

ORGANOMETALLICS

Organometallics, 1998, 17(7), 1420-1425, DOI:[10.1021/om971030m](https://doi.org/10.1021/om971030m)

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 © 1998 American Chemical Society

Table S-2. Crystallographic Data for 2a, 2b, and 6.

Crystal Parameters	2a	2b	6
chemical formula	C ₁₉ H ₂₉ ClO ₂ PRhS	C ₁₄ H ₂₇ ClO ₂ PRhS	C ₁₇ H ₃₀ F ₃ IrNO ₅ PS ₂
formula weight	490.81	428.75	672.71
cryst syst	orthorhombic	orthorhombic	tetragonal
space group (No.)	<i>P2₁2₁2₁</i>	<i>Pna2₁</i>	<i>I4₁/a</i>
Z	4	4	16
a, Å	9.9742 (6)	24.511 (4)	16.9846 (4)
b, Å	14.3780 (9)	8.5740 (13)	16.9846 (4)
c, Å	15.1600 (9)	8.5845 (13)	33.4343 (11)
vol., Å ³	2174.1 (2)	1804.1 (5)	9645.0 (5)
ρ _{calc} , g cm ⁻³	1.50	1.58	1.853
cryst dimens, mm	0.29 × 0.35 × 0.35	0.36 × 0.38 × 0.40	0.20 × 0.30 × 0.40
temp, °C	-80	-80	-80
Measurement of Intensity Data			
diffractometer	Siemens SMART	Siemens SMART	Siemens SMART
radiation	Mo, 0.71073	Mo, 0.71073	Mo, 0.71073
2θ range, deg	4.0-56.4	3.4-56.4	2.7-56.6
data collected	-12 ≤ h ≤ 13,	-32 ≤ h ≤ 32,	-21 ≤ h ≤ 22
	-12 ≤ k ≤ 18,	-11 ≤ k ≤ 11,	-16 ≤ k ≤ 22
	-20 ≤ l ≤ 18	-6 ≤ l ≤ 11	-44 ≤ l ≤ 41
no. of data collected	11506	10802	28131
no. of unique data	4960	3246	5816
agreement between equiv data	0.024	0.037	0.047
no. of observed data	4721 (I > 2σ(I))	2969 (I > 2σ(I))	5137 (I > 2σ(I))
no. of params varied	227	181	272
μ, cm ⁻¹	1.088	1.298	5.827
absorption correction	empirical (SADABS)	empirical (SADABS)	empirical (SADABS)
range of trans. Factors	0.87-1.00	0.76 - 0.93	0.63-0.93
R ₁ (F _o), wR ₂ (F _o ²), (I > 2σ(I))	0.0250, 0.0597	0.0396, 0.0663	0.0816, 0.1869
R ₁ (F _o), wR ₂ (F _o ²), all data	0.0274, 0.0606	0.0455, 0.0678	0.0955, 0.1920
goodness of fit	1.15	1.21	1.48

Tables S-2. Positional parameters ($\times 10^4$) and U_{eq} ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 2a.

	x	y	z	U(eq)
Rh(1)	7826 (1)	9680 (1)	1465 (1)	21 (1)
P(1)	6716 (1)	8435 (1)	824 (1)	26 (1)
S(1)	9720 (1)	9255 (1)	666 (1)	27 (1)
O(1)	9470 (2)	8909 (2)	-233 (1)	44 (1)
O(2)	10547 (2)	8616 (2)	1197 (2)	42 (1)
Cl(1)	6855 (1)	10639 (1)	326 (1)	30 (1)
C(1)	7098 (3)	9410 (2)	2843 (2)	36 (1)
C(2)	8535 (3)	9393 (2)	2801 (2)	34 (1)
C(3)	8987 (3)	10313 (2)	2582 (2)	35 (1)
C(4)	7859 (3)	10867 (2)	2424 (2)	36 (1)
C(5)	6661 (3)	10311 (3)	2568 (2)	38 (1)
C(6)	6266 (4)	8648 (3)	3234 (2)	63 (1)
C(7)	9403 (4)	8611 (3)	3113 (2)	53 (1)
C(8)	10439 (3)	10608 (3)	2618 (2)	53 (1)
C(9)	7865 (5)	11878 (2)	2195 (2)	60 (1)
C(10)	5242 (4)	10667 (3)	2535 (3)	63 (1)
C(11)	6515 (4)	8458 (2)	-367 (2)	45 (1)
C(12)	4976 (3)	8319 (2)	1172 (2)	44 (1)
C(13)	7440 (3)	7306 (2)	1053 (2)	40 (1)
C(14)	10817 (2)	10244 (2)	481 (2)	28 (1)
C(15)	12183 (3)	10075 (2)	459 (2)	49 (1)
C(16)	13059 (3)	10803 (3)	254 (3)	63 (1)
C(17)	12565 (3)	11674 (3)	78 (2)	49 (1)
C(18)	11205 (3)	11839 (2)	97 (2)	40 (1)
C(19)	10319 (3)	11124 (2)	307 (2)	33 (1)

Tables S-3. Intramolecular Distances (Å) and Angles (°) for 2a.

Rh(1)-C(2)	2.176(3)
Rh(1)-C(5)	2.220(3)
Rh(1)-C(4)	2.231(2)
Rh(1)-C(3)	2.236(3)
Rh(1)-C(1)	2.238(2)
Rh(1)-P(1)	2.3077(6)
Rh(1)-S(1)	2.3161(6)
Rh(1)-Cl(1)	2.4019(6)
P(1)-C(13)	1.801(3)
P(1)-C(11)	1.810(3)
P(1)-C(12)	1.814(3)
S(1)-O(2)	1.468(2)
S(1)-O(1)	1.467(2)
S(1)-C(14)	1.808(3)
C(1)-C(5)	1.422(5)
C(1)-C(2)	1.428(4)
C(1)-C(6)	1.490(4)
C(2)-C(3)	1.430(4)
C(2)-C(7)	1.490(4)
C(3)-C(4)	1.393(4)
C(3)-C(8)	1.503(4)
C(4)-C(5)	1.447(4)
C(4)-C(9)	1.488(4)
C(5)-C(10)	1.500(4)
C(14)-C(15)	1.378(4)
C(14)-C(19)	1.378(4)
C(15)-C(16)	1.392(5)
C(16)-C(17)	1.366(5)
C(17)-C(18)	1.372(4)
C(18)-C(19)	1.386(4)
C(2)-Rh(1)-C(5)	63.22(11)
C(2)-Rh(1)-C(4)	62.42(10)
C(5)-Rh(1)-C(4)	37.94(12)
C(2)-Rh(1)-C(3)	37.78(11)
C(5)-Rh(1)-C(3)	62.46(10)
C(4)-Rh(1)-C(3)	36.33(12)
C(2)-Rh(1)-C(1)	37.73(11)
C(5)-Rh(1)-C(1)	37.20(12)
C(4)-Rh(1)-C(1)	62.10(10)
C(3)-Rh(1)-C(1)	62.23(10)
C(2)-Rh(1)-P(1)	113.42(8)
C(5)-Rh(1)-P(1)	112.30(9)
C(4)-Rh(1)-P(1)	150.03(9)
C(3)-Rh(1)-P(1)	151.11(9)
C(1)-Rh(1)-P(1)	95.89(8)
C(2)-Rh(1)-S(1)	99.79(8)
C(5)-Rh(1)-S(1)	157.02(8)
C(4)-Rh(1)-S(1)	121.70(9)
C(3)-Rh(1)-S(1)	94.58(7)
C(1)-Rh(1)-S(1)	134.54(9)
P(1)-Rh(1)-S(1)	88.14(2)
C(2)-Rh(1)-Cl(1)	154.36(8)
C(5)-Rh(1)-Cl(1)	95.50(8)
C(4)-Rh(1)-Cl(1)	92.07(8)
C(3)-Rh(1)-Cl(1)	121.08(9)
C(1)-Rh(1)-Cl(1)	129.42(9)
P(1)-Rh(1)-Cl(1)	87.07(2)

