)-Ru-O(4)	58.2(2)
P(1)-Ru-C(37)	89.4(2)	P(2)-Ru-C(37)	90.8(2)
O(3)-Ru-C(37)	156.3(2)	O(4)-Ru-C(37)	98.4(2)
P(1)-Ru-C(52)	93.7(2)	P(2)-Ru-C(52)	88.2(2)
O(3)-Ru-C(52)	107.4(2)	O(4)-Ru-C(52)	165.3(2)
C(37)-Ru-C(52)	96.2(3)	P(1)-Ru-C(54)	87.3(1)
P(2)-Ru-C(54)	91.0(1)	O(3)-Ru-C(54)	29.2(2)
O(4)-Ru-C(54)	29.0(2)	C(37)-Ru-C(54)	127.4(2)
C(52)-Ru-C(54)	136.4(2)	Ru-P(1)-C(1)	113.2(2)
Ru-P(1)-C(7)	119.9(2)	C(1)-P(1)-C(7)	103.2(3)
Ru-P(1)-C(13)	113.4(2)	C(1)-P(1)-C(13)	103.6(3)
C(7)-P(1)-C(13)	101.7(3)	Ru-P(2)-C(19)	114.5(2)
Ru-P(2)-C(25)	114.7(2)	C(19)-P(2)-C(25)	104.2(3)
Ru-P(2)-C(31)	117.4(2)	C(19)-P(2)-C(31)	102.8(3)
C(25)-P(2)-C(31)	101.4(3)	Ru-O(3)-C(54)	89.7(3)
Ru-O(4)-C(54)	91.8(3)	C(44)-N-C(45)	121.1(6)
P(1)-C(1)-C(2)	120.0(4)	P(1)-C(1)-C(6)	121.4(4)
C(2)-C(1)-C(6)	118.5(6)	C(1)-C(2)-C(3)	120.3(5)
C(2)-C(3)-C(4)	119.5(6)	C(3)-C(4)-C(5)	120.7(7)
C(4)-C(5)-C(6)	120.5(6)	C(1)-C(6)-C(5)	120.4(6)
P(1)-C(7)-C(8)	120.1(5)	P(1)-C(7)-C(12)	120.2(5)
C(8)-C(7)-C(12)	119.5(5)	C(7)-C(8)-C(9)	119.5(7)
C(8)-C(9)-C(10)	120.8(8)	C(9)-C(10)-C(11)	119.7(7)
C(10)-C(11)-C(12)	121.0(8)	C(7)-C(12)-C(11)	119.5(7)
P(1)-C(13)-C(14)	124.4(5)	P(1)-C(13)-C(18)	117.0(5)
C(14)-C(13)-C(18)	118.6(6)	C(13)-C(14)-C(15)	120.2(7)
C(14)-C(15)-C(16)	120.3(8)	C(15)-C(16)-C(17)	119.9(9)
C(16)-C(17)-C(18)	120.7(7)	C(13)-C(18)-C(17)	120.2(7)
P(2)-C(19)-C(20)	118.3(5)	P(2)-C(19)-C(24)	122.8(6)
C(20)-C(19)-C(24)	118.9(6)	C(19)-C(20)-C(21)	121.4(7)
C(20)-C(21)-C(22)	120.3(10)	C(21)-C(22)-C(23)	119.6(9)
C(22)-C(23)-C(24)	120.3(8)	C(19)-C(24)-C(23)	119.5(8)
P(2)-C(25)-C(26)	120.4(6)	P(2)-C(25)-C(30)	121.3(6)
C(26)-C(25)-C(30)	118.4(7)	C(25)-C(26)-C(27)	121.4(8)

C(26)-C(27)-C(28)	119.4(9)	C(27)-C(28)-C(29)	120.0(9)
C(28)-C(29)-C(30)	121.2(9)	C(25)-C(30)-C(29)	119.6(8)
P(2)-C(31)-C(32)	119.0(6)	P(2)-C(31)-C(36)	123.4(6)
C(32)-C(31)-C(36)	117.5(7)	C(31)-C(32)-C(33)	122.3(8)
C(32)-C(33)-C(34)	118.2(9)	C(33)-C(34)-C(35)	121.6(12)
C(34)-C(35)-C(36)	120.2(11)	C(31)-C(36)-C(35)	120.2(8)
Ru-C(37)-C(38)	131.0(4)	Ru-C(37)-C(42)	113.8(4)
C(38)-C(37)-C(42)	115.1(5)	O(1)-C(38)-C(37)	119.4(5)
O(1)-C(38)-C(39)	119.4(5)	C(37)-C(38)-C(39)	121.2(5)
C(38)-C(39)-C(40)	120.6(6)	C(38)-C(39)-C(44)	122.3(6)
C(40)-C(39)-C(44)	117.1(6)	C(39)-C(40)-C(41)	119.6(6)
C(40)-C(41)-C(42)	117.8(6)	C(40)-C(41)-C(43)	121.2(6)
C(42)-C(41)-C(43)	120.9(6)	C(37)-C(42)-C(41)	125.6(6)
N-C(44)-C(39)	122.0(6)	N-C(45)-C(46)	116.9(6)
N-C(45)-C(50)	124.7(6)	C(46)-C(45)-C(50)	118.4(6)
C(45)-C(46)-C(47)	121.5(7)	C(46)-C(47)-C(48)	120.5(7)
C(47)-C(48)-C(49)	118.0(7)	C(47)-C(48)-C(51)	121.3(6)
C(49)-C(48)-C(51)	120.6(7)	C(48)-C(49)-C(50)	121.2(8)
C(45)-C(50)-C(49)	120.3(7)	Ru-C(52)-O(2)	173.6(6)
Ru-C(54)-O(3)	61.2(3)	Ru-C(54)-O(4)	59.2(3)
O(3)-C(54)-O(4)	120.3(5)	Ru-C(54)-C(53)	175.6(5)
O(3)-C(54)-C(53)	119.5(6)	O(4)-C(54)-C(53)	120.2(6)

