ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1997, 16(6), 1203-1208, DOI:10.1021/om9609473

Table 1. Crystal data and structure refinement for (η^6-cymene)RuCl(NHAr)

Identification code	akb19
Empirical formula	C24 H35 Cl N Ru
Formula weight	474.05
Temperature	168(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/c$
Unit cell dimensions	a = 9.699(7) Å alpha = 90 deg. b = 14.095(14) Å beta = 100.82(8) deg. c = 16.758(10) Å gamma = 90 deg.
Volume	2250(3) Å^3
Z	4
Density (calculated)	1.399 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.824 mm^-1
F(000)	988
Crystal size	0.64 x 0.20 x 0.06 mm
Theta range for data collection	2.14 to 18.00 deg.
Index ranges	-10<=h<=0, 0<=k<=15, -17<=l<=17
Reflections collected	1665
Independent reflections	1547 [R(int) = 0.1763]
Absorption correction	None
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	1539 / 132 / 239
Goodness-of-fit on F^2	1.059
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0825, wR2 = 0.1584
R indices (all data)	R1 = 0.1579, wR2 = 0.1945
Largest diff. peak and hole	0.764 and -0.669 e.Å^-3

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for (η^6-cymene)RuCl(NHAr). U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Ru	5691(2)	8111(1)	1406(1)	20(1)
Cl	4628(6)	7465(5)	2458(4)	42(2)
N	6966(16)	7047(13)	1676(10)	22(5)
C(1)	4766(25)	9531(17)	1498(15)	28(7)
C(2)	3899(24)	9061(17)	844(14)	22(7)
C(3)	4523(25)	8618(17)	292(15)	31(7)
C(4)	6003(24)	8717(16)	240(14)	21(6)
C(5)	6820(24)	9200(16)	916(14)	23(7)
C(6)	6219(22)	9603(15)	1541(14)	14(6)
C(11)	4117(22)	9907(16)	2183(13)	24(7)
C(12)	2363(22)	8924(16)	866(14)	31(7)
C(13)	3630(25)	8048(22)	-412(15)	60(9)
C(14)	6653(22)	8302(18)	-431(14)	40(8)
C(15)	8395(23)	9295(16)	955(14)	35(8)
C(16)	7132(24)	10073(18)	2246(14)	40(8)
C(20)	9470(24)	7673(16)	2741(15)	26(7)
C(21)	10546(22)	8402(17)	3049(15)	45(8)
C(22)	9494(23)	6939(19)	3424(12)	37(7)
C(30)	7114(25)	5932(18)	208(15)	39(8)
C(31)	7188(27)	5800(18)	-677(14)	47(8)
C(32)	6921(22)	4950(15)	605(13)	18(6)
C(41)	8273(22)	6848(19)	1425(13)	27(6)
C(42)	8403(23)	6405(16)	732(14)	21(7)
C(43)	9691(25)	6234(17)	523(15)	34(7)
C(44)	10853(26)	6595(16)	1035(16)	40(8)
C(45)	10761(23)	7001(18)	1744(15)	33(7)
C(46)	9527(24)	7187(16)	1998(14)	26(7)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [deg] for (η^6-cymene)RuCl(NHAr).

Ru-N	1.94(2)
Ru-C(3)	2.12(2)
Ru-C(5)	2.14(2)
Ru-C(6)	2.17(2)
Ru-C(4)	2.20(2)
Ru-C(1)	2.21(2)
Ru-C(2)	2.26(2)
Ru-Cl	2.383(7)
N-C(41)	1.44(2)
C(1)-C(6)	1.40(3)
C(1)-C(2)	1.41(3)
C(1)-C(11)	1.51(3)
C(2)-C(3)	1.35(3)
C(2)-C(12)	1.51(3)
C(3)-C(4)	1.46(3)
C(3)-C(13)	1.55(3)
C(4)-C(5)	1.43(3)
C(4)-C(14)	1.51(3)
C(5)-C(6)	1.41(3)
C(5)-C(15)	1.52(3)
C(6)-C(16)	1.49(3)
C(20)-C(46)	1.43(3)
C(20)-C(21)	1.49(3)
C(20)-C(22)	1.54(3)
C(30)-C(31)	1.51(3)
C(30)-C(42)	1.54(3)
C(30)-C(32)	1.56(3)
C(41)-C(42)	1.35(3)
C(41)-C(46)	1.48(3)
C(42)-C(43)	1.38(3)
C(43)-C(44)	1.38(3)
C(44)-C(45)	1.34(3)
C(45)-C(46)	1.37(3)
N-Ru-C(3)	132.6(8)
N-Ru-C(5)	107.1(8)
C(3)-Ru-C(5)	69.3(9)
N-Ru-C(6)	126.7(8)
C(3)-Ru-C(6)	80.9(9)
C(5)-Ru-C(6)	38.2(8)
N-Ru-C(4)	108.5(8)
C(3)-Ru-C(4)	39.4(8)
C(5)-Ru-C(4)	38.3(8)
C(6)-Ru-C(4)	69.3(9)
N-Ru-C(1)	158.8(8)
C(3)-Ru-C(1)	66.3(9)
C(5)-Ru-C(1)	67.7(9)
C(6)-Ru-C(1)	37.3(7)
C(4)-Ru-C(1)	80.5(9)
N-Ru-C(2)	164.3(8)
C(3)-Ru-C(2)	35.8(8)
C(5)-Ru-C(2)	79.8(8)
C(6)-Ru-C(2)	67.4(8)
C(4)-Ru-C(2)	67.9(8)
C(1)-Ru-C(2)	36.9(8)
N-Ru-Cl	83.0(5)
C(3)-Ru-Cl	123.1(7)
C(5)-Ru-Cl	151.9(7)

C(6)-Ru-Cl	114.9(6)
C(4)-Ru-Cl	162.5(6)
C(1)-Ru-Cl	93.3(6)
C(2)-Ru-Cl	97.4(6)
C(41)-N-Ru	130(2)
C(6)-C(1)-C(2)	121(2)
C(6)-C(1)-C(11)	120(2)
C(2)-C(1)-C(11)	119(2)
C(6)-C(1)-Ru	69.6(14)
C(2)-C(1)-Ru	73.3(14)
C(11)-C(1)-Ru	127(2)
C(3)-C(2)-C(1)	118(2)
C(3)-C(2)-C(12)	122(2)
C(1)-C(2)-C(12)	119(2)
C(3)-C(2)-Ru	66.6(14)
C(1)-C(2)-Ru	69.8(13)
C(12)-C(2)-Ru	127(2)
C(2)-C(3)-C(4)	125(2)
C(2)-C(3)-C(13)	120(2)
C(4)-C(3)-C(13)	115(2)
C(2)-C(3)-Ru	78(2)
C(4)-C(3)-Ru	73.4(13)
C(13)-C(3)-Ru	129(2)
C(5)-C(4)-C(3)	114(2)
C(5)-C(4)-C(14)	122(2)
C(3)-C(4)-C(14)	124(2)
C(5)-C(4)-Ru	68.3(13)
C(3)-C(4)-Ru	67.1(13)
C(14)-C(4)-Ru	131(2)
C(6)-C(5)-C(4)	122(2)
C(6)-C(5)-C(15)	119(2)
C(4)-C(5)-C(15)	119(2)
C(6)-C(5)-Ru	72.0(13)
C(4)-C(5)-Ru	73.4(13)
C(15)-C(5)-Ru	129(2)
C(1)-C(6)-C(5)	119(2)
C(1)-C(6)-C(16)	121(2)
C(5)-C(6)-C(16)	120(2)
C(1)-C(6)-Ru	73.1(14)
C(5)-C(6)-Ru	69.8(13)
C(16)-C(6)-Ru	127(2)
C(46)-C(20)-C(21)	120(2)
C(46)-C(20)-C(22)	109(2)
C(21)-C(20)-C(22)	107(2)
C(31)-C(30)-C(42)	116(2)
C(31)-C(30)-C(32)	110(2)
C(42)-C(30)-C(32)	107(2)
C(42)-C(41)-N	125(2)
C(42)-C(41)-C(46)	121(2)
N-C(41)-C(46)	114(2)
C(41)-C(42)-C(43)	122(2)
C(41)-C(42)-C(30)	120(2)
C(43)-C(42)-C(30)	117(2)
C(44)-C(43)-C(42)	117(2)
C(45)-C(44)-C(43)	122(2)
C(44)-C(45)-C(46)	125(2)
C(45)-C(46)-C(20)	123(2)
C(45)-C(46)-C(41)	113(2)
C(20)-C(46)-C(41)	124(2)