S(1)-Rh(1)-Cl(1)	95.95(2)
C(13)-P(1)-C(11)	104.6(2)
C(13)-P(1)-C(12)	104.1(2)
C(11)-P(1)-C(12)	100.7(2)
C(13)-P(1)-Rh(1)	114.89(10)
C(11)-P(1)-Rh(1)	117.04(10)
C(12)-P(1)-Rh(1)	113.82(11)
O(2)-S(1)-O(1)	112.97(14)
O(2)-S(1)-C(14)	103.63(13)
O(1)-S(1)-C(14)	102.91(12)
O(2)-S(1)-Rh(1)	109.49(9)
O(1)-S(1)-Rh(1)	115.64(9)
C(14)-S(1)-Rh(1)	111.39(9)
C(5)-C(1)-C(2)	107.9(3)
C(5)-C(1)-C(6)	127.6(3)
C(2)-C(1)-C(6)	124.0(3)
C(5)-C(1)-Rh(1)	70.73(14)
C(2)-C(1)-Rh(1)	68.8(2)
C(6)-C(1)-Rh(1)	132.3(2)
C(1)-C(2)-C(3)	108.0(3)
C(1)-C(2)-C(7)	125.2(3)
C(3)-C(2)-C(7)	125.6(3)
C(1)-C(2)-Rh(1)	73.5(2)
C(3)-C(2)-Rh(1)	73.4(2)
C(7)-C(2)-Rh(1)	128.5(2)
C(4)-C(3)-C(2)	108.0(3)
C(4)-C(3)-C(8)	128.2(3)
C(2)-C(3)-C(8)	123.5(3)
C(4)-C(3)-Rh(1)	71.64(14)
C(2)-C(3)-Rh(1)	68.8(2)
C(8)-C(3)-Rh(1)	129.5(2)
C(3)-C(4)-C(5)	108.9(2)
C(3)-C(4)-C(9)	126.1(3)
C(5)-C(4)-C(9)	124.9(3)
C(3)-C(4)-Rh(1)	72.0(2)
C(5)-C(4)-Rh(1)	70.60(14)
C(9)-C(4)-Rh(1)	126.1(2)
C(1)-C(5)-C(4)	106.9(2)
C(1)-C(5)-C(10)	127.2(3)
C(4)-C(5)-C(10)	125.5(3)
C(1)-C(5)-Rh(1)	72.1(2)
C(4)-C(5)-Rh(1)	71.46(14)
C(10)-C(5)-Rh(1)	127.1(2)
C(15)-C(14)-C(19)	120.6(3)
C(15)-C(14)-S(1)	117.4(2)
C(19)-C(14)-S(1)	121.9(2)
C(14)-C(15)-C(16)	119.3(3)
C(17)-C(16)-C(15)	120.1(3)
C(16)-C(17)-C(18)	120.5(3)
C(17)-C(18)-C(19)	120.2(3)
C(14)-C(19)-C(18)	119.3(3)

Tables S-4. U(aniso) values ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for **2a**.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Rh(1)	25(1)	20(1)	19(1)	-2(1)	0(1)	0(1)
P(1)	30(1)	22(1)	26(1)	0(1)	-4(1)	-4(1)
S(1)	29(1)	23(1)	29(1)	-5(1)	4(1)	2(1)
O(1)	47(1)	50(1)	34(1)	-19(1)	9(1)	-8(1)
O(2)	42(1)	32(1)	53(1)	5(1)	6(1)	15(1)
Cl(1)	28(1)	29(1)	32(1)	6(1)	-3(1)	2(1)
C(1)	46(2)	46(2)	16(1)	-3(1)	5(1)	-10(1)
C(2)	47(2)	39(2)	16(1)	-3(1)	-4(1)	4(1)
C(3)	41(2)	43(2)	20(1)	-9(1)	-3(1)	-7(1)
C(4)	53(2)	30(1)	23(1)	-12(1)	2(1)	-1(1)
C(5)	35(1)	56(2)	23(1)	-15(1)	1(1)	12(2)
C(6)	77(3)	80(3)	31(2)	9(2)	6(2)	-34(2)
C(7)	69(2)	58(2)	33(2)	5(2)	-6(2)	21(2)
C(8)	44(2)	79(3)	37(2)	-15(2)	-4(1)	-20(2)
C(9)	96(3)	31(2)	52(2)	-13(1)	-1(2)	4(2)
C(10)	46(2)	89(3)	53(2)	-25(2)	2(2)	23(2)
C(11)	61(2)	44(2)	29(1)	-4(1)	-12(1)	-20(2)
C(12)	29(1)	52(2)	51(2)	-8(1)	-4(1)	-8(1)
C(13)	45(2)	25(1)	50(2)	-1(1)	-4(1)	0(1)
C(14)	25(1)	32(1)	26(1)	-1(1)	3(1)	-3(1)
C(15)	28(1)	46(2)	74(2)	3(2)	2(2)	1(1)
C(16)	25(2)	74(3)	89(3)	6(2)	4(2)	-6(2)
C(17)	39(2)	51(2)	56(2)	-4(2)	6(1)	-22(1)
C(18)	40(2)	35(2)	45(2)	4(1)	2(1)	-8(1)
C(19)	27(1)	32(1)	39(2)	-1(1)	2(1)	-1(1)

Tables S-5. Positional parameters ($\times 10^4$) and U_{eq} ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for hydrogen atoms for **2a**.