Table S3. Anisotropic Displacement Coefficients ($Å^2x10^3$) for $Ru(\eta^1\text{-}MeC_6H_4L)(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}MeCO_2)$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ru	31(1)	44(1)	36(1)	11(1)	3(1)	7(1)
P(1)	35(1)	45(1)	32(1)	12(1)	1(1)	5(1)
P(2)	41(1)	43(1)	44(1)	13(1)	9(1)	5(1)
O(1)	45(3)	77(3)	38(2)	25(2)	4(2)	13(2)
O(2)	71(3)	86(4)	41(2)	20(3)	19(2)	15(2)
O(3)	34(2)	61(3)	55(3)	12(2)	7(2)	10(2)
O(4)	37(2)	60(3)	40(2)	13(2)	-1(2)	5(2)
N	40(3)	71(4)	53(3)	19(3)	-6(2)	7(3)
C(1)	39(4)	43(4)	40(3)	15(3)	5(3)	10(3)
C(2)	47(4)	59(4)	38(3)	8(3)	5(3)	8(3)
C(3)	62(5)	65(5)	42(4)	18(4)	13(3)	11(3)
C(4)	51(5)	67(5)	71(5)	19(4)	23(4)	22(4)
C(5)	37(4)	81(5)	59(4)	8(4)	0(3)	4(4)
C(6)	35(4)	72(5)	44(4)	16(3)	3(3)	9(3)
C(7)	40(4)	47(4)	33(3)	5(3)	3(3)	4(3)
C(8)	57(4)	59(4)	37(3)	8(4)	-4(3)	8(3)
C(9)	73(5)	78(6)	45(4)	-1(4)	-2(4)	10(4)
C(10)	105(7)	82(6)	39(4)	-3(5)	6(4)	-16(4)
C(11)	126(8)	63(5)	66(5)	28(5)	2(5)	-19(4)
C(12)	80(5)	56(5)	53(4)	23(4)	4(4)	-1(3)
C(13)	40(4)	52(4)	36(3)	18(3)	2(3)	2(3)
C(14)	54(4)	73(5)	59(4)	24(4)	2(3)	26(4)
C(15)	87(6)	93(6)	64(5)	50(5)	-2(4)	21(4)
C(16)	62(6)	115(8)	78(6)	56(5)	3(4)	4(5)
C(17)	38(4)	83(6)	85(6)	21(4)	7(4)	-10(5)
C(18)	46(4)	58(4)	61(4)	19(3)	8(3)	-3(3)
C(19)	56(4)	50(4)	46(4)	17(4)	1(3)	1(3)
C(20)	93(6)	63(5)	52(4)	20(4)	23(4)	6(4)
C(21)	131(9)	86(7)	64(5)	33(6)	32(6)	7(5)
C(22)	141(10)	106(8)	52(5)	43(8)	-1(6)	-8(5)
C(23)	93(7)	105(8)	84(7)	6(6)	-28(6)	-8(6)
C(24)	69(5)	79(6)	65(5)	12(4)	-7(4)	-3(4)
C(25)	46(4)	43(4)	62(4)	6(3)	16(3)	5(3)
C(26)	58(5)	56(5)	108(6)	13(4)	35(4)	21(4)
C(27)	65(6)	84(7)	127(8)	14(5)	39(5)	11(6)