Table 4. Anisotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for (η^6-cymene)RuCl(NHAr). The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ru	21(1)	17(1)	21(1)	5(2)	-1(1)	4(2)
Cl	36(4)	38(5)	54(5)	24(4)	15(4)	10(4)
N	7(8)	22(9)	35(9)	-11(8)	0(7)	-1(7)
C(1)	28(10)	26(11)	28(11)	-4(8)	5(8)	-4(8)
C(2)	22(10)	34(10)	14(10)	3(8)	13(8)	6(8)
C(3)	37(10)	22(10)	35(10)	1(9)	6(8)	4(8)
C(4)	22(10)	22(10)	17(10)	7(8)	-1(8)	9(8)
C(5)	24(10)	28(10)	15(10)	-6(8)	-2(8)	1(8)
C(6)	17(10)	10(10)	17(10)	-1(8)	5(8)	3(8)
C(12)	42(17)	9(14)	39(17)	11(13)	-1(13)	10(13)
C(13)	67(12)	58(12)	53(12)	-5(9)	4(9)	-3(9)
C(14)	21(15)	50(22)	48(19)	35(18)	5(13)	-5(15)
C(15)	56(19)	10(15)	32(17)	4(13)	-14(14)	14(14)
C(16)	46(11)	35(11)	39(11)	12(9)	6(9)	5(9)
C(20)	21(10)	24(10)	32(10)	-3(9)	-2(8)	0(8)
C(21)	15(15)	48(22)	59(20)	-5(16)	-26(14)	-6(14)
C(22)	34(14)	68(17)	9(15)	-17(16)	4(11)	-21(17)
C(30)	39(11)	37(11)	39(11)	-2(9)	-2(9)	6(9)
C(31)	64(21)	35(20)	39(20)	3(16)	-2(16)	7(17)
C(32)	9(9)	20(10)	22(10)	-2(8)	-6(8)	0(8)
C(41)	36(10)	28(10)	19(10)	-2(9)	8(8)	7(9)
C(42)	24(10)	20(10)	18(10)	-7(8)	-1(8)	6(8)
C(43)	34(10)	27(10)	36(11)	-5(9)	-1(8)	7(8)
C(44)	40(11)	32(11)	49(11)	-4(9)	10(9)	-5(9)
C(45)	27(10)	32(11)	38(10)	0(9)	3(8)	-1(9)
C(46)	25(8)	25(8)	28(8)	0(5)	5(5)	3(5)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for (η^6-cymene)RuCl(NHAr).

	x	y	z	U(eq)
H(11A)	3795(22)	10546(16)	2070(13)	28
H(11B)	3339(22)	9512(16)	2247(13)	28
H(11C)	4809(22)	9897(16)	2675(13)	28
H(12A)	1830(22)	9425(16)	564(14)	37
H(12B)	2027(22)	8322(16)	642(14)	37
H(12C)	2258(22)	8957(16)	1424(14)	37
H(13A)	3229(25)	8457(22)	-853(15)	72
H(13B)	4204(25)	7577(22)	-605(15)	72
H(13C)	2892(25)	7741(22)	-200(15)	72
H(14A)	6604(22)	8768(18)	-853(14)	48
H(14B)	7618(22)	8145(18)	-225(14)	48
H(14C)	6154(22)	7742(18)	-646(14)	48
H(15A)	8594(23)	9854(16)	669(14)	42
H(15B)	8855(23)	9338(16)	1513(14)	42
H(15C)	8732(23)	8746(16)	711(14)	42
H(16A)	7190(24)	10735(18)	2123(14)	48
H(16B)	6720(24)	9999(18)	2720(14)	48
H(16C)	8057(24)	9802(18)	2346(14)	48
H(20A)	8569(24)	7977(16)	2674(15)	32
H(23A)	10537(22)	8886(17)	2645(15)	54
H(23B)	10353(22)	8682(17)	3538(15)	54
H(23C)	11452(22)	8104(17)	3159(15)	54
H(22A)	8803(23)	6456(19)	3254(12)	45
H(22B)	10412(23)	6658(19)	3530(12)	45
H(22C)	9313(23)	7236(19)	3910(12)	45
H(40A)	6317(25)	6323(18)	245(15)	47
H(31A)	7315(27)	6407(18)	-914(14)	57
H(31B)	7959(27)	5392(18)	-729(14)	57
H(31C)	6327(27)	5521(18)	-954(14)	57
H(32A)	6884(22)	5036(15)	1169(13)	22
H(32B)	6060(22)	4669(15)	331(13)	22
H(32C)	7692(22)	4540(15)	557(13)	22
H(43A)	9751(25)	5908(17)	29(15)	40
H(44A)	11751(26)	6536(16)	878(16)	48
H(45A)	11615(23)	7166(18)	2108(15)	39

Table 6. Crystal data and structure refinement for (η^6-cymene)$RuCl_2(NH_2Ar)$

Identification code	als23
Empirical formula	C22 H33 Cl2 N Ru
Formula weight	483.46
Temperature	291(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	*Cc*
Unit cell dimensions	a = 19.865(4) Å alpha = 90 deg. b = 6.930(4) Å beta = 98.47(3) deg. c = 33.57(2) Å gamma = 90 deg.
Volume	4571(4) Å^3
Z	8
Density (calculated)	1.405 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.926 mm^-1
F(000)	2000
Crystal size	0.70 x 0.70 x 0.50 mm
Theta range for data collection	1.23 to 24.99 deg.
Index ranges	0<=h<=23, 0<=k<=8, -39<=l<=39
Reflections collected	4149
Independent reflections	4149 [R(int) = 0.0000]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	4144 / 2 / 481
Goodness-of-fit on F^2	1.061
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0262, wR2 = 0.0842
R indices (all data)	R1 = 0.0371, wR2 = 0.0977
Absolute structure parameter	0.06(8)
Largest diff. peak and hole	0.503 and -0.413 e.Å^-3