	x	y	z	$U(eq)$
H(6A)	6469(23)	8058(5)	2933(14)	94
H(6B)	5310(4)	8797(11)	3160(18)	94
H(6C)	6473(23)	8588(15)	3866(5)	94
H(7A)	8933(11)	8016(3)	3025(16)	80
H(7B)	9601(23)	8694(10)	3744(5)	80
H(7C)	10246(12)	8608(12)	2776(12)	80
H(8A)	11004(4)	10114(8)	2366(16)	80
H(8B)	10700(8)	10719(18)	3235(3)	80
H(8C)	10558(6)	11185(11)	2276(15)	80
H(9A)	7099(18)	12018(5)	1808(16)	89
H(9B)	8705(14)	12033(5)	1888(17)	89
H(9C)	7795(30)	12250(2)	2738(3)	89
H(10A)	5123(9)	11056(18)	2006(11)	94
H(10B)	5059(11)	11041(18)	3065(11)	94
H(10C)	4617(4)	10138(3)	2512(21)	94
H(11A)	5909(19)	8970(11)	-531(2)	67
H(11B)	6134(22)	7863(7)	-567(3)	67
H(11C)	7395(5)	8555(16)	-647(2)	67
H(12A)	4488(7)	8897(7)	1036(15)	66
H(12B)	4943(3)	8203(17)	1812(4)	66
H(12C)	4557(8)	7795(11)	858(12)	66
H(13A)	7489(20)	7212(7)	1695(2)	60
H(13B)	8348(9)	7275(6)	800(13)	60
H(13C)	6878(13)	6818(2)	788(13)	60
H(14A)	12523(3)	9468(2)	582(2)	59
H(16A)	14002(3)	10694(3)	237(3)	75
H(17A)	13167(3)	12169(3)	-58(2)	59
H(18A)	10869(3)	12445(2)	-35(2)	48
H(19A)	9378(3)	11240(2)	330(2)	39

Tables S-6. Positional parameters ($\times 10^4$) and U_{eq} ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 2b.

	x	y	z	U(eq)
Rh(1)	-3807(1)	-3080(1)	-4052(1)	24(1)
Cl(1)	-4136(1)	-3518(2)	-1449(2)	42(1)
P(1)	-2996(1)	-4116(2)	-3195(2)	31(1)
S(1)	-3458(1)	-607(2)	-3544(2)	33(1)
O(1)	-2904(2)	-561(5)	-2918(6)	56(1)
O(2)	-3536(2)	416(5)	-4858(5)	53(1)
C(1)	-4334(2)	-4903(6)	-5110(7)	30(1)
C(2)	-4650(2)	-3453(6)	-5023(7)	34(1)
C(3)	-4391(2)	-2326(6)	-5928(7)	34(1)
C(4)	-3899(2)	-2990(7)	-6550(7)	38(1)
C(5)	-3893(2)	-4624(7)	-6143(6)	33(1)
C(6)	-4502(2)	-6390(6)	-4396(8)	44(2)
C(7)	-5176(2)	-3308(6)	-4124(12)	48(1)
C(8)	-4612(3)	-748(7)	-6297(9)	57(2)
C(9)	-3531(3)	-2212(8)	-7687(8)	56(2)
C(10)	-3523(2)	-5827(8)	-6851(8)	51(2)
C(11)	-2767(2)	-3609(8)	-1262(7)	48(2)
C(12)	-2409(2)	-3737(7)	-4418(7)	40(2)
C(13)	-3039(3)	-6217(6)	-3026(9)	54(2)
C(14)	-3873(3)	224(8)	-2019(9)	63(2)

Tables S-7. Intramolecular Distances (Å) and Angles (°) for 2b.

Rh(1)-C(4)	2.158(6)
Rh(1)-C(1)	2.222(5)
Rh(1)-C(5)	2.240(5)
Rh(1)-C(2)	2.251(5)
Rh(1)-C(3)	2.249(5)
Rh(1)-P(1)	2.2989(14)
Rh(1)-S(1)	2.3266(13)
Rh(1)-Cl(1)	2.405(2)
P(1)-C(11)	1.805(6)
P(1)-C(12)	1.810(5)
P(1)-C(13)	1.811(6)
S(1)-O(2)	1.442(5)
S(1)-O(1)	1.463(4)
S(1)-C(14)	1.805(7)
C(1)-C(5)	1.420(7)
C(1)-C(2)	1.466(7)
C(1)-C(6)	1.473(7)
C(2)-C(3)	1.394(8)
C(2)-C(7)	1.506(8)
C(3)-C(4)	1.435(8)
C(3)-C(8)	1.492(8)
C(4)-C(5)	1.444(8)
C(4)-C(9)	1.488(8)
C(5)-C(10)	1.501(7)
C(4)-Rh(1)-C(1)	63.8(2)
C(4)-Rh(1)-C(5)	38.3(2)
C(1)-Rh(1)-C(5)	37.1(2)
C(4)-Rh(1)-C(2)	62.7(2)
C(1)-Rh(1)-C(2)	38.3(2)
C(5)-Rh(1)-C(2)	62.2(2)
C(4)-Rh(1)-C(3)	37.9(2)
C(1)-Rh(1)-C(3)	62.6(2)
C(5)-Rh(1)-C(3)	62.4(2)
C(2)-Rh(1)-C(3)	36.1(2)
C(4)-Rh(1)-P(1)	115.0(2)
C(1)-Rh(1)-P(1)	111.22(14)
C(5)-Rh(1)-P(1)	96.24(14)
C(2)-Rh(1)-P(1)	149.04(14)
C(3)-Rh(1)-P(1)	152.9(2)
C(4)-Rh(1)-S(1)	101.1(2)
C(1)-Rh(1)-S(1)	158.60(14)
C(5)-Rh(1)-S(1)	136.3(2)
C(2)-Rh(1)-S(1)	122.43(14)
C(3)-Rh(1)-S(1)	96.10(13)
P(1)-Rh(1)-S(1)	88.53(5)
C(4)-Rh(1)-Cl(1)	153.4(2)
C(1)-Rh(1)-Cl(1)	94.3(2)
C(5)-Rh(1)-Cl(1)	128.4(2)
C(2)-Rh(1)-Cl(1)	90.8(2)
C(3)-Rh(1)-Cl(1)	119.8(2)
P(1)-Rh(1)-Cl(1)	86.09(5)
S(1)-Rh(1)-Cl(1)	95.22(5)
C(11)-P(1)-C(12)	104.1(3)
C(11)-P(1)-C(13)	100.6(3)
C(12)-P(1)-C(13)	105.8(3)
C(11)-P(1)-Rh(1)	118.0(2)
C(12)-P(1)-Rh(1)	115.6(2)

S-10

C(13)-P(1)-Rh(1)	111.1(2)
O(2)-S(1)-O(1)	113.2(3)
O(2)-S(1)-C(14)	104.6(3)
O(1)-S(1)-C(14)	104.3(3)
O(2)-S(1)-Rh(1)	111.0(2)
O(1)-S(1)-Rh(1)	115.8(2)
C(14)-S(1)-Rh(1)	106.8(2)
C(5)-C(1)-C(2)	107.0(5)
C(5)-C(1)-C(6)	128.2(5)
C(2)-C(1)-C(6)	124.4(5)
C(5)-C(1)-Rh(1)	72.1(3)
C(2)-C(1)-Rh(1)	71.9(3)
C(6)-C(1)-Rh(1)	127.0(4)
C(3)-C(2)-C(1)	108.6(5)
C(3)-C(2)-C(7)	128.2(5)
C(1)-C(2)-C(7)	123.2(5)
C(3)-C(2)-Rh(1)	71.9(3)
C(1)-C(2)-Rh(1)	69.8(3)
C(7)-C(2)-Rh(1)	125.7(5)
C(2)-C(3)-C(4)	108.4(5)
C(2)-C(3)-C(8)	125.6(6)
C(4)-C(3)-C(8)	125.8(6)
C(2)-C(3)-Rh(1)	72.0(3)
C(4)-C(3)-Rh(1)	67.6(3)
C(8)-C(3)-Rh(1)	130.1(4)
C(3)-C(4)-C(5)	107.7(5)
C(3)-C(4)-C(9)	125.2(6)
C(5)-C(4)-C(9)	125.9(6)
C(3)-C(4)-Rh(1)	74.5(3)
C(5)-C(4)-Rh(1)	74.0(3)
C(9)-C(4)-Rh(1)	127.2(4)
C(1)-C(5)-C(4)	107.8(5)
C(1)-C(5)-C(10)	126.7(5)
C(4)-C(5)-C(10)	125.1(5)
C(1)-C(5)-Rh(1)	70.8(3)
C(4)-C(5)-Rh(1)	67.8(3)
C(10)-C(5)-Rh(1)	132.4(4)