C(28)	70(6)	67(6)	130(8)	-19(5)	44(6)	-6(6)
C(29)	91(7)	59(6)	141(9)	-4(5)	45(6)	26(5)
C(30)	64(5)	53(5)	108(6)	5(4)	30(5)	15(4)
C(31)	49(4)	55(4)	56(4)	19(3)	20(3)	21(3)
C(32)	91(6)	52(5)	77(5)	24(4)	-17(5)	9(4)
C(33)	105(8)	87(7)	100(7)	40(6)	-25(6)	22(6)
C(34)	79(7)	123(9)	121(9)	52(6)	1(6)	60(7)
C(35)	127(9)	128(9)	119(8)	99(8)	53(7)	54(7)
C(36)	96(7)	105(7)	78(5)	64(6)	32(5)	35(5)
C(37)	34(3)	39(3)	37(3)	9(3)	5(3)	5(3)
C(38)	43(4)	39(4)	41(3)	12(3)	6(3)	8(3)
C(39)	37(4)	54(4)	42(3)	12(3)	0(3)	8(3)
C(40)	36(4)	74(5)	43(4)	16(3)	4(3)	9(3)
C(41)	44(4)	71(5)	41(3)	21(3)	11(3)	11(3)
C(42)	37(4)	57(4)	40(3)	16(3)	5(3)	11(3)
C(43)	55(5)	145(8)	47(4)	37(5)	16(4)	30(5)
C(44)	43(4)	69(5)	46(4)	19(3)	-3(3)	8(3)
C(45)	47(4)	72(5)	43(4)	21(4)	-4(3)	10(3)
C(46)	51(4)	106(7)	58(5)	29(4)	2(4)	12(4)
C(47)	55(5)	134(8)	46(4)	31(5)	3(4)	22(4)
C(48)	54(5)	68(5)	48(4)	19(4)	-8(3)	9(3)
C(49)	54(5)	140(8)	53(4)	46(5)	-3(4)	13(5)
C(50)	57(5)	169(9)	43(4)	56(6)	0(4)	11(5)
C(51)	59(5)	90(6)	60(4)	13(4)	-17(4)	20(4)
C(52)	43(4)	52(4)	40(3)	18(3)	8(3)	5(3)
C(53)	53(5)	129(8)	57(5)	28(5)	-7(4)	13(5)
C(54)	32(3)	53(4)	47(4)	11(3)	-3(3)	3(3)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

Table S4. H-atom Coordinates (x10^4) and Isotropic Displacement Coefficients ($Å^2$x10^3) for Ru(η^1-MeC_6H_4L) (PPh_3)$_2$(CO)(η^2-MeCO_2)

	x	y	z	U
H	-1702	1576	1220	80
H(2)	897	-279	4174	80
H(3)	-631	-1240	4815	80
H(4)	-2599	-2314	4170	80
H(5)	-2720	-2529	2810	80
H(6)	-1167	-1764	2203	80
H(8)	3	199	1226	80
H(9)	-539	-1050	73	80
H(10)	165	-2589	-197	80
H(11)	1008	-3478	748	80
H(12)	1519	-2438	2006	80
H(14)	1597	-2043	3642	80
H(15)	3572	-2615	4060	80
H(16)	5508	-1888	3544	80
H(17)	5421	-454	2793	80
H(18)	3783	117	2424	80
H(20)	454	3368	4228	80
H(21)	779	4148	5520	80
H(22)	2703	5649	6022	80
H(23)	4270	5929	5312	80
H(24)	4177	5495	4161	80
H(26)	4516	3213	2837	80
H(27)	6207	4039	2253	80
H(28)	6257	6047	1951	80
H(29)	4587	6709	2012	80
H(30)	2681	5821	2468	80
H(32)	652	3385	1668	80
H(33)	-799	4361	1171	80
H(34)	-1512	5770	1923	80
H(35)	-717	6299	3142	80
H(36)	966	5510	3684	80
H(40)	-3678	1869	3188	80
H(42)	-48	1483	3978	80
H(43A)	-3089	1624	4450	80
H(43B)	-2098	922	4615	80
H(43C)	-1733	2231	4760	80
H(44)	-4155	1614	1988	80
H(46)	-2960	1025	-190	80
H(47)	-4304	1236	-1357	80
H(49)	-6972	1904	229	80
H(50)	-5493	1825	1173	80
H(51A)	-6851	2195	-1287	80
H(51B)	-6262	1754	-1719	80
H(51C)	-7435	706	-1413	80
H(53A)	4891	1593	4447	80
H(53B)	4023	2030	4994	80
H(53C)	3817	748	4716	80

Table S5. Atomic Coordinates (x10^4) and Equivalent Isotropic* Displacement Coefficients (Å^{2}x10^3) for Ru(η^1-MeC_6H_4L) (PPh_3)$_2$(CO)(η^2-$MeCO_2$)

	x	y	z	U(eq)
Ru	1651(1)	1680(1)	2836(1)	36(1)
P(1)	1259(2)	-313(1)	2647(1)	37(1)
P(2)	2054(2)	3660(2)	3067(1)	42(1)
O(1)	-794(4)	1580(4)	1543(2)	51(2)
O(2)	1916(5)	1891(4)	1270(2)	64(2)
O(3)	3598(4)	1809(4)	3346(2)	49(2)
O(4)	2044(4)	1507(3)	4003(2)	46(2)
N	-3056(5)	1622(5)	1113(3)	54(2)
C(1)	-21(6)	-961(5)	3129(3)	40(2)
C(2)	81(6)	-808(6)	3899(3)	48(2)
C(3)	-885(7)	-1298(6)	4266(3)	55(3)
C(4)	-1951(7)	-1919(6)	3874(4)	60(3)
C(5)	-2086(6)	-2019(7)	3131(4)	60(3)
C(6)	-1123(6)	-1555(6)	2755(3)	50(3)
C(7)	896(6)	-1073(5)	1718(3)	41(2)
C(8)	251(6)	-654(6)	1190(3)	52(3)
C(9)	-72(8)	-1271(7)	487(4)	68(3)
C(10)	231(9)	-2278(8)	326(4)	81(4)
C(11)	838(10)	-2713(7)	860(5)	87(4)
C(12)	1185(7)	-2120(6)	1553(4)	62(3)
C(13)	2561(6)	-871(5)	2989(3)	42(2)
C(14)	2476(7)	-1660(6)	3463(4)	59(3)
C(15)	3521(9)	-2019(7)	3702(4)	76(4)
C(16)	4654(8)	-1587(9)	3475(5)	81(4)
C(17)	4742(7)	-833(7)	2998(5)	69(3)
C(18)	3710(6)	-456(6)	2757(4)	55(3)
C(19)	2323(7)	4238(6)	4037(3)	51(3)
C(20)	1390(8)	3939(6)	4481(4)	68(3)
C(21)	1510(11)	4379(8)	5212(5)	91(4)
C(22)	2555(13)	5106(10)	5513(5)	99(5)
C(23)	3520(10)	5407(9)	5082(6)	100(5)
C(24)	3403(8)	4961(7)	4340(4)	73(3)
C(25)	3410(6)	4366(5)	2671(4)	50(2)