Table 7. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Ru(1)	2014(1)	4022(1)	2050(1)	29(1)
Cl(11)	2758(3)	1345(6)	2240(2)	52(1)
Cl(12)	1056(3)	1825(6)	1986(1)	46(1)
N(1)	1896(8)	3749(18)	2693(3)	36(3)
C(11)	1415(9)	6247(22)	1666(5)	40(4)
C(12)	1759(9)	5006(20)	1441(4)	44(4)
C(13)	2475(10)	4840(22)	1548(4)	42(4)
C(14)	2889(9)	5515(21)	1838(4)	33(3)
C(15)	2515(9)	6830(20)	2095(5)	33(4)
C(16)	1812(9)	7251(20)	2025(4)	41(4)
C(17)	683(10)	6590(30)	1593(6)	66(5)
C(18)	3629(9)	5322(24)	1953(4)	46(4)
C(19)	3869(11)	3703(31)	1691(5)	67(5)
C(110)	4020(9)	7079(29)	1922(5)	57(4)
C(111)	1915(8)	5426(24)	2940(3)	35(4)
C(112)	2505(11)	6068(23)	3150(5)	53(5)
C(113)	2542(11)	7731(30)	3380(5)	78(7)
C(114)	1911(15)	8649(28)	3434(7)	88(7)
C(115)	1331(11)	7957(23)	3234(3)	52(5)
C(116)	1303(12)	6389(28)	2966(5)	46(5)
C(117)	3196(9)	5004(27)	3089(4)	47(4)
C(118)	3316(10)	3558(31)	3422(6)	68(5)
C(119)	3816(12)	6474(38)	3110(7)	96(7)
C(120)	637(9)	5672(33)	2752(6)	69(6)
C(121)	141(11)	7486(35)	2652(6)	85(6)
C(122)	380(12)	3880(32)	3008(6)	78(6)
Ru(2)	1587(1)	9033(1)	5449(1)	30(1)
Cl(21)	2555(2)	6853(6)	5514(1)	45(1)
Cl(22)	849(3)	6313(7)	5255(2)	55(1)
N(2)	1717(8)	8814(15)	4824(4)	37(4)
C(21)	2172(8)	11248(24)	5794(5)	39(4)
C(22)	1839(10)	10125(24)	6074(3)	44(5)
C(23)	1153(8)	9689(20)	6016(3)	29(3)
C(24)	759(7)	10728(20)	5628(4)	31(3)
C(25)	1062(9)	11724(21)	5388(4)	34(4)
C(26)	1779(9)	12010(17)	5485(5)	32(3)
C(27)	2960(8)	11398(25)	5882(5)	55(4)
C(28)	-19(9)	10272(32)	5531(5)	60(5)
C(29)	-385(11)	12349(35)	5525(6)	84(6)
C(210)	-324(12)	8893(29)	5815(7)	80(7)
C(211)	1703(10)	10424(23)	4539(5)	43(4)
C(212)	1036(8)	10996(22)	4348(4)	41(4)
C(213)	2238(13)	13031(32)	4272(6)	82(7)
C(214)	1602(13)	13552(30)	4061(5)	76(6)
C(215)	1063(11)	12587(28)	4094(4)	58(5)
C(216)	2296(11)	11422(28)	4504(5)	44(4)
C(217)	423(11)	9949(34)	4371(5)	62(6)
C(218)	271(13)	8056(33)	4094(7)	82(6)
C(219)	-200(10)	11176(29)	4343(6)	66(4)
C(220)	2985(9)	10719(25)	4733(4)	47(5)
C(221)	3546(13)	12070(37)	4816(7)	99(7)
C(222)	3288(13)	9312(36)	4497(8)	91(7)

Table 8. Bond lengths [Å] and angles [deg] for (η^6-cymene)$RuCl_2(NH_2Ar)$.

Ru(1)-C(13)	2.110(14)
Ru(1)-C(12)	2.143(14)
Ru(1)-C(15)	2.18(2)
Ru(1)-N(1)	2.214(10)
Ru(1)-C(14)	2.23(2)
Ru(1)-C(11)	2.24(2)
Ru(1)-C(16)	2.273(14)
Ru(1)-Cl(11)	2.399(5)
Ru(1)-Cl(12)	2.422(5)
N(1)-C(111)	1.42(2)
C(11)-C(12)	1.39(2)
C(11)-C(17)	1.46(3)
C(11)-C(16)	1.51(2)
C(12)-C(13)	1.42(2)
C(13)-C(14)	1.27(2)
C(14)-C(18)	1.47(2)
C(14)-C(15)	1.52(2)
C(15)-C(16)	1.41(2)
C(18)-C(110)	1.46(3)
C(18)-C(19)	1.54(2)
C(111)-C(112)	1.35(3)
C(111)-C(116)	1.40(3)
C(112)-C(113)	1.38(2)
C(112)-C(117)	1.60(3)
C(113)-C(114)	1.44(3)
C(114)-C(115)	1.34(3)
C(115)-C(116)	1.41(2)
C(116)-C(120)	1.50(3)
C(117)-C(118)	1.49(2)
C(117)-C(119)	1.59(3)
C(120)-C(121)	1.60(2)
C(120)-C(122)	1.64(3)
Ru(2)-C(26)	2.098(12)
Ru(2)-C(25)	2.13(2)
Ru(2)-C(21)	2.16(2)
Ru(2)-N(2)	2.159(13)
Ru(2)-C(24)	2.18(2)
Ru(2)-C(22)	2.217(11)
Ru(2)-C(23)	2.248(11)
Ru(2)-Cl(22)	2.418(5)
Ru(2)-Cl(21)	2.429(4)
N(2)-C(211)	1.47(2)
C(21)-C(26)	1.31(2)
C(21)-C(22)	1.45(2)
C(21)-C(27)	1.55(2)
C(22)-C(23)	1.38(2)
C(23)-C(24)	1.59(2)
C(24)-C(25)	1.27(2)
C(24)-C(28)	1.56(2)
C(25)-C(26)	1.43(2)
C(28)-C(210)	1.54(3)
C(28)-C(29)	1.61(3)
C(211)-C(216)	1.39(3)
C(211)-C(212)	1.44(2)
C(212)-C(215)	1.40(2)
C(212)-C(217)	1.43(3)
C(213)-C(216)	1.36(3)

C(213)-C(214)	1.40(3)
C(214)-C(215)	1.28(3)
C(216)-C(220)	1.55(3)
C(217)-C(219)	1.49(3)
C(217)-C(218)	1.61(3)
C(220)-C(222)	1.44(3)
C(220)-C(221)	1.45(3)

C(13)-Ru(1)-C(12)	39.0(7)
C(13)-Ru(1)-C(15)	64.5(6)
C(12)-Ru(1)-C(15)	79.9(6)
C(13)-Ru(1)-N(1)	157.3(6)
C(12)-Ru(1)-N(1)	155.9(6)
C(15)-Ru(1)-N(1)	97.0(5)
C(13)-Ru(1)-C(14)	33.9(6)
C(12)-Ru(1)-C(14)	68.5(6)
C(15)-Ru(1)-C(14)	40.4(5)
N(1)-Ru(1)-C(14)	123.5(6)
C(13)-Ru(1)-C(11)	67.1(7)
C(12)-Ru(1)-C(11)	36.9(6)
C(15)-Ru(1)-C(11)	67.9(6)
N(1)-Ru(1)-C(11)	119.8(6)
C(14)-Ru(1)-C(11)	82.5(6)
C(13)-Ru(1)-C(16)	78.5(6)
C(12)-Ru(1)-C(16)	68.6(5)
C(15)-Ru(1)-C(16)	36.9(6)
N(1)-Ru(1)-C(16)	94.4(5)
C(14)-Ru(1)-C(16)	70.9(6)
C(11)-Ru(1)-C(16)	39.1(5)
C(13)-Ru(1)-Cl(11)	95.6(5)
C(12)-Ru(1)-Cl(11)	123.3(4)
C(15)-Ru(1)-Cl(11)	114.5(5)
N(1)-Ru(1)-Cl(11)	79.9(4)
C(14)-Ru(1)-Cl(11)	88.0(4)
C(11)-Ru(1)-Cl(11)	160.2(5)
C(16)-Ru(1)-Cl(11)	150.5(5)
C(13)-Ru(1)-Cl(12)	121.7(5)
C(12)-Ru(1)-Cl(12)	92.5(4)
C(15)-Ru(1)-Cl(12)	155.7(4)
N(1)-Ru(1)-Cl(12)	80.7(4)
C(14)-Ru(1)-Cl(12)	154.6(4)
C(11)-Ru(1)-Cl(12)	92.2(5)
C(16)-Ru(1)-Cl(12)	118.9(5)
Cl(11)-Ru(1)-Cl(12)	89.0(2)
C(111)-N(1)-Ru(1)	120.0(8)
C(12)-C(11)-C(17)	125(2)
C(12)-C(11)-C(16)	119(2)
C(17)-C(11)-C(16)	117(2)
C(12)-C(11)-Ru(1)	67.9(9)
C(17)-C(11)-Ru(1)	130.0(12)
C(16)-C(11)-Ru(1)	71.8(8)
C(11)-C(12)-C(13)	117.9(14)
C(11)-C(12)-Ru(1)	75.2(9)
C(13)-C(12)-Ru(1)	69.2(8)
C(14)-C(13)-C(12)	133(2)
C(14)-C(13)-Ru(1)	78.2(9)
C(12)-C(13)-Ru(1)	71.8(9)
C(13)-C(14)-C(18)	133(2)
C(13)-C(14)-C(15)	110(2)
C(18)-C(14)-C(15)	117(2)
C(13)-C(14)-Ru(1)	68.0(10)
C(18)-C(14)-Ru(1)	132.2(10)
C(15)-C(14)-Ru(1)	68.1(8)