Tables S-8. U(aniso) values ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 2b.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Rh(1)	21(1)	28(1)	22(1)	-4(1)	0(1)	-3(1)
Cl(1)	34(1)	65(1)	28(1)	-1(1)	7(1)	-13(1)
P(1)	26(1)	37(1)	28(1)	0(1)	-4(1)	-2(1)
S(1)	30(1)	31(1)	38(1)	-7(1)	-1(1)	-3(1)
O(1)	45(2)	49(2)	73(4)	-12(3)	-15(2)	-6(2)
O(2)	59(3)	50(2)	49(3)	5(2)	-8(2)	-13(2)
C(1)	29(3)	30(3)	32(3)	-7(2)	-8(2)	-7(2)
C(2)	25(3)	42(3)	35(3)	-9(3)	-6(2)	-3(2)
C(3)	25(3)	29(3)	39(3)	0(2)	-17(2)	-5(2)
C(4)	33(3)	55(4)	25(3)	2(3)	-11(2)	-19(3)
C(5)	25(3)	48(3)	25(3)	-16(2)	-9(2)	-2(2)
C(6)	34(3)	39(3)	59(5)	0(3)	-12(3)	-13(2)
C(7)	25(2)	61(3)	57(4)	-12(5)	-6(4)	-5(2)
C(8)	56(4)	55(4)	61(5)	8(4)	-29(4)	-8(3)
C(9)	62(4)	80(5)	27(3)	12(3)	-2(3)	-19(4)
C(10)	37(3)	68(4)	50(4)	-28(4)	-2(3)	5(3)
C(11)	37(3)	81(4)	28(3)	-2(3)	-7(3)	-3(3)
C(12)	25(3)	55(3)	40(4)	0(3)	5(2)	6(2)
C(13)	45(4)	41(3)	76(5)	22(4)	-13(4)	3(3)
C(14)	79(5)	45(4)	63(5)	-14(4)	26(4)	-2(4)

Tables S-9. Positional parameters ($\times 10^4$) and U_{eq} ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for hydrogen atoms for **2b**.

	x	y	z	$U(eq)$
H(6A)	-4822 (2)	-6216 (6)	-3735 (8)	66
H(6B)	-4203 (2)	-6802 (6)	-3763 (8)	66
H(6C)	-4594 (2)	-7140 (6)	-5217 (8)	66
H(7A)	-5253 (2)	-4294 (6)	-3590 (12)	72
H(7B)	-5474 (2)	-3067 (6)	-4844 (12)	72
H(7C)	-5142 (2)	-2470 (6)	-3355 (12)	72
H(8A)	-4352 (3)	-187 (7)	-6962 (9)	86
H(8B)	-4667 (3)	-164 (7)	-5328 (9)	86
H(8C)	-4961 (3)	-855 (7)	-6844 (9)	86
H(9D)	-3224 (3)	-2903 (8)	-7927 (8)	85
H(9E)	-3393 (3)	-1237 (8)	-7239 (8)	85
H(9F)	-3733 (3)	-1983 (8)	-8645 (8)	85
H(10D)	-3255 (2)	-5312 (8)	-7522 (8)	77
H(10E)	-3740 (2)	-6560 (8)	-7471 (8)	77
H(10F)	-3333 (2)	-6395 (8)	-6021 (8)	77
H(11A)	-3064 (2)	-3781 (8)	-517 (7)	73
H(11B)	-2659 (2)	-2509 (8)	-1240 (7)	73
H(11C)	-2455 (2)	-4262 (8)	-979 (7)	73
H(12D)	-2499 (2)	-3985 (7)	-5502 (7)	60
H(12E)	-2103 (2)	-4386 (7)	-4076 (7)	60
H(12F)	-2308 (2)	-2634 (7)	-4338 (7)	60
H(13D)	-3163 (3)	-6660 (6)	-4017 (9)	81
H(13E)	-3299 (3)	-6490 (6)	-2202 (9)	81
H(13F)	-2679 (3)	-6640 (6)	-2766 (9)	81
H(14D)	-3842 (3)	-416 (8)	-1077 (9)	94
H(14E)	-4255 (3)	254 (8)	-2357 (9)	94
H(14F)	-3748 (3)	1286 (8)	-1794 (9)	94

Tables S-10. Positional parameters ($\times 10^4$) and U_{eq} ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6.

	x	y	z	U(eq)
Ir(1)	7692(1)	-560(1)	5825(1)	22(1)
S(1)	6904(2)	-661(2)	6395(1)	26(1)
P(1)	6634(2)	-954(2)	5436(1)	32(1)
O(1)	6061(5)	-572(6)	6312(3)	36(2)
O(2)	7184(6)	-134(6)	6717(3)	36(2)
N(1)	7992(6)	-1717(6)	5836(3)	29(2)
C(1)	8549(7)	-31(7)	5394(4)	25(2)
C(2)	8974(7)	-247(8)	5746(4)	27(3)
C(3)	8655(7)	191(7)	6073(4)	28(3)
C(4)	8021(7)	676(7)	5923(4)	29(3)
C(5)	7975(7)	556(8)	5505(4)	30(3)
C(6)	8770(9)	-264(10)	4972(4)	42(3)
C(7)	9635(8)	-810(9)	5768(4)	35(3)
C(8)	8975(8)	206(9)	6497(4)	37(3)
C(9)	7607(9)	1299(8)	6155(5)	42(3)
C(10)	7493(9)	1042(10)	5216(5)	45(4)
C(11)	6111(9)	-1829(9)	5605(5)	40(3)
C(12)	6941(11)	-1204(12)	4937(5)	55(5)
C(13)	5876(9)	-231(11)	5360(5)	51(4)
C(14)	7012(10)	-1612(9)	6610(4)	42(3)
C(15)	8239(8)	-2341(8)	5817(4)	36(3)
C(16)	8580(11)	-3120(9)	5784(6)	54(4)
S(1A)	5231(4)	2021(4)	5569(2)	46(2)
O(1A)	5934(19)	2212(23)	5760(20)	114(18)
O(2A)	5301(23)	1842(24)	5174(9)	80(10)
O(3A)	4683(19)	1515(20)	5779(11)	88(10)
C(1A)	5231(4)	2021(4)	5569(2)	46(2)
F(1A)	5934(19)	2212(23)	5760(20)	114(18)
F(2A)	5301(23)	1842(24)	5174(9)	80(10)
F(3A)	4683(19)	1515(20)	5779(11)	88(10)
O(1B)	4896(27)	1512(17)	5382(19)	123(20)
O(2B)	5579(42)	1837(26)	5882(14)	164(26)
O(3B)	6006(25)	2172(22)	5325(20)	133(17)
F(1B)	4896(27)	1512(17)	5382(19)	123(20)
F(2B)	5579(42)	1837(26)	5882(14)	164(26)
F(3B)	6006(25)	2172(22)	5325(20)	133(17)

Tables S-11. Intramolecular Distances (Å) and Angles (°) for **6**.