Contd. Table S5

C(26)	4398(7)	3873(6)	2583(5)	72(3)
C(27)	5465(8)	4415(8)	2308(6)	91(4)
C(28)	5508(9)	5446(8)	2096(6)	94(4)
C(29)	4534(10)	5946(7)	2176(6)	97(4)
C(30)	3474(8)	5422(7)	2458(5)	75(3)
C(31)	867(6)	4342(6)	2724(4)	51(3)
C(32)	393(8)	4068(6)	2001(4)	73(3)
C(33)	-474(10)	4580(9)	1694(6)	96(4)
C(34)	-870(9)	5391(10)	2132(7)	100(5)
C(35)	-427(11)	5694(10)	2836(7)	109(5)
C(36)	444(9)	5173(8)	3146(5)	84(4)
C(37)	-227(5)	1595(5)	2822(3)	36(2)
C(38)	-1122(6)	1615(5)	2246(3)	40(2)
C(39)	-2338(6)	1652(5)	2376(3)	44(2)
C(40)	-2709(6)	1657(6)	3093(3)	50(3)
C(41)	-1863(6)	1625(6)	3664(3)	50(3)
C(42)	-657(6)	1590(5)	3509(3)	44(2)
C(43)	-2231(7)	1598(8)	4433(4)	78(4)
C(44)	-3292(6)	1645(6)	1786(3)	52(3)
C(45)	-4000(6)	1591(6)	547(3)	53(3)
C(46)	-3715(7)	1386(7)	-152(4)	70(3)
C(47)	-4580(7)	1337(8)	-752(4)	76(4)
C(48)	-5737(7)	1507(6)	-649(4)	57(3)
C(49)	-6026(7)	1715(8)	61(4)	79(4)
C(50)	-5160(7)	1765(9)	657(4)	86(4)
C(51)	-6685(7)	1441(7)	-1285(4)	71(3)
C(52)	1741(6)	1794(5)	1867(3)	44(2)
C(53)	4044(7)	1490(8)	4574(4)	79(4)
C(54)	3178(6)	1621(5)	3942(3)	45(2)

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

Table S6 Bond Lengths (Å) for $Ru(\eta^1\text{-}MeC_6H_4L)\ (PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}PhCO_2).\ C_6H_6$

Ru-P(1)	2.404	(4)	Ru-P(2)	2.381	(4)
Ru-O(3)	2.214	(9)	Ru-O(4)	2.222	(7)
Ru-C(37)	2.091	(16)	Ru-C(52)	1.827	(11)
Ru-C(59)	2.593	(12)	P(1)-C(1)	1.830	(16)
P(1)-C(7)	1.809	(10)	P(1)-C(13)	1.832	(15)
P(2)-C(19)	1.830	(15)	P(2)-C(25)	1.835	(10)
P(2)-C(31)	1.839	(15)	O(2)-C(52)	1.143	(14)
O(3)-C(59)	1.279	(14)	O(4)-C(59)	1.280	(19)
O(1)-C(38)	1.362	(15)	N(1)-C(44)	1.273	(17)
N(1)-C(45)	1.442	(17)	C(1)-C(2)	1.361	(23)
C(1)-C(6)	1.378	(19)	C(2)-C(3)	1.383	(24)
C(3)-C(4)	1.334	(23)	C(4)-C(5)	1.323	(29)
C(5)-C(6)	1.452	(26)	C(7)-C(8)	1.375	(19)
C(7)-C(12)	1.383	(18)	C(8)-C(9)	1.430	(17)
C(9)-C(10)	1.337	(23)	C(10)-C(11)	1.372	(22)
C(11)-C(12)	1.380	(16)	C(13)-C(14)	1.414	(21)
C(13)-C(18)	1.408	(15)	C(14)-C(15)	1.383	(25)
C(15)-C(16)	1.364	(18)	C(16)-C(17)	1.353	(26)
C(17)-C(18)	1.420	(25)	C(19)-C(20)	1.370	(16)
C(19)-C(24)	1.388	(20)	C(20)-C(21)	1.401	(24)
C(21)-C(22)	1.353	(22)	C(22)-C(23)	1.330	(20)
C(23)-C(24)	1.414	(26)	C(25)-C(26)	1.383	(22)
C(25)-C(30)	1.379	(22)	C(26)-C(27)	1.396	(17)
C(27)-C(28)	1.364	(26)	C(28)-C(29)	1.353	(25)
C(29)-C(30)	1.379	(16)	C(31)-C(32)	1.367	(19)
C(31)-C(36)	1.377	(20)	C(32)-C(33)	1.399	(24)
C(33)-C(34)	1.376	(22)	C(34)-C(35)	1.368	(21)
C(35)-C(36)	1.435	(25)	C(37)-C(38)	1.406	(17)
C(37)-C(42)	1.365	(19)	C(38)-C(39)	1.423	(23)
C(39)-C(40)	1.405	(20)	C(39)-C(44)	1.437	(18)
C(40)-C(41)	1.376	(19)	C(41)-C(42)	1.419	(24)
C(41)-C(43)	1.530	(22)	C(45)-C(46)	1.356	(21)
C(45)-C(50)	1.372	(26)	C(46)-C(47)	1.385	(21)
C(47)-C(48)	1.366	(27)	C(48)-C(49)	1.387	(22)
C(48)-C(51)	1.527	(19)	C(49)-C(50)	1.365	(21)
C(53)-C(54)	1.361	(27)	C(53)-C(58)	1.393	(19)
C(53)-C(59)	1.457	(17)	C(54)-C(55)	1.358	(25)
C(55)-C(56)	1.370	(31)	C(56)-C(57)	1.355	(42)
C(57)-C(58)	1.409	(22)	C(1S)-C(2S)	1.271	(63)
C(1S)-C(6S)	1.290	(74)	C(2S)-C(3S)	1.240	(97)
C(3S)-C(4S)	1.393	(83)	C(4S)-C(5S)	1.320	(52)
C(5S)-C(6S)	1.334	(77)			