C(16)-C(15)-C(14)	126(2)
C(16)-C(15)-Ru(1)	75.1(10)
C(14)-C(15)-Ru(1)	71.5(8)
C(15)-C(16)-C(11)	115(2)
C(15)-C(16)-Ru(1)	68.0(9)
C(11)-C(16)-Ru(1)	69.2(8)
C(110)-C(18)-C(14)	115(2)
C(110)-C(18)-C(19)	111(2)
C(14)-C(18)-C(19)	107(2)
C(112)-C(111)-C(116)	120(2)
C(112)-C(111)-N(1)	121(2)
C(116)-C(111)-N(1)	119(2)
C(111)-C(112)-C(113)	123(2)
C(111)-C(112)-C(117)	118(2)
C(113)-C(112)-C(117)	119(2)
C(112)-C(113)-C(114)	118(2)
C(115)-C(114)-C(113)	119(2)
C(114)-C(115)-C(116)	123(2)
C(115)-C(116)-C(111)	117(2)
C(115)-C(116)-C(120)	121(2)
C(111)-C(116)-C(120)	122(2)
C(118)-C(117)-C(112)	104.9(14)
C(118)-C(117)-C(119)	111(2)
C(112)-C(117)-C(119)	112(2)
C(116)-C(120)-C(121)	108(2)
C(116)-C(120)-C(122)	109(2)
C(121)-C(120)-C(122)	118(2)
C(26)-Ru(2)-C(25)	39.4(7)
C(26)-Ru(2)-C(21)	35.9(6)
C(25)-Ru(2)-C(21)	69.3(7)
C(26)-Ru(2)-N(2)	94.5(5)
C(25)-Ru(2)-N(2)	95.4(5)
C(21)-Ru(2)-N(2)	116.1(5)
C(26)-Ru(2)-C(24)	65.9(6)
C(25)-Ru(2)-C(24)	34.4(6)
C(21)-Ru(2)-C(24)	80.6(6)
N(2)-Ru(2)-C(24)	120.6(5)
C(26)-Ru(2)-C(22)	66.2(6)
C(25)-Ru(2)-C(22)	80.3(6)
C(21)-Ru(2)-C(22)	38.8(6)
N(2)-Ru(2)-C(22)	154.4(6)
C(24)-Ru(2)-C(22)	68.3(6)
C(26)-Ru(2)-C(23)	80.9(6)
C(25)-Ru(2)-C(23)	70.2(5)
C(21)-Ru(2)-C(23)	69.2(5)
N(2)-Ru(2)-C(23)	162.4(5)
C(24)-Ru(2)-C(23)	42.1(5)
C(22)-Ru(2)-C(23)	36.0(6)
C(26)-Ru(2)-Cl(22)	151.6(5)
C(25)-Ru(2)-Cl(22)	112.8(5)
C(21)-Ru(2)-Cl(22)	163.1(4)
N(2)-Ru(2)-Cl(22)	80.7(3)
C(24)-Ru(2)-Cl(22)	92.4(4)
C(22)-Ru(2)-Cl(22)	124.4(5)
C(23)-Ru(2)-Cl(22)	95.3(4)
C(26)-Ru(2)-Cl(21)	118.2(5)
C(25)-Ru(2)-Cl(21)	157.2(5)
C(21)-Ru(2)-Cl(21)	92.2(4)
N(2)-Ru(2)-Cl(21)	80.6(4)
C(24)-Ru(2)-Cl(21)	158.7(4)
C(22)-Ru(2)-Cl(21)	93.6(5)
C(23)-Ru(2)-Cl(21)	116.6(4)
Cl(22)-Ru(2)-Cl(21)	88.9(2)

C(211)-N(2)-Ru(2)	125.9(9)
C(26)-C(21)-C(22)	116.9(14)
C(26)-C(21)-C(27)	126(2)
C(22)-C(21)-C(27)	117(2)
C(26)-C(21)-Ru(2)	69.6(8)
C(22)-C(21)-Ru(2)	72.9(8)
C(27)-C(21)-Ru(2)	126.7(11)
C(23)-C(22)-C(21)	124.0(13)
C(23)-C(22)-Ru(2)	73.2(7)
C(21)-C(22)-Ru(2)	68.4(7)
C(22)-C(23)-C(24)	111.9(12)
C(22)-C(23)-Ru(2)	70.7(7)
C(24)-C(23)-Ru(2)	66.5(7)
C(25)-C(24)-C(28)	122(2)
C(25)-C(24)-C(23)	122.7(14)
C(28)-C(24)-C(23)	115.5(13)
C(25)-C(24)-Ru(2)	70.9(10)
C(28)-C(24)-Ru(2)	126.7(11)
C(23)-C(24)-Ru(2)	71.4(7)
C(24)-C(25)-C(26)	118.6(14)
C(24)-C(25)-Ru(2)	74.7(9)
C(26)-C(25)-Ru(2)	69.0(8)
C(21)-C(26)-C(25)	125.6(14)
C(21)-C(26)-Ru(2)	74.4(8)
C(25)-C(26)-Ru(2)	71.6(8)
C(210)-C(28)-C(24)	118(2)
C(210)-C(28)-C(29)	110(2)
C(24)-C(28)-C(29)	105(2)
C(216)-C(211)-C(212)	124(2)
C(216)-C(211)-N(2)	120(2)
C(212)-C(211)-N(2)	115(2)
C(211)-C(212)-C(215)	112(2)
C(211)-C(212)-C(217)	124.9(14)
C(215)-C(212)-C(217)	123(2)
C(216)-C(213)-C(214)	120(2)
C(215)-C(214)-C(213)	122(2)
C(214)-C(215)-C(212)	125(2)
C(211)-C(216)-C(213)	117(2)
C(211)-C(216)-C(220)	120(2)
C(213)-C(216)-C(220)	123(2)
C(212)-C(217)-C(219)	114(2)
C(212)-C(217)-C(218)	118(2)
C(219)-C(217)-C(218)	110(2)
C(222)-C(220)-C(221)	100(2)
C(222)-C(220)-C(216)	111(2)
C(221)-C(220)-C(216)	119(2)