Ir(1)-N(1)	2.032(10)
Ir(1)-C(4)	2.196(13)
Ir(1)-C(5)	2.227(12)
Ir(1)-C(3)	2.232(12)
Ir(1)-C(1)	2.237(12)
Ir(1)-C(2)	2.257(12)
Ir(1)-P(1)	2.316(3)
Ir(1)-S(1)	2.335(3)
S(1)-O(1)	1.467(9)
S(1)-O(2)	1.477(10)
S(1)-C(14)	1.778(14)
P(1)-C(13)	1.80(2)
P(1)-C(12)	1.80(2)
P(1)-C(11)	1.82(2)
N(1)-C(15)	1.14(2)
C(1)-C(2)	1.43(2)
C(1)-C(5)	1.44(2)
C(1)-C(6)	1.51(2)
C(2)-C(3)	1.43(2)
C(2)-C(7)	1.48(2)
C(3)-C(4)	1.45(2)
C(3)-C(8)	1.52(2)
C(4)-C(5)	1.41(2)
C(4)-C(9)	1.49(2)
C(5)-C(10)	1.51(2)
C(15)-C(16)	1.45(2)
S(1A)-F(1B)	1.21(3)
S(1A)-O(1B)	1.21(3)
S(1A)-F(2B)	1.24(3)
S(1A)-O(2B)	1.24(3)
S(1A)-O(2A)	1.36(3)
S(1A)-F(2A)	1.36(3)
S(1A)-O(1A)	1.39(4)
S(1A)-F(1A)	1.39(4)
S(1A)-O(3A)	1.45(3)
S(1A)-F(3A)	1.45(3)
S(1A)-F(3B)	1.57(4)
S(1A)-O(3B)	1.57(4)
O(1A)-F(2B)	0.97(7)
O(1A)-O(2B)	0.97(7)
O(1A)-C(1A)	1.39(4)
O(1A)-F(3B)	1.46(7)
O(1A)-O(3B)	1.46(7)
O(2A)-F(1B)	1.13(6)
O(2A)-O(1B)	1.13(6)
O(2A)-C(1A)	1.36(3)
O(2A)-F(3B)	1.42(6)
O(2A)-O(3B)	1.42(6)
O(3A)-F(1B)	1.38(6)
O(3A)-O(1B)	1.38(6)
O(3A)-C(1A)	1.45(3)
O(3A)-F(2B)	1.65(7)
O(3A)-O(2B)	1.65(7)
C(1A)-F(1B)	1.21(3)
C(1A)-O(1B)	1.21(3)
C(1A)-F(2B)	1.24(3)
C(1A)-O(2B)	1.24(3)

C(1A)-F(2A)	1.36(3)
C(1A)-F(1A)	1.39(4)
C(1A)-F(3A)	1.45(3)
C(1A)-F(3B)	1.57(4)
C(1A)-O(3B)	1.57(4)
F(1A)-F(2B)	0.97(7)
F(1A)-O(2B)	0.97(7)
F(1A)-F(3B)	1.46(7)
F(1A)-O(3B)	1.46(7)
F(2A)-F(1B)	1.13(6)
F(2A)-O(1B)	1.13(6)
F(2A)-F(3B)	1.42(6)
F(2A)-O(3B)	1.42(6)
F(3A)-F(1B)	1.38(6)
F(3A)-O(1B)	1.38(6)
F(3A)-F(2B)	1.65(7)
F(3A)-O(2B)	1.65(7)
&E	
&D	
N(1)-Ir(1)-C(4)	149.1(5)
N(1)-Ir(1)-C(5)	141.0(5)
C(4)-Ir(1)-C(5)	37.3(5)
N(1)-Ir(1)-C(3)	111.2(5)
C(4)-Ir(1)-C(3)	38.1(5)
C(5)-Ir(1)-C(3)	62.3(5)
N(1)-Ir(1)-C(1)	103.7(4)
C(4)-Ir(1)-C(1)	63.1(5)
C(5)-Ir(1)-C(1)	37.7(5)
C(3)-Ir(1)-C(1)	62.2(4)
N(1)-Ir(1)-C(2)	89.3(4)
C(4)-Ir(1)-C(2)	63.1(5)
C(5)-Ir(1)-C(2)	62.4(5)
C(3)-Ir(1)-C(2)	37.1(4)
C(1)-Ir(1)-C(2)	37.1(4)
N(1)-Ir(1)-P(1)	85.7(3)
C(4)-Ir(1)-P(1)	123.9(3)
C(5)-Ir(1)-P(1)	98.3(3)
C(3)-Ir(1)-P(1)	160.3(3)
C(1)-Ir(1)-P(1)	105.0(3)
C(2)-Ir(1)-P(1)	138.7(3)
N(1)-Ir(1)-S(1)	93.3(3)
C(4)-Ir(1)-S(1)	95.4(3)
C(5)-Ir(1)-S(1)	125.3(4)
C(3)-Ir(1)-S(1)	99.1(3)
C(1)-Ir(1)-S(1)	158.2(3)
C(2)-Ir(1)-S(1)	131.7(3)
P(1)-Ir(1)-S(1)	89.56(11)
O(1)-S(1)-O(2)	112.9(6)
O(1)-S(1)-C(14)	105.7(7)
O(2)-S(1)-C(14)	102.9(7)
O(1)-S(1)-Ir(1)	113.4(4)
O(2)-S(1)-Ir(1)	111.4(4)
C(14)-S(1)-Ir(1)	109.8(5)
C(13)-P(1)-C(12)	103.7(9)
C(13)-P(1)-C(11)	104.6(7)
C(12)-P(1)-C(11)	103.6(8)
C(13)-P(1)-Ir(1)	116.0(6)
C(12)-P(1)-Ir(1)	111.3(6)
C(11)-P(1)-Ir(1)	116.1(5)
C(15)-N(1)-Ir(1)	171.8(11)
C(2)-C(1)-C(5)	107.8(11)