Table S7 Bond Angles (°) for $Ru(\eta^1\text{-}MeC_6H_4L)(PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}PhCO_2).\ C_6H_6$

P(1)-Ru-P(2)	174.8(1)	P(1)-Ru-O(3)	90.2(2)
P(2)-Ru-O(3)	86.7(2)	P(1)-Ru-O(4)	85.5(2)
P(2)-Ru-O(4)	89.4(2)	O(3)-Ru-O(4)	59.1(3)
P(1)-Ru-C(37)	90.8(4)	P(2)-Ru-C(37)	90.9(4)
O(3)-Ru-C(37)	163.1(3)	O(4)-Ru-C(37)	104.2(4)
P(1)-Ru-C(52)	93.0(4)	P(2)-Ru-C(52)	91.7(4)
O(3)-Ru-C(52)	102.0(5)	O(4)-Ru-C(52)	161.0(5)
C(37)-Ru-C(52)	94.7(6)	P(1)-Ru-C(59)	87.3(3)
P(2)-Ru-C(59)	88.0(3)	O(3)-Ru-C(59)	29.5(4)
O(4)-Ru-C(59)	29.6(4)	C(37)-Ru-C(59)	133.7(4)
C(52)-Ru-C(59)	131.5(6)	Ru-P(1)-C(1)	112.7(5)
Ru-P(1)-C(7)	118.0(4)	C(1)-P(1)-C(7)	101.0(6)
Ru-P(1)-C(13)	116.1(4)	C(1)-P(1)-C(13)	103.1(6)
C(7)-P(1)-C(13)	103.8(6)	Ru-P(2)-C(19)	118.5(5)
Ru-P(2)-C(25)	112.0(5)	C(19)-P(2)-C(25)	104.6(6)
Ru-P(2)-C(31)	117.0(4)	C(19)-P(2)-C(31)	100.2(7)
C(25)-P(2)-C(31)	102.4(6)	Ru-O(3)-C(59)	91.9(8)
Ru-O(4)-C(59)	91.5(6)	C(44)-N(1)-C(45)	122.4(14)
P(1)-C(1)-C(2)	119.4(10)	P(1)-C(1)-C(6)	122.4(13)
C(2)-C(1)-C(6)	118.2(15)	C(1)-C(2)-C(3)	122.5(14)
C(2)-C(3)-C(4)	119.5(18)	C(3)-C(4)-C(5)	121.3(19)
C(4)-C(5)-C(6)	120.5(16)	C(1)-C(6)-C(5)	118.0(16)
P(1)-C(7)-C(8)	120.3(9)	P(1)-C(7)-C(12)	123.3(9)
C(8)-C(7)-C(12)	116.4(10)	C(7)-C(8)-C(9)	119.5(13)
C(8)-C(9)-C(10)	122.0(15)	C(9)-C(10)-C(11)	119.0(13)
C(10)-C(11)-C(12)	119.1(14)	C(7)-C(12)-C(11)	123.8(13)
P(1)-C(13)-C(14)	122.5(8)	P(1)-C(13)-C(18)	118.1(11)
C(14)-C(13)-C(18)	119.4(14)	C(13)-C(14)-C(15)	120.2(11)
C(14)-C(15)-C(16)	119.2(16)	C(15)-C(16)-C(17)	123.0(18)
C(16)-C(17)-C(18)	119.7(13)	C(13)-C(18)-C(17)	118.4(14)
P(2)-C(19)-C(20)	119.2(11)	P(2)-C(19)-C(24)	121.3(10)
C(20)-C(19)-C(24)	119.2(14)	C(19)-C(20)-C(21)	120.6(13)
C(20)-C(21)-C(22)	118.4(13)	C(21)-C(22)-C(23)	123.4(18)
C(22)-C(23)-C(24)	118.9(16)	C(19)-C(24)-C(23)	119.4(12)
P(2)-C(25)-C(26)	122.8(11)	P(2)-C(25)-C(30)	119.3(11)
C(26)-C(25)-C(30)	117.8(11)	C(25)-C(26)-C(27)	119.3(15)