Table 9. Anisotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for (η^6-cymene)$RuCl_2(NH_2Ar)$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ru(1)	36(1)	22(1)	29(1)	-2(1)	7(1)	0(1)
Cl(11)	69(4)	20(2)	71(3)	10(2)	26(3)	11(2)
Cl(12)	60(3)	47(2)	32(2)	-9(2)	11(2)	-14(2)
N(1)	45(8)	50(7)	16(5)	15(5)	12(5)	-11(6)
C(11)	47(9)	32(7)	36(6)	9(5)	-13(6)	-4(6)
C(12)	44(9)	29(6)	58(8)	2(6)	6(7)	-7(6)
C(13)	66(9)	40(6)	23(5)	0(5)	18(6)	14(6)
C(14)	53(8)	20(4)	34(6)	11(4)	28(6)	7(5)
C(15)	40(9)	21(6)	39(7)	-3(6)	13(6)	3(6)
C(16)	67(10)	29(6)	29(5)	8(5)	11(6)	10(6)
C(17)	49(9)	73(10)	78(10)	41(8)	13(7)	-16(8)
C(18)	53(11)	49(8)	40(7)	11(7)	26(7)	11(8)
C(19)	58(10)	99(12)	52(8)	0(7)	36(7)	18(8)
C(110)	31(7)	77(10)	61(7)	8(7)	1(5)	-12(6)
C(111)	40(9)	56(8)	10(5)	-3(5)	6(5)	-2(7)
C(112)	66(12)	51(9)	50(9)	4(6)	32(8)	-4(7)
C(113)	74(14)	96(14)	68(9)	-59(10)	20(9)	-41(12)
C(114)	133(19)	49(8)	98(14)	-17(8)	71(13)	4(10)
C(115)	81(13)	53(9)	24(5)	-15(6)	20(6)	13(9)
C(116)	59(13)	47(9)	39(8)	-10(7)	25(8)	-2(9)
C(117)	40(9)	68(9)	34(6)	3(6)	11(5)	1(7)
C(118)	45(7)	91(11)	67(9)	30(7)	3(6)	9(7)
C(119)	65(11)	153(17)	66(9)	24(10)	-7(7)	-45(11)
C(120)	28(8)	99(15)	76(11)	-5(10)	-4(7)	14(9)
C(121)	66(10)	116(14)	72(9)	20(9)	4(8)	47(10)
C(122)	57(10)	122(13)	59(9)	4(8)	22(8)	-28(9)
Ru(2)	38(1)	24(1)	28(1)	1(1)	9(1)	1(1)
Cl(21)	45(3)	36(2)	54(2)	2(2)	3(2)	15(2)
Cl(22)	51(3)	36(2)	80(3)	-2(2)	13(3)	-9(2)
N(2)	35(7)	23(5)	50(8)	9(5)	-1(6)	-2(5)
C(21)	30(8)	46(8)	46(8)	-17(6)	19(6)	-4(6)
C(22)	65(12)	61(9)	4(5)	-6(5)	2(5)	15(8)
C(23)	42(6)	33(5)	17(4)	6(4)	17(4)	9(4)
C(24)	27(6)	35(6)	30(6)	7(4)	3(5)	3(5)
C(25)	44(10)	29(7)	28(6)	-9(5)	2(6)	10(7)
C(26)	48(8)	3(4)	49(7)	1(4)	22(6)	-8(4)
C(27)	41(9)	58(8)	60(8)	-14(6)	-7(6)	-22(7)
C(28)	34(10)	87(13)	55(9)	-25(9)	-7(7)	-4(9)
C(29)	55(11)	86(12)	110(13)	9(10)	15(9)	19(9)
C(210)	51(10)	73(10)	123(16)	-16(9)	34(10)	-24(8)
C(211)	47(12)	33(7)	51(8)	-1(7)	16(8)	14(8)
C(212)	32(7)	68(10)	20(5)	18(5)	-2(5)	16(6)
C(213)	72(13)	72(13)	113(14)	10(11)	50(11)	5(11)
C(214)	97(14)	89(12)	43(8)	47(8)	14(8)	29(11)
C(215)	64(12)	80(11)	32(6)	3(7)	18(7)	14(10)
C(216)	49(10)	53(9)	32(7)	-10(7)	10(7)	-4(9)
C(217)	47(11)	107(14)	30(6)	6(8)	1(6)	25(10)
C(218)	93(13)	88(12)	69(10)	-22(8)	20(8)	-22(9)
C(219)	44(8)	92(10)	64(8)	11(7)	15(6)	23(7)
C(220)	57(11)	66(10)	21(6)	-4(6)	16(6)	-4(8)
C(221)	86(12)	114(15)	98(13)	21(12)	18(10)	-22(11)
C(222)	52(9)	122(15)	92(12)	-38(10)	-8(8)	26(10)

Table 10. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for (η^6-cymene)$RuCl_2(NH_2Ar)$.

	x	y	z	U(eq)
H(12)	1573(60)	3172(193)	2698(40)	43
H(11)	2343(42)	2726(135)	2790(28)	43
H(12A)	1514(9)	4184(20)	1240(4)	53
H(13A)	2657(10)	3760(22)	1420(4)	50
H(15A)	2756(9)	7183(20)	2354(5)	39
H(16A)	1583(9)	7875(20)	2223(4)	49
H(17A)	591(10)	7664(30)	1412(6)	80
H(17B)	462(10)	5458(30)	1471(6)	80
H(17C)	514(10)	6866(30)	1840(6)	80
H(18A)	3711(9)	4911(24)	2229(4)	55
H(19A)	4352(11)	3541(31)	1761(5)	80
H(19B)	3643(11)	2521(31)	1741(5)	80
H(19C)	3762(11)	4036(31)	1412(5)	80
H(11A)	3860(9)	8069(29)	2085(5)	68
H(11B)	4493(9)	6833(29)	2014(5)	68
H(11C)	3962(9)	7494(29)	1646(5)	68
H(11D)	2973(11)	8268(30)	3494(5)	94
H(11E)	1912(15)	9733(28)	3612(7)	106
H(11F)	912(11)	8559(23)	3276(3)	62
H(11G)	3130(9)	4350(27)	2834(4)	56
H(11H)	2935(10)	2693(31)	3404(6)	82
H(11I)	3721(10)	2839(31)	3399(6)	82
H(11J)	3369(10)	4216(31)	3676(6)	82
H(11K)	4220(12)	5782(38)	3070(7)	115
H(11L)	3715(12)	7429(38)	2902(7)	115
H(11M)	3889(12)	7097(38)	3368(7)	115
H(12B)	729(9)	5152(33)	2500(6)	82
H(12C)	352(11)	8419(35)	2499(6)	102
H(12D)	-280(11)	7064(35)	2499(6)	102
H(12E)	52(11)	8061(35)	2900(6)	102
H(12F)	722(12)	2892(32)	3047(6)	94
H(12G)	298(12)	4353(32)	3266(6)	94
H(12H)	-34(12)	3355(32)	2865(6)	94
H(22)	2080(60)	8171(188)	4864(37)	44
H(21)	1465(47)	8062(156)	4703(33)	44
H(22A)	2127(10)	9327(24)	6261(3)	52
H(23A)	948(8)	8737(20)	6168(3)	35
H(25A)	827(9)	12111(21)	5130(4)	41
H(26A)	1999(9)	12567(17)	5277(5)	38
H(27A)	3087(8)	12525(25)	6041(5)	66
H(27B)	3143(8)	10271(25)	6025(5)	66
H(27C)	3135(8)	11491(25)	5631(5)	66
H(28A)	-108(9)	9739(32)	5264(5)	72
H(29A)	-870(11)	12178(35)	5469(6)	100
H(29B)	-269(11)	12962(35)	5782(6)	100
H(29C)	-238(11)	13141(35)	5320(6)	100
H(21A)	-103(12)	7660(29)	5818(7)	96
H(21B)	-258(12)	9426(29)	6082(7)	96
H(21C)	-802(12)	8739(29)	5724(7)	96
H(21D)	2631(13)	13817(32)	4256(6)	99
H(21E)	1576(13)	14654(30)	3887(5)	91
H(21F)	647(11)	12986(28)	3932(4)	69
H(21G)	477(11)	9455(34)	4641(5)	74

H(21H)	673(13)	7272(33)	4113(7)	99
H(21I)	-89(13)	7329(33)	4184(7)	99
H(21J)	136(13)	8441(33)	3819(7)	99
H(21K)	-109(10)	12304(29)	4508(6)	79
H(21L)	-334(10)	11557(29)	4068(6)	79
H(21M)	-559(10)	10445(29)	4433(6)	79
H(22B)	2916(9)	10139(25)	4984(4)	56
H(22C)	3937(13)	11411(37)	4955(7)	118
H(22D)	3651(13)	12578(37)	4566(7)	118
H(22E)	3423(13)	13108(37)	4980(7)	118
H(22F)	3721(13)	8925(36)	4641(8)	109
H(22G)	2994(13)	8210(36)	4454(8)	109
H(22H)	3351(13)	9854(36)	4242(8)	109

Table 11. Crystal data and structure refinement for $[(\eta^6\text{-cymene})Os(N\text{-}Ar)]_2$

Identification code	akb7
Empirical formula	C44 H62 N2 Os2
Formula weight	999.36
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/c$
Unit cell dimensions	a = 19.733(7) Å alpha = 90 deg. b = 10.254(2) Å beta = 99.38(3) deg. c = 19.378(4) Å gamma = 90 deg.
Volume	3869(2) Å^3
Z	4
Density (calculated)	1.716 Mg/m^3
Absorption coefficient	6.595 mm^-1
F(000)	1968
Crystal size	0.41 x 0.45 x 0.11 mm
Theta range for data collection	1.05 to 24.98 deg.
Index ranges	-23<=h<=23, -12<=k<=0, 0<=l<=23
Reflections collected	7012
Independent reflections	6786 [R(int) = 0.0837]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	6786 / 0 / 433
Goodness-of-fit on F^2	1.032
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0374, wR2 = 0.1006
R indices (all data)	R1 = 0.0524, wR2 = 0.1091
Largest diff. peak and hole	1.936 and -1.931 e.Å^-3