C(2)-C(1)-C(6)	125.2(11)
C(5)-C(1)-C(6)	126.1(12)
C(2)-C(1)-Ir(1)	72.2(7)
C(5)-C(1)-Ir(1)	70.8(7)
C(6)-C(1)-Ir(1)	131.1(10)
C(3)-C(2)-C(1)	107.7(11)
C(3)-C(2)-C(7)	126.1(12)
C(1)-C(2)-C(7)	126.2(11)
C(3)-C(2)-Ir(1)	70.5(7)
C(1)-C(2)-Ir(1)	70.7(7)
C(7)-C(2)-Ir(1)	125.2(9)
C(2)-C(3)-C(4)	108.4(11)
C(2)-C(3)-C(8)	125.9(12)
C(4)-C(3)-C(8)	125.5(12)
C(2)-C(3)-Ir(1)	72.4(7)
C(4)-C(3)-Ir(1)	69.6(7)
C(8)-C(3)-Ir(1)	128.2(9)
C(5)-C(4)-C(3)	107.5(11)
C(5)-C(4)-C(9)	126.3(12)
C(3)-C(4)-C(9)	125.2(12)
C(5)-C(4)-Ir(1)	72.6(7)
C(3)-C(4)-Ir(1)	72.3(7)
C(9)-C(4)-Ir(1)	129.5(9)
C(4)-C(5)-C(1)	108.5(11)
C(4)-C(5)-C(10)	125.7(13)
C(1)-C(5)-C(10)	125.3(13)
C(4)-C(5)-Ir(1)	70.2(7)
C(1)-C(5)-Ir(1)	71.5(7)
C(10)-C(5)-Ir(1)	130.9(9)
N(1)-C(15)-C(16)	178(2)
F(1B)-S(1A)-O(1B)	0(4)
F(1B)-S(1A)-F(2B)	119(3)
O(1B)-S(1A)-F(2B)	119(3)
F(1B)-S(1A)-O(2B)	119(3)
O(1B)-S(1A)-O(2B)	119(3)
F(2B)-S(1A)-O(2B)	0(8)
F(1B)-S(1A)-O(2A)	52(3)
O(1B)-S(1A)-O(2A)	52(3)
F(2B)-S(1A)-O(2A)	136(3)
O(2B)-S(1A)-O(2A)	136(3)
F(1B)-S(1A)-F(2A)	52(3)
O(1B)-S(1A)-F(2A)	52(3)
F(2B)-S(1A)-F(2A)	136(3)
O(2B)-S(1A)-F(2A)	136(3)
O(2A)-S(1A)-F(2A)	0(5)
F(1B)-S(1A)-O(1A)	144(3)
O(1B)-S(1A)-O(1A)	144(3)
F(2B)-S(1A)-O(1A)	43(3)
O(2B)-S(1A)-O(1A)	43(3)
O(2A)-S(1A)-O(1A)	115(3)
F(2A)-S(1A)-O(1A)	115(3)
F(1B)-S(1A)-F(1A)	144(3)
O(1B)-S(1A)-F(1A)	144(3)
F(2B)-S(1A)-F(1A)	43(3)
O(2B)-S(1A)-F(1A)	43(3)
O(2A)-S(1A)-F(1A)	115(3)
F(2A)-S(1A)-F(1A)	115(3)
O(1A)-S(1A)-F(1A)	0(6)
F(1B)-S(1A)-O(3A)	62(3)
O(1B)-S(1A)-O(3A)	62(3)
F(2B)-S(1A)-O(3A)	75(4)

O(2B)-S(1A)-O(3A)	75(4)
O(2A)-S(1A)-O(3A)	113(2)
F(2A)-S(1A)-O(3A)	113(2)
O(1A)-S(1A)-O(3A)	118(3)
F(1A)-S(1A)-O(3A)	118(3)
F(1B)-S(1A)-F(3A)	62(3)
O(1B)-S(1A)-F(3A)	62(3)
F(2B)-S(1A)-F(3A)	75(4)
O(2B)-S(1A)-F(3A)	75(4)
O(2A)-S(1A)-F(3A)	113(2)
F(2A)-S(1A)-F(3A)	113(2)
O(1A)-S(1A)-F(3A)	118(3)
F(1A)-S(1A)-F(3A)	118(3)
O(3A)-S(1A)-F(3A)	0(5)
F(1B)-S(1A)-F(3B)	104(4)
O(1B)-S(1A)-F(3B)	104(4)
F(2B)-S(1A)-F(3B)	95(4)
O(2B)-S(1A)-F(3B)	95(4)
O(2A)-S(1A)-F(3B)	57(3)
F(2A)-S(1A)-F(3B)	57(3)
O(1A)-S(1A)-F(3B)	59(3)
F(1A)-S(1A)-F(3B)	59(3)
O(3A)-S(1A)-F(3B)	153(2)
F(3A)-S(1A)-F(3B)	153(2)
F(1B)-S(1A)-O(3B)	104(4)
O(1B)-S(1A)-O(3B)	104(4)
F(2B)-S(1A)-O(3B)	95(4)
O(2B)-S(1A)-O(3B)	95(4)
O(2A)-S(1A)-O(3B)	57(3)
F(2A)-S(1A)-O(3B)	57(3)
O(1A)-S(1A)-O(3B)	59(3)
F(1A)-S(1A)-O(3B)	59(3)
O(3A)-S(1A)-O(3B)	153(2)
F(3A)-S(1A)-O(3B)	153(2)
F(3B)-S(1A)-O(3B)	0(6)
F(2B)-O(1A)-O(2B)	0(8)
F(2B)-O(1A)-S(1A)	60(3)
O(2B)-O(1A)-S(1A)	60(3)
F(2B)-O(1A)-C(1A)	60(3)
O(2B)-O(1A)-C(1A)	60(3)
S(1A)-O(1A)-C(1A)	0.0(8)
F(2B)-O(1A)-F(3B)	116(6)
O(2B)-O(1A)-F(3B)	116(6)
S(1A)-O(1A)-F(3B)	67(3)
C(1A)-O(1A)-F(3B)	67(3)
F(2B)-O(1A)-O(3B)	116(6)
O(2B)-O(1A)-O(3B)	116(6)
S(1A)-O(1A)-O(3B)	67(3)
C(1A)-O(1A)-O(3B)	67(3)
F(3B)-O(1A)-O(3B)	0(6)
F(1B)-O(2A)-O(1B)	0(4)
F(1B)-O(2A)-S(1A)	57(2)
O(1B)-O(2A)-S(1A)	57(2)
F(1B)-O(2A)-C(1A)	57(2)
O(1B)-O(2A)-C(1A)	57(2)
S(1A)-O(2A)-C(1A)	0.0(8)
F(1B)-O(2A)-F(3B)	119(4)
O(1B)-O(2A)-F(3B)	119(4)
S(1A)-O(2A)-F(3B)	69(3)
C(1A)-O(2A)-F(3B)	69(3)
F(1B)-O(2A)-O(3B)	119(4)