C(26)-C(27)-C(28)	121.3(17)	C(27)-C(28)-C(29)	119.6(12)
C(28)-C(29)-C(30)	119.8(16)	C(25)-C(30)-C(29)	122.1(15)
P(2)-C(31)-C(32)	120.6(11)	P(2)-C(31)-C(36)	119.3(10)
C(32)-C(31)-C(36)	120.1(14)	C(31)-C(32)-C(33)	119.8(14)
C(32)-C(33)-C(34)	120.6(14)	C(33)-C(34)-C(35)	120.8(16)
C(34)-C(35)-C(36)	118.2(15)	C(31)-C(36)-C(35)	120.4(13)
Ru-C(37)-C(38)	128.1(10)	Ru-C(37)-C(42)	116.2(9)
C(38)-C(37)-C(42)	115.6(14)	O(1)-C(38)-C(37)	119.2(13)
O(1)-C(38)-C(39)	118.6(10)	C(37)-C(38)-C(39)	122.1(12)
C(38)-C(39)-C(40)	119.0(12)	C(38)-C(39)-C(44)	122.0(12)
C(40)-C(39)-C(44)	118.8(15)	C(39)-C(40)-C(41)	120.1(16)
C(40)-C(41)-C(42)	118.2(13)	C(40)-C(41)-C(43)	119.1(15)
C(42)-C(41)-C(43)	122.7(12)	C(37)-C(42)-C(41)	124.9(12)
N(1)-C(44)-C(39)	124.1(16)	N(1)-C(45)-C(46)	115.5(16)
N(1)-C(45)-C(50)	125.4(13)	C(46)-C(45)-C(50)	119.1(13)
C(45)-C(46)-C(47)	119.9(18)	C(46)-C(47)-C(48)	122.0(14)
C(47)-C(48)-C(49)	116.8(13)	C(47)-C(48)-C(51)	121.4(13)
C(49)-C(48)-C(51)	121.8(17)	C(48)-C(49)-C(50)	121.4(19)
C(45)-C(50)-C(49)	120.5(15)	Ru-C(52)-O(2)	171.2(13)
C(54)-C(53)-C(58)	119.1(13)	C(54)-C(53)-C(59)	121.5(12)
C(58)-C(53)-C(59)	119.4(15)	C(53)-C(54)-C(55)	122.5(16)
C(54)-C(55)-C(56)	120.6(25)	C(55)-C(56)-C(57)	117.5(19)
C(56)-C(57)-C(58)	123.6(16)	C(53)-C(58)-C(57)	116.6(17)
Ru-C(59)-O(3)	58.6(6)	Ru-C(59)-O(4)	59.0(5)
O(3)-C(59)-O(4)	117.5(10)	Ru-C(59)-C(53)	176.9(11)
O(3)-C(59)-C(53)	118.3(14)	O(4)-C(59)-C(53)	124.1(11)
C(2S)-C(1S)-C(6S)	121.1(60)	C(1S)-C(2S)-C(3S)	130.5(63)
C(2S)-C(3S)-C(4S)	108.2(43)	C(3S)-C(4S)-C(5S)	125.2(50)
C(4S)-C(5S)-C(6S)	117.7(45)	C(1S)-C(6S)-C(5S)	116.6(34)