Table 12. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for $[(\eta^6\text{-cymene})Os(N\text{-}Ar)]_2$ U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
Os(1)	7931(1)	6253(1)	5125(1)	16(1)
Os(2)	6965(1)	4211(1)	4977(1)	16(1)
N(2)	6997(3)	5996(6)	5358(3)	16(1)
N(1)	7942(3)	4398(6)	5407(3)	15(1)
C(221)	6467(4)	6835(7)	5499(4)	18(2)
C(222)	6086(4)	7658(7)	4999(4)	19(2)
C(223)	5573(4)	8454(8)	5206(4)	28(2)
C(224)	5441(4)	8446(8)	5881(4)	28(2)
C(225)	5806(4)	7632(8)	6361(4)	25(2)
C(226)	6313(4)	6784(8)	6189(4)	21(2)
C(227)	6185(4)	7755(8)	4237(4)	22(2)
C(228)	5519(4)	7477(9)	3727(4)	30(2)
C(229)	6428(5)	9126(8)	4073(4)	29(2)
C(230)	6689(5)	5901(8)	6741(4)	26(2)
C(231)	6182(5)	5016(8)	7043(4)	32(2)
C(232)	7130(4)	6649(9)	7324(4)	30(2)
C(111)	8534(4)	3625(7)	5614(4)	20(2)
C(112)	8878(4)	2898(8)	5157(4)	23(2)
C(113)	9469(4)	2212(8)	5428(4)	30(2)
C(114)	9747(4)	2236(9)	6131(5)	31(2)
C(115)	9420(4)	2980(8)	6572(4)	28(2)
C(116)	8825(4)	3688(7)	6334(4)	22(2)
C(117)	8622(4)	2792(8)	4381(4)	23(2)
C(118)	9190(4)	3159(9)	3952(4)	31(2)
C(119)	8394(4)	1380(8)	4181(4)	29(2)
C(120)	8466(4)	4400(8)	6852(4)	27(2)
C(121)	8952(4)	5028(9)	7455(4)	31(2)
C(122)	7965(5)	3465(9)	7115(5)	33(2)
C(101)	8509(4)	6887(8)	4289(4)	23(2)
C(102)	8048(4)	7902(7)	4409(4)	21(2)
C(103)	8062(4)	8429(8)	5096(4)	25(2)
C(104)	8511(4)	7889(7)	5673(4)	18(2)
C(105)	8953(4)	6868(8)	5537(4)	20(2)
C(106)	8990(4)	6442(8)	4848(4)	21(2)
C(107)	8507(5)	6421(9)	3558(4)	31(2)
C(108)	8525(4)	8386(8)	6413(4)	25(2)
C(109)	9222(5)	8984(9)	6684(5)	38(2)
C(110)	7962(5)	9357(9)	6484(5)	35(2)
C(201)	6404(4)	2515(8)	5287(4)	23(2)
C(202)	6839(4)	2060(8)	4827(4)	23(2)
C(203)	6821(4)	2674(7)	4168(4)	21(2)
C(204)	6340(4)	3719(8)	3957(4)	20(2)
C(205)	5899(4)	4089(8)	4403(4)	22(2)
C(206)	5944(4)	3534(8)	5085(4)	24(2)
C(207)	6438(5)	1851(8)	5990(4)	29(2)
C(208)	6302(4)	4382(8)	3245(4)	27(2)
C(209)	6970(5)	4320(12)	2950(5)	48(3)
C(210)	5716(5)	3798(12)	2730(5)	47(3)

Table 13. Bond lengths [Å] and angles [deg] for [(η^6-cymene)Os(N-Ar)]$_2$

Os(1)-N(1)	1.978(6)
Os(1)-N(2)	1.986(6)
Os(1)-C(105)	2.139(7)
Os(1)-C(104)	2.203(7)
Os(1)-C(102)	2.223(7)
Os(1)-C(101)	2.225(7)
Os(1)-C(106)	2.249(7)
Os(1)-C(103)	2.248(8)
Os(1)-Os(2)	2.8142(7)
Os(2)-N(2)	1.970(6)
Os(2)-N(1)	1.980(6)
Os(2)-C(206)	2.174(8)
Os(2)-C(201)	2.198(8)
Os(2)-C(203)	2.209(7)
Os(2)-C(204)	2.212(7)
Os(2)-C(205)	2.218(8)
Os(2)-C(202)	2.234(8)
N(2)-C(221)	1.415(9)
N(1)-C(111)	1.414(10)
C(221)-C(222)	1.407(10)
C(221)-C(226)	1.419(10)
C(222)-C(223)	1.408(10)
C(222)-C(227)	1.523(10)
C(223)-C(224)	1.375(11)
C(224)-C(225)	1.365(11)
C(225)-C(226)	1.406(11)
C(226)-C(230)	1.502(11)
C(227)-C(229)	1.535(11)
C(227)-C(228)	1.536(11)
C(230)-C(232)	1.517(11)
C(230)-C(231)	1.535(11)
C(111)-C(112)	1.413(11)
C(111)-C(116)	1.422(11)
C(112)-C(113)	1.391(11)
C(112)-C(117)	1.510(11)
C(113)-C(114)	1.383(12)
C(114)-C(115)	1.380(12)
C(115)-C(116)	1.393(11)
C(116)-C(120)	1.508(11)
C(117)-C(118)	1.548(10)
C(117)-C(119)	1.546(11)
C(120)-C(122)	1.523(11)
C(120)-C(121)	1.528(11)
C(101)-C(106)	1.396(11)
C(101)-C(102)	1.427(11)
C(101)-C(107)	1.494(10)
C(102)-C(103)	1.432(10)
C(103)-C(104)	1.420(11)
C(104)-C(105)	1.415(10)
C(104)-C(108)	1.518(10)
C(105)-C(106)	1.417(10)
C(108)-C(110)	1.515(11)
C(108)-C(109)	1.518(12)
C(201)-C(206)	1.398(11)
C(201)-C(202)	1.414(11)
C(201)-C(207)	1.515(10)
C(202)-C(203)	1.418(11)
C(203)-C(204)	1.446(11)
C(204)-C(205)	1.376(11)

C(204)-C(208)	1.529(10)
C(205)-C(206)	1.427(11)
C(208)-C(209)	1.523(12)
C(208)-C(210)	1.521(12)

N(1)-Os(1)-N(2)	77.2(2)
N(1)-Os(1)-C(105)	102.3(3)
N(2)-Os(1)-C(105)	143.9(3)
N(1)-Os(1)-C(104)	128.2(3)
N(2)-Os(1)-C(104)	114.8(3)
C(105)-Os(1)-C(104)	38.0(3)
N(1)-Os(1)-C(102)	155.0(3)
N(2)-Os(1)-C(102)	115.9(3)
C(105)-Os(1)-C(102)	79.7(3)
C(104)-Os(1)-C(102)	67.9(3)
N(1)-Os(1)-C(101)	119.9(3)
N(2)-Os(1)-C(101)	144.0(3)
C(105)-Os(1)-C(101)	67.7(3)
C(104)-Os(1)-C(101)	80.8(3)
C(102)-Os(1)-C(101)	37.4(3)
N(1)-Os(1)-C(106)	100.4(3)
N(2)-Os(1)-C(106)	177.2(3)
C(105)-Os(1)-C(106)	37.6(3)
C(104)-Os(1)-C(106)	67.7(3)
C(102)-Os(1)-C(106)	65.9(3)
C(101)-Os(1)-C(106)	36.4(3)
N(1)-Os(1)-C(103)	164.9(3)
N(2)-Os(1)-C(103)	104.6(3)
C(105)-Os(1)-C(103)	67.1(3)
C(104)-Os(1)-C(103)	37.2(3)
C(102)-Os(1)-C(103)	37.4(3)
C(101)-Os(1)-C(103)	67.5(3)
C(106)-Os(1)-C(103)	78.1(3)
N(1)-Os(1)-Os(2)	44.7(2)
N(2)-Os(1)-Os(2)	44.4(2)
C(105)-Os(1)-Os(2)	147.0(2)
C(104)-Os(1)-Os(2)	154.9(2)
C(102)-Os(1)-Os(2)	129.7(2)
C(101)-Os(1)-Os(2)	124.2(2)
C(106)-Os(1)-Os(2)	132.8(2)
C(103)-Os(1)-Os(2)	144.5(2)
N(2)-Os(2)-N(1)	77.5(2)
N(2)-Os(2)-C(206)	103.5(3)
N(1)-Os(2)-C(206)	147.7(3)
N(2)-Os(2)-C(201)	128.3(3)
N(1)-Os(2)-C(201)	117.5(3)
C(206)-Os(2)-C(201)	37.3(3)
N(2)-Os(2)-C(203)	157.1(3)
N(1)-Os(2)-C(203)	111.8(3)
C(206)-Os(2)-C(203)	80.0(3)
C(201)-Os(2)-C(203)	67.4(3)
N(2)-Os(2)-C(204)	121.7(3)
N(1)-Os(2)-C(204)	139.6(3)
C(206)-Os(2)-C(204)	67.8(3)
C(201)-Os(2)-C(204)	80.2(3)
C(203)-Os(2)-C(204)	38.2(3)
N(2)-Os(2)-C(205)	102.1(3)
N(1)-Os(2)-C(205)	174.4(3)
C(206)-Os(2)-C(205)	37.9(3)
C(201)-Os(2)-C(205)	67.2(3)
C(203)-Os(2)-C(205)	66.5(3)
C(204)-Os(2)-C(205)	36.2(3)
N(2)-Os(2)-C(202)	164.2(3)