O(1B)-O(2A)-O(3B)	119(4)
S(1A)-O(2A)-O(3B)	69(3)
C(1A)-O(2A)-O(3B)	69(3)
F(3B)-O(2A)-O(3B)	0(7)
F(1B)-O(3A)-O(1B)	0(4)
F(1B)-O(3A)-S(1A)	51(2)
O(1B)-O(3A)-S(1A)	51(2)
F(1B)-O(3A)-C(1A)	51(2)
O(1B)-O(3A)-C(1A)	51(2)
S(1A)-O(3A)-C(1A)	0.0(8)
F(1B)-O(3A)-F(2B)	88(3)
O(1B)-O(3A)-F(2B)	88(3)
S(1A)-O(3A)-F(2B)	47(2)
C(1A)-O(3A)-F(2B)	47(2)
F(1B)-O(3A)-O(2B)	88(3)
O(1B)-O(3A)-O(2B)	88(3)
S(1A)-O(3A)-O(2B)	47(2)
C(1A)-O(3A)-O(2B)	47(2)
F(2B)-O(3A)-O(2B)	0(4)
F(1B)-C(1A)-O(1B)	0(4)
F(1B)-C(1A)-F(2B)	119(3)
O(1B)-C(1A)-F(2B)	119(3)
F(1B)-C(1A)-O(2B)	119(3)
O(1B)-C(1A)-O(2B)	119(3)
F(2B)-C(1A)-O(2B)	0(8)
F(1B)-C(1A)-O(2A)	52(3)
O(1B)-C(1A)-O(2A)	52(3)
F(2B)-C(1A)-O(2A)	136(3)
O(2B)-C(1A)-O(2A)	136(3)
F(1B)-C(1A)-F(2A)	52(3)
O(1B)-C(1A)-F(2A)	52(3)
F(2B)-C(1A)-F(2A)	136(3)
O(2B)-C(1A)-F(2A)	136(3)
O(2A)-C(1A)-F(2A)	0(5)
F(1B)-C(1A)-O(1A)	144(3)
O(1B)-C(1A)-O(1A)	144(3)
F(2B)-C(1A)-O(1A)	43(3)
O(2B)-C(1A)-O(1A)	43(3)
O(2A)-C(1A)-O(1A)	115(3)
F(2A)-C(1A)-O(1A)	115(3)
F(1B)-C(1A)-F(1A)	144(3)
O(1B)-C(1A)-F(1A)	144(3)
F(2B)-C(1A)-F(1A)	43(3)
O(2B)-C(1A)-F(1A)	43(3)
O(2A)-C(1A)-F(1A)	115(3)
F(2A)-C(1A)-F(1A)	115(3)
O(1A)-C(1A)-F(1A)	0(6)
F(1B)-C(1A)-O(3A)	62(3)
O(1B)-C(1A)-O(3A)	62(3)
F(2B)-C(1A)-O(3A)	75(4)
O(2B)-C(1A)-O(3A)	75(4)
O(2A)-C(1A)-O(3A)	113(2)
F(2A)-C(1A)-O(3A)	113(2)
O(1A)-C(1A)-O(3A)	118(3)
F(1A)-C(1A)-O(3A)	118(3)
F(1B)-C(1A)-F(3A)	62(3)
O(1B)-C(1A)-F(3A)	62(3)
F(2B)-C(1A)-F(3A)	75(4)
O(2B)-C(1A)-F(3A)	75(4)
O(2A)-C(1A)-F(3A)	113(2)
F(2A)-C(1A)-F(3A)	113(2)

O(1A)-C(1A)-F(3A)	118(3)
F(1A)-C(1A)-F(3A)	118(3)
O(3A)-C(1A)-F(3A)	0(5)
F(1B)-C(1A)-F(3B)	104(4)
O(1B)-C(1A)-F(3B)	104(4)
F(2B)-C(1A)-F(3B)	95(4)
O(2B)-C(1A)-F(3B)	95(4)
O(2A)-C(1A)-F(3B)	57(3)
F(2A)-C(1A)-F(3B)	57(3)
O(1A)-C(1A)-F(3B)	59(3)
F(1A)-C(1A)-F(3B)	59(3)
O(3A)-C(1A)-F(3B)	153(2)
F(3A)-C(1A)-F(3B)	153(2)
F(1B)-C(1A)-O(3B)	104(4)
O(1B)-C(1A)-O(3B)	104(4)
F(2B)-C(1A)-O(3B)	95(4)
O(2B)-C(1A)-O(3B)	95(4)
O(2A)-C(1A)-O(3B)	57(3)
F(2A)-C(1A)-O(3B)	57(3)
O(1A)-C(1A)-O(3B)	59(3)
F(1A)-C(1A)-O(3B)	59(3)
O(3A)-C(1A)-O(3B)	153(2)
F(3A)-C(1A)-O(3B)	153(2)
F(3B)-C(1A)-O(3B)	0(6)
F(2B)-F(1A)-O(2B)	0(8)
F(2B)-F(1A)-S(1A)	60(3)
O(2B)-F(1A)-S(1A)	60(3)
F(2B)-F(1A)-C(1A)	60(3)
O(2B)-F(1A)-C(1A)	60(3)
S(1A)-F(1A)-C(1A)	0.0(8)
F(2B)-F(1A)-F(3B)	116(6)
O(2B)-F(1A)-F(3B)	116(6)
S(1A)-F(1A)-F(3B)	67(3)
C(1A)-F(1A)-F(3B)	67(3)
F(2B)-F(1A)-O(3B)	116(6)
O(2B)-F(1A)-O(3B)	116(6)
S(1A)-F(1A)-O(3B)	67(3)
C(1A)-F(1A)-O(3B)	67(3)
F(3B)-F(1A)-O(3B)	0(6)
F(1B)-F(2A)-O(1B)	0(4)
F(1B)-F(2A)-S(1A)	57(2)
O(1B)-F(2A)-S(1A)	57(2)
F(1B)-F(2A)-C(1A)	57(2)
O(1B)-F(2A)-C(1A)	57(2)
S(1A)-F(2A)-C(1A)	0.0(8)
F(1B)-F(2A)-F(3B)	119(4)
O(1B)-F(2A)-F(3B)	119(4)
S(1A)-F(2A)-F(3B)	69(3)
C(1A)-F(2A)-F(3B)	69(3)
F(1B)-F(2A)-O(3B)	119(4)
O(1B)-F(2A)-O(3B)	119(4)
S(1A)-F(2A)-O(3B)	69(3)
C(1A)-F(2A)-O(3B)	69(3)
F(3B)-F(2A)-O(3B)	0(7)
F(1B)-F(3A)-O(1B)	0(4)
F(1B)-F(3A)-S(1A)	51(2)
O(1B)-F(3A)-S(1A)	51(2)
F(1B)-F(3A)-C(1A)	51(2)
O(1B)-F(3A)-C(1A)	51(2)
S(1A)-F(3A)-C(1A)	0.0(8)
F(1B)-F(3A)-F(2B)	88(3)