Table S8 Anisotropic Displacement Coefficients ($Å^2x10^3$) for $Ru(\eta^1\text{-}MeC_6H_4L)\ (PPh_3)_2(CO)(\eta^2\text{-}PhCO_2).\ C_6H_6$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ru	38(1)	48(1)	39(1)	2(1)	15(1)	2(1)
P(1)	45(2)	48(2)	35(2)	2(2)	11(2)	1(2)
P(2)	42(2)	52(2)	46(2)	6(2)	20(2)	11(2)
O(2)	67(6)	78(7)	65(6)	-20(5)	30(5)	-17(5)
O(3)	52(5)	43(5)	48(5)	5(4)	21(4)	-2(4)
O(4)	46(5)	43(5)	47(5)	0(4)	19(4)	8(4)
O(1)	55(5)	69(6)	49(5)	-15(5)	21(4)	-13(4)
N(1)	69(7)	72(8)	50(7)	-3(6)	28(6)	8(6)
C(37)	47(8)	41(8)	38(8)	14(7)	12(6)	9(6)
C(38)	43(8)	56(9)	49(9)	8(7)	21(7)	9(7)
C(39)	46(8)	61(10)	53(9)	10(8)	21(7)	5(7)
C(40)	50(9)	92(12)	61(10)	-9(9)	22(8)	4(9)
C(41)	49(9)	72(10)	51(9)	-2(8)	24(7)	-5(8)
C(42)	60(9)	56(9)	42(8)	3(8)	19(7)	-1(7)
C(43)	85(12)	98(13)	83(12)	-22(11)	39(10)	-30(10)
C(44)	86(11)	59(9)	58(9)	-10(8)	37(8)	-9(8)
C(45)	59(9)	63(10)	60(9)	-1(8)	33(8)	-14(7)
C(46)	75(11)	93(13)	93(13)	-17(10)	57(10)	-14(10)
C(47)	58(9)	76(11)	72(11)	-9(8)	35(9)	-12(9)
C(48)	78(11)	44(9)	65(10)	6(8)	42(9)	7(7)
C(49)	85(12)	104(13)	77(12)	-18(11)	55(10)	-18(10)
C(50)	61(10)	105(13)	63(11)	-18(9)	31(8)	-17(10)
C(51)	94(12)	70(11)	76(11)	6(10)	32(10)	-10(9)
C(52)	51(8)	60(9)	46(8)	-4(7)	25(7)	1(6)
C(53)	70(10)	38(8)	37(8)	7(8)	20(8)	12(6)
C(54)	102(13)	72(11)	57(10)	10(10)	46(10)	-4(8)
C(55)	145(19)	73(13)	89(15)	43(13)	71(14)	11(11)
C(56)	192(26)	77(15)	59(13)	33(17)	38(16)	-16(11)
C(57)	116(15)	41(10)	50(11)	-10(10)	-14(10)	-9(8)
C(58)	89(12)	52(9)	54(10)	-1(9)	17(9)	10(8)
C(59)	67(9)	27(7)	40(8)	0(6)	8(7)	2(6)
C(1S)	165(40)	291(57)	214(51)	131(39)	158(43)	176(48)
C(2S)	138(43)	76(25)	474(121	54(25)	131(63)	108(40)
C(3S)	104(27)	208(52)	290(60)	63(28)	19(36)	-103(46)
C(4S)	140(31)	223(44)	120(25)	70(26)	71(26)	11(29)
C(5S)	128(26)	116(24)	238(42)	13(19)	95(30)	60(25)
C(6S)	95(21)	242(44)	102(25)	56(25)	22(17)	-14(23)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

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

Table S9 H-atom Coordinates (x10^4) and Isotropic Displacement Coefficients ($Å^2$x10^3) for Ru(η^1-MeC_6H_4L) (PPh_3)$_2$(CO)(η^2-PhCO_2). C_6H_6

	x	y	z	U
H(1O)	1807	9	-359	80
H(2A)	-326	3025	1865	80
H(3A)	-1303	3943	2584	80
H(4A)	-983	5537	2916	80
H(5A)	376	6244	2642	80
H(6A)	1465	5304	1958	80
H(8A)	937	1721	-328	80
H(9A)	-491	1207	-1904	80
H(10A)	-2058	1948	-2434	80
H(11A)	-2183	3346	-1452	80
H(12A)	-765	3875	74	80
H(14A)	1332	3931	-481	80
H(15A)	2500	4985	-716	80
H(16A)	4079	5740	596	80
H(17A)	4477	5564	2146	80
H(18A)	3322	4497	2427	80
H(20A)	2583	-313	1536	80
H(21A)	3409	-1578	967	80
H(22A)	5269	-1677	1808	80
H(23A)	6320	-660	3201	80
H(24A)	5510	601	3812	80
H(26A)	3855	1451	5275	80
H(27A)	5263	2388	6659	80
H(28A)	6607	3306	6524	80
H(29A)	6602	3273	5019	80
H(30A)	5167	2409	3632	80
H(32A)	3616	-467	4012	80
H(33A)	2649	-1301	4662	80
H(34A)	951	-886	4605	80
H(35A)	192	382	3946	80
H(36A)	1202	1253	3322	80
H(40A)	5058	1467	-2	80
H(42A)	4278	2941	2092	80
H(43A)	6154	2856	915	80
H(43B)	5524	3645	1245	80
H(43C)	6281	3080	1988	80
H(44A)	3878	117	-1104	80
H(46A)	717	-1392	-2098	80
H(47A)	40	-2417	-3609	80
H(49A)	2924	-1929	-3789	80
H(50A)	3606	-956	-2274	80
H(51A)	1466	-2927	-5145	80
H(51B)	714	-3511	-4839	80
H(51C)	285	-2645	-5295	80
H(54A)	1158	3973	4361	80
H(55A)	1350	5074	5729	80
H(56A)	3080	5872	6765	80
H(57A)	4586	5474	6455	80
H(58A)	4415	4395	5043	80
H(1SA)	7752	7695	4207	80
H(2SA)	6763	6545	3120	80
H(3SA)	6364	6302	1529	80
H(4SA)	7409	7423	1200	80
H(5SA)	8495	8638	2349	80
H(6SA)	8692	8746	3915	80