N(1)-Os(2)-C(202)	103.3(3)
C(206)-Os(2)-C(202)	67.2(3)
C(201)-Os(2)-C(202)	37.2(3)
C(203)-Os(2)-C(202)	37.2(3)
C(204)-Os(2)-C(202)	67.9(3)
C(205)-Os(2)-C(202)	78.6(3)
N(2)-Os(2)-Os(1)	44.9(2)
N(1)-Os(2)-Os(1)	44.7(2)
C(206)-Os(2)-Os(1)	148.3(2)
C(201)-Os(2)-Os(1)	157.6(2)
C(203)-Os(2)-Os(1)	127.6(2)
C(204)-Os(2)-Os(1)	122.1(2)
C(205)-Os(2)-Os(1)	131.7(2)
C(202)-Os(2)-Os(1)	143.8(2)
C(221)-N(2)-Os(2)	131.1(5)
C(221)-N(2)-Os(1)	134.9(5)
Os(2)-N(2)-Os(1)	90.7(2)
C(111)-N(1)-Os(2)	140.1(5)
C(111)-N(1)-Os(1)	126.1(5)
Os(2)-N(1)-Os(1)	90.6(2)
C(222)-C(221)-N(2)	124.1(6)
C(222)-C(221)-C(226)	119.9(7)
N(2)-C(221)-C(226)	116.0(7)
C(221)-C(222)-C(223)	118.6(7)
C(221)-C(222)-C(227)	124.6(6)
C(223)-C(222)-C(227)	116.8(7)
C(224)-C(223)-C(222)	121.6(8)
C(225)-C(224)-C(223)	119.4(7)
C(224)-C(225)-C(226)	122.2(7)
C(225)-C(226)-C(221)	118.1(7)
C(225)-C(226)-C(230)	119.4(7)
C(221)-C(226)-C(230)	122.4(7)
C(222)-C(227)-C(229)	110.8(6)
C(222)-C(227)-C(228)	112.4(6)
C(229)-C(227)-C(228)	107.4(7)
C(226)-C(230)-C(232)	112.5(7)
C(226)-C(230)-C(231)	110.6(7)
C(232)-C(230)-C(231)	110.2(7)
C(112)-C(111)-N(1)	125.2(7)
C(112)-C(111)-C(116)	118.7(7)
N(1)-C(111)-C(116)	115.8(7)
C(113)-C(112)-C(111)	119.3(7)
C(113)-C(112)-C(117)	117.6(7)
C(111)-C(112)-C(117)	123.1(7)
C(114)-C(113)-C(112)	122.4(8)
C(115)-C(114)-C(113)	118.0(8)
C(114)-C(115)-C(116)	122.5(8)
C(115)-C(116)-C(111)	119.0(7)
C(115)-C(116)-C(120)	119.7(7)
C(111)-C(116)-C(120)	121.1(7)
C(112)-C(117)-C(118)	111.4(7)
C(112)-C(117)-C(119)	110.7(7)
C(118)-C(117)-C(119)	107.4(6)
C(116)-C(120)-C(122)	108.6(7)
C(116)-C(120)-C(121)	114.1(7)
C(122)-C(120)-C(121)	111.7(7)
C(106)-C(101)-C(102)	118.9(7)
C(106)-C(101)-C(107)	121.9(8)
C(102)-C(101)-C(107)	118.9(7)
C(106)-C(101)-Os(1)	72.7(4)
C(102)-C(101)-Os(1)	71.2(4)
C(107)-C(101)-Os(1)	132.4(6)
C(101)-C(102)-C(103)	120.7(7)