Table S10. Atomic Coordinates (x10^4) and Equivalent Isotropic* Displacement Coefficients (Å^{2}x10^3) for Ru(η^1-MeC_6H_4L) (PPh_3)$_2$(CO)(η^2-PhCO_2). C_6H_6

	x	y	z	U(eq)
Ru	2271(1)	2168(1)	2152(1)	43(1)
P(1)	1340(3)	3291(3)	1226(2)	45(2)
P(2)	3280(3)	1172(3)	3186(3)	46(2)
O(2)	400(7)	697(6)	1063(6)	74(5)
O(3)	1779(6)	2792(5)	3322(5)	49(4)
O(4)	3267(6)	3400(5)	3278(6)	46(4)
O(1)	1990(7)	505(6)	198(6)	62(4)
N(1)	2491(9)	-369(8)	-1182(7)	63(5)
C(1)	636(11)	4065(9)	1819(9)	53(4)
C(2)	-170(11)	3693(10)	2019(9)	64(4)
C(3)	-762(13)	4238(11)	2435(10)	77(4)
C(4)	-546(14)	5166(12)	2651(11)	91(5)
C(5)	236(13)	5575(12)	2489(11)	82(5)
C(6)	873(12)	5022(10)	2055(10)	72(4)
C(7)	225(10)	2857(8)	47(9)	46(3)
C(8)	302(12)	2063(10)	-546(10)	64(4)
C(9)	-563(13)	1755(11)	-1492(11)	81(5)
C(10)	-1478(13)	2191(11)	-1806(11)	75(4)
C(11)	-1551(13)	3002(10)	-1235(11)	74(4)
C(12)	-711(11)	3310(9)	-326(9)	59(4)
C(13)	2214(10)	4106(8)	994(9)	49(3)
C(14)	1980(12)	4257(10)	57(10)	64(4)
C(15)	2667(12)	4880(10)	-79(11)	75(4)
C(16)	3584(14)	5330(11)	697(12)	88(5)
C(17)	3845(13)	5215(11)	1610(11)	78(4)
C(18)	3152(11)	4594(10)	1787(11)	66(4)
C(19)	3963(11)	258(9)	2720(9)	56(4)
C(20)	3349(12)	-383(10)	1890(10)	67(4)
C(21)	3834(14)	-1122(12)	1545(12)	83(5)
C(22)	4923(14)	-1182(12)	2048(12)	86(5)
C(23)	5555(15)	-580(12)	2858(12)	93(5)
C(24)	5070(13)	155(11)	3231(12)	78(5)
C(25)	4380(10)	1831(9)	4309(9)	48(3)
C(26)	4405(11)	1834(10)	5214(10)	64(4)

Contd. Table S10

C(27)	5244(12)	2387(11)	6031(12)	76(5)
C(28)	6039(12)	2925(10)	5956(11)	73(4)
C(29)	6030(12)	2913(10)	5074(10)	71(4)
C(30)	5193(11)	2387(9)	4258(10)	63(4)
C(31)	2508(10)	477(8)	3637(8)	44(3)
C(32)	2930(11)	-277(9)	4015(9)	60(4)
C(33)	2342(11)	-785(10)	4374(10)	66(4)
C(34)	1344(11)	-530(10)	4355(10)	64(4)
C(35)	897(13)	215(10)	3971(10)	72(4)
C(36)	1500(11)	728(10)	3597(9)	61(4)
C(37)	3151(10)	1851(9)	1296(8)	43(6)
C(38)	2930(10)	1091(9)	519(9)	49(6)
C(39)	3628(11)	941(10)	22(10)	54(7)
C(40)	4565(11)	1575(11)	312(10)	70(7)
C(41)	4794(11)	2332(10)	1062(10)	59(7)
C(42)	4085(11)	2427(9)	1549(9)	55(6)
C(43)	5780(13)	3044(12)	1326(12)	94(9)
C(44)	3357(12)	206(9)	-818(10)	68(7)
C(45)	2194(12)	-1040(10)	-2077(10)	62(7)
C(46)	1161(13)	-1487(11)	-2460(12)	85(9)
C(47)	770(12)	-2100(10)	-3351(11)	70(8)
C(48)	1389(13)	-2262(9)	-3875(10)	59(7)
C(49)	2456(14)	-1823(12)	-3450(12)	87(9)
C(50)	2856(12)	-1234(12)	-2563(11)	80(8)
C(51)	923(13)	-2895(11)	-4882(11)	84(8)
C(52)	1155(10)	1238(9)	1431(9)	52(6)
C(53)	2741(12)	4094(9)	4561(9)	49(6)
C(54)	1872(15)	4291(11)	4791(10)	75(9)
C(55)	1975(20)	4934(12)	5585(14)	95(12)
C(56)	2983(25)	5401(14)	6208(14)	118(14)
C(57)	3864(17)	5183(11)	6009(11)	88(9)
C(58)	3788(13)	4531(9)	5185(10)	69(8)
C(59)	2603(11)	3418(8)	3692(8)	50(6)
C(1S)	7617(38)	7547(39)	3535(36)	179(37)
C(2S)	7035(38)	6921(25)	2798(49)	220(58)
C(3S)	6870(44)	6837(42)	1936(39)	243(35)
C(4S)	7538(34)	7540(33)	1870(26)	158(24)
C(5S)	8134(25)	8238(23)	2586(42)	151(24)
C(6S)	8221(24)	8207(31)	3472(25)	159(21)

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