C(101)-C(102)-Os(1)	71.4(4)
C(103)-C(102)-Os(1)	72.3(4)
C(104)-C(103)-C(102)	120.0(7)
C(104)-C(103)-Os(1)	69.7(4)
C(102)-C(103)-Os(1)	70.4(4)
C(105)-C(104)-C(103)	117.8(7)
C(105)-C(104)-C(108)	120.5(7)
C(103)-C(104)-C(108)	121.8(7)
C(105)-C(104)-Os(1)	68.6(4)
C(103)-C(104)-Os(1)	73.1(4)
C(108)-C(104)-Os(1)	129.7(5)
C(106)-C(105)-C(104)	122.1(7)
C(106)-C(105)-Os(1)	75.4(4)
C(104)-C(105)-Os(1)	73.4(4)
C(101)-C(106)-C(105)	119.8(7)
C(101)-C(106)-Os(1)	70.9(4)
C(105)-C(106)-Os(1)	67.0(4)
C(110)-C(108)-C(104)	113.9(7)
C(110)-C(108)-C(109)	109.9(7)
C(104)-C(108)-C(109)	109.8(6)
C(206)-C(201)-C(202)	120.3(7)
C(206)-C(201)-C(207)	121.3(7)
C(202)-C(201)-C(207)	118.4(7)
C(206)-C(201)-Os(2)	70.4(4)
C(202)-C(201)-Os(2)	72.8(4)
C(207)-C(201)-Os(2)	130.6(6)
C(201)-C(202)-C(203)	119.4(7)
C(201)-C(202)-Os(2)	70.0(4)
C(203)-C(202)-Os(2)	70.4(4)
C(202)-C(203)-C(204)	120.2(7)
C(202)-C(203)-Os(2)	72.3(4)
C(204)-C(203)-Os(2)	71.0(4)
C(205)-C(204)-C(203)	118.6(7)
C(205)-C(204)-C(208)	120.1(7)
C(203)-C(204)-C(208)	121.3(7)
C(205)-C(204)-Os(2)	72.1(4)
C(203)-C(204)-Os(2)	70.8(4)
C(208)-C(204)-Os(2)	130.0(5)
C(204)-C(205)-C(206)	121.5(8)
C(204)-C(205)-Os(2)	71.7(4)
C(206)-C(205)-Os(2)	69.4(4)
C(201)-C(206)-C(205)	119.8(7)
C(201)-C(206)-Os(2)	72.3(4)
C(205)-C(206)-Os(2)	72.7(5)
C(209)-C(208)-C(210)	110.4(7)
C(209)-C(208)-C(204)	113.7(7)
C(210)-C(208)-C(204)	109.7(7)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 14. Anisotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for $[(\eta^6\text{-cymene})Os(N\text{-}Ar)]_2$ The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Os(1)	16(1)	15(1)	15(1)	0(1)	3(1)	-1(1)
Os(2)	16(1)	16(1)	16(1)	-2(1)	2(1)	-1(1)
N(2)	9(3)	21(3)	18(3)	-6(2)	1(2)	-9(2)
N(1)	7(3)	17(3)	21(3)	3(2)	6(2)	3(2)
C(221)	17(4)	15(4)	22(4)	-5(3)	3(3)	-1(3)
C(222)	13(4)	21(4)	21(4)	-5(3)	3(3)	0(3)
C(223)	24(4)	25(4)	35(4)	3(4)	5(4)	9(4)
C(224)	28(5)	24(4)	36(5)	-1(4)	17(4)	9(4)
C(225)	27(4)	28(4)	21(4)	-2(3)	9(3)	4(4)
C(226)	20(4)	23(4)	22(4)	0(3)	6(3)	2(3)
C(227)	21(4)	23(4)	21(4)	1(3)	4(3)	2(3)
C(228)	30(5)	32(5)	27(4)	1(4)	-1(4)	1(4)
C(229)	36(5)	25(4)	23(4)	-3(3)	1(4)	1(4)
C(230)	38(5)	18(4)	22(4)	-4(3)	8(4)	7(4)
C(231)	42(5)	29(5)	25(4)	2(3)	7(4)	0(4)
C(232)	26(5)	41(5)	22(4)	0(4)	2(3)	-3(4)
C(111)	19(4)	16(4)	25(4)	3(3)	5(3)	-6(3)
C(112)	22(4)	20(4)	28(4)	3(3)	4(3)	4(3)
C(113)	26(5)	28(4)	37(5)	4(4)	6(4)	7(4)
C(114)	20(4)	29(5)	43(5)	6(4)	1(4)	8(4)
C(115)	24(4)	32(5)	26(4)	2(3)	-1(3)	2(4)
C(116)	22(4)	19(4)	25(4)	1(3)	3(3)	-4(3)
C(117)	24(4)	23(4)	24(4)	1(3)	11(3)	3(3)
C(118)	28(5)	34(5)	31(4)	-1(4)	8(4)	-1(4)
C(119)	26(5)	30(5)	32(4)	-7(4)	11(4)	3(4)
C(120)	28(5)	25(4)	25(4)	5(3)	-1(3)	3(4)
C(121)	33(5)	34(5)	24(4)	-4(3)	-1(4)	2(4)
C(122)	36(5)	30(5)	34(5)	8(4)	10(4)	-1(4)
C(101)	16(4)	35(5)	19(4)	1(3)	4(3)	-12(3)
C(102)	33(5)	7(4)	22(4)	5(3)	1(3)	-2(3)
C(103)	33(5)	15(4)	28(4)	4(3)	12(4)	-1(3)
C(104)	10(4)	18(4)	26(4)	-3(3)	0(3)	-11(3)
C(105)	10(4)	25(4)	24(4)	-1(3)	5(3)	1(3)
C(106)	4(3)	25(4)	33(4)	-7(3)	-2(3)	-7(3)
C(107)	32(5)	37(5)	25(4)	-5(4)	9(4)	-13(4)
C(108)	22(4)	28(4)	27(4)	-1(3)	5(3)	-2(4)
C(109)	42(6)	40(5)	31(5)	-15(4)	6(4)	-9(4)
C(110)	38(5)	33(5)	35(5)	-5(4)	8(4)	11(4)
C(201)	24(4)	22(4)	22(4)	2(3)	3(3)	-7(3)
C(202)	23(4)	15(4)	29(4)	-3(3)	0(3)	1(3)
C(203)	12(4)	22(4)	28(4)	-8(3)	-1(3)	-5(3)
C(204)	11(4)	29(4)	20(4)	-5(3)	-4(3)	-1(3)
C(205)	20(4)	22(4)	24(4)	-8(3)	-1(3)	-4(3)
C(206)	13(4)	29(5)	31(4)	-8(3)	1(3)	-9(3)
C(207)	43(5)	16(4)	30(4)	6(3)	8(4)	-7(4)
C(208)	33(5)	26(4)	20(4)	-2(3)	3(3)	-2(4)
C(209)	33(6)	80(8)	29(5)	16(5)	1(4)	-11(5)
C(210)	38(6)	79(8)	22(4)	-4(5)	-1(4)	-11(5)

Table 15. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for $[(\eta^6\text{-cymene})Os(N\text{-}Ar)]_2$

	x	y	z	U(eq)
H(22E)	5303(4)	8993(8)	4862(4)	34
H(22F)	5100(4)	9018(8)	6013(4)	34
H(22A)	5709(4)	7618(8)	6829(4)	30
H(22J)	6527(4)	7135(8)	4157(4)	26
H(22G)	5356(4)	6621(9)	3815(4)	36
H(22H)	5178(4)	8114(9)	3789(4)	36
H(22I)	5610(4)	7521(9)	3258(4)	36
H(22B)	6488(5)	9172(8)	3594(4)	34
H(22C)	6092(5)	9756(8)	4157(4)	34
H(22D)	6856(5)	9309(8)	4368(4)	34
H(23D)	6986(5)	5362(8)	6519(4)	31
H(23E)	5904(5)	4552(8)	6671(4)	38
H(23F)	6442(5)	4403(8)	7354(4)	38
H(23G)	5894(5)	5520(8)	7294(4)	38
H(23A)	7432(4)	7215(9)	7124(4)	36
H(23B)	6847(4)	7162(9)	7576(4)	36
H(23C)	7395(4)	6045(9)	7636(4)	36
H(11M)	9689(4)	1682(8)	5123(4)	36
H(11E)	10161(4)	1768(9)	6301(5)	37
H(11I)	9609(4)	3012(8)	7058(4)	33
H(11A)	8241(4)	3372(8)	4256(4)	27
H(11J)	9022(4)	3101(9)	3461(4)	37
H(11K)	9338(4)	4036(9)	4067(4)	37
H(11L)	9570(4)	2572(9)	4072(4)	37
H(11B)	8234(4)	1314(8)	3689(4)	35
H(11C)	8774(4)	798(8)	4310(4)	35
H(11D)	8031(4)	1149(8)	4430(4)	35
H(12A)	8200(4)	5084(8)	6601(4)	32
H(12E)	9263(4)	5600(9)	7272(4)	37
H(12F)	8686(4)	5521(9)	7735(4)	37
H(12G)	9207(4)	4366(9)	7736(4)	37
H(12B)	7671(5)	3073(9)	6729(5)	40
H(12C)	8215(5)	2794(9)	7394(5)	40
H(12D)	7694(5)	3949(9)	7393(5)	40
H(10K)	7668(4)	8130(7)	4056(4)	25
H(10A)	7693(4)	8980(8)	5183(4)	30
H(10C)	9205(4)	6408(8)	5926(4)	24
H(10B)	9242(4)	5657(8)	4796(4)	26
H(10D)	8825(5)	6941(9)	3352(4)	37
H(10E)	8644(5)	5521(9)	3563(4)	37
H(10F)	8056(5)	6511(9)	3290(4)	37
H(10G)	8463(4)	7652(8)	6703(4)	31
H(10H)	9238(5)	9301(9)	7150(5)	45
H(10I)	9567(5)	8325(9)	6679(5)	45
H(10J)	9305(5)	9692(9)	6385(5)	45
H(11F)	7520(5)	8984(9)	6319(5)	42
H(11G)	7991(5)	9604(9)	6963(5)	42
H(11H)	8026(5)	10114(9)	6211(5)	42
H(20B)	7219(4)	1499(8)	4996(4)	27
H(20G)	7180(4)	2488(7)	3905(4)	25
H(20A)	5641(4)	4880(8)	4304(4)	27
H(20C)	5708(4)	3941(8)	5422(4)	29
H(20D)	6120(5)	1135(8)	5941(4)	35

H(20E)	6893(5)	1529(8)	6145(4)	35
H(20F)	6318(5)	2460(8)	6325(4)	35
H(20H)	6203(4)	5290(8)	3304(4)	32
H(20I)	6911(5)	4758(12)	2508(5)	57
H(20J)	7339(5)	4720(12)	3261(5)	57
H(20K)	7075(5)	3417(12)	2887(5)	57
H(21A)	5300(5)	3859(12)	2921(5)	57
H(21B)	5664(5)	4262(12)	2296(5)	57
H(21C)	5815(5)	2897(12)	2653(5)	57