O(1B)-F(3A)-F(2B)	88(3)
S(1A)-F(3A)-F(2B)	47(2)
C(1A)-F(3A)-F(2B)	47(2)
F(1B)-F(3A)-O(2B)	88(3)
O(1B)-F(3A)-O(2B)	88(3)
S(1A)-F(3A)-O(2B)	47(2)
C(1A)-F(3A)-O(2B)	47(2)
F(2B)-F(3A)-O(2B)	0(4)
F(2A)-O(1B)-O(2A)	0(6)
F(2A)-O(1B)-S(1A)	71(3)
O(2A)-O(1B)-S(1A)	71(3)
F(2A)-O(1B)-C(1A)	71(3)
O(2A)-O(1B)-C(1A)	71(3)
S(1A)-O(1B)-C(1A)	0.0(9)
F(2A)-O(1B)-F(3A)	139(4)
O(2A)-O(1B)-F(3A)	139(4)
S(1A)-O(1B)-F(3A)	68(3)
C(1A)-O(1B)-F(3A)	68(3)
F(2A)-O(1B)-O(3A)	139(4)
O(2A)-O(1B)-O(3A)	139(4)
S(1A)-O(1B)-O(3A)	68(3)
C(1A)-O(1B)-O(3A)	68(3)
F(3A)-O(1B)-O(3A)	0(4)
F(1A)-O(2B)-O(1A)	0(8)
F(1A)-O(2B)-S(1A)	77(4)
O(1A)-O(2B)-S(1A)	77(4)
F(1A)-O(2B)-C(1A)	77(4)
O(1A)-O(2B)-C(1A)	77(4)
S(1A)-O(2B)-C(1A)	0.0(9)
F(1A)-O(2B)-F(3A)	135(4)
O(1A)-O(2B)-F(3A)	135(4)
S(1A)-O(2B)-F(3A)	58(3)
C(1A)-O(2B)-F(3A)	58(3)
F(1A)-O(2B)-O(3A)	135(4)
O(1A)-O(2B)-O(3A)	135(4)
S(1A)-O(2B)-O(3A)	58(3)
C(1A)-O(2B)-O(3A)	58(3)
F(3A)-O(2B)-O(3A)	0(4)
F(2A)-O(3B)-O(2A)	0(4)
F(2A)-O(3B)-F(1A)	108(4)
O(2A)-O(3B)-F(1A)	108(4)
F(2A)-O(3B)-O(1A)	108(4)
O(2A)-O(3B)-O(1A)	108(4)
F(1A)-O(3B)-O(1A)	0(4)
F(2A)-O(3B)-S(1A)	54(2)
O(2A)-O(3B)-S(1A)	54(2)
F(1A)-O(3B)-S(1A)	55(2)
O(1A)-O(3B)-S(1A)	55(2)
F(2A)-O(3B)-C(1A)	54(2)
O(2A)-O(3B)-C(1A)	54(2)
F(1A)-O(3B)-C(1A)	55(2)
O(1A)-O(3B)-C(1A)	55(2)
S(1A)-O(3B)-C(1A)	0.0(7)
F(2A)-F(1B)-O(2A)	0(6)
F(2A)-F(1B)-S(1A)	71(3)
O(2A)-F(1B)-S(1A)	71(3)
F(2A)-F(1B)-C(1A)	71(3)
O(2A)-F(1B)-C(1A)	71(3)
S(1A)-F(1B)-C(1A)	0.0(9)
F(2A)-F(1B)-F(3A)	139(4)
O(2A)-F(1B)-F(3A)	139(4)

S(1A)-F(1B)-F(3A)	68(3)
C(1A)-F(1B)-F(3A)	68(3)
F(2A)-F(1B)-O(3A)	139(4)
O(2A)-F(1B)-O(3A)	139(4)
S(1A)-F(1B)-O(3A)	68(3)
C(1A)-F(1B)-O(3A)	68(3)
F(3A)-F(1B)-O(3A)	0(4)
F(1A)-F(2B)-O(1A)	0(8)
F(1A)-F(2B)-S(1A)	77(4)
O(1A)-F(2B)-S(1A)	77(4)
F(1A)-F(2B)-C(1A)	77(4)
O(1A)-F(2B)-C(1A)	77(4)
S(1A)-F(2B)-C(1A)	0.0(9)
F(1A)-F(2B)-F(3A)	135(4)
O(1A)-F(2B)-F(3A)	135(4)
S(1A)-F(2B)-F(3A)	58(3)
C(1A)-F(2B)-F(3A)	58(3)
F(1A)-F(2B)-O(3A)	135(4)
O(1A)-F(2B)-O(3A)	135(4)
S(1A)-F(2B)-O(3A)	58(3)
C(1A)-F(2B)-O(3A)	58(3)
F(3A)-F(2B)-O(3A)	0(4)
F(2A)-F(3B)-O(2A)	0(4)
F(2A)-F(3B)-F(1A)	108(4)
O(2A)-F(3B)-F(1A)	108(4)
F(2A)-F(3B)-O(1A)	108(4)
O(2A)-F(3B)-O(1A)	108(4)
F(1A)-F(3B)-O(1A)	0(4)
F(2A)-F(3B)-S(1A)	54(2)
O(2A)-F(3B)-S(1A)	54(2)
F(1A)-F(3B)-S(1A)	55(2)
O(1A)-F(3B)-S(1A)	55(2)
F(2A)-F(3B)-C(1A)	54(2)
O(2A)-F(3B)-C(1A)	54(2)
F(1A)-F(3B)-C(1A)	55(2)
O(1A)-F(3B)-C(1A)	55(2)
S(1A)-F(3B)-C(1A)	0.0(7)

Tables S-12. U(aniso) values ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for 6.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ir(1)	22(1)	24(1)	21(1)	1(1)	0(1)	2(1)
S(1)	28(2)	29(2)	22(1)	1(1)	3(1)	-2(1)
P(1)	25(2)	47(2)	23(2)	0(1)	-5(1)	-6(1)
O(1)	24(4)	49(6)	36(5)	-1(4)	3(4)	-1(4)
O(2)	37(5)	44(6)	27(5)	-6(4)	11(4)	-3(4)
N(1)	28(5)	17(5)	41(6)	2(4)	2(5)	4(4)
C(1)	22(5)	32(6)	22(6)	4(5)	1(4)	-3(5)
C(2)	24(6)	32(6)	26(6)	-1(5)	9(5)	-5(5)
C(3)	25(6)	31(6)	28(6)	0(5)	5(5)	-5(5)
C(4)	27(6)	27(6)	33(7)	6(5)	-1(5)	-4(5)
C(5)	27(6)	28(6)	35(7)	6(5)	-2(5)	-5(5)
C(6)	35(7)	67(10)	25(7)	3(7)	9(6)	0(7)
C(7)	25(6)	44(8)	37(7)	2(6)	1(5)	4(5)
C(8)	29(7)	53(9)	30(7)	-5(6)	-4(5)	-9(6)
C(9)	48(8)	24(6)	53(9)	-7(6)	11(7)	4(6)
C(10)	39(8)	48(9)	48(9)	21(7)	-2(7)	-1(7)
C(11)	39(8)	47(8)	36(8)	-4(6)	-8(6)	-11(6)
C(12)	54(10)	82(13)	31(8)	-17(8)	3(7)	-17(9)
C(13)	26(7)	69(11)	58(10)	24(9)	-16(7)	0(7)
C(14)	57(9)	36(7)	34(8)	15(6)	5(7)	-3(7)
C(15)	34(7)	32(7)	42(8)	0(6)	1(6)	-6(5)
C(16)	52(10)	35(8)	75(12)	7(8)	14(9)	14(7)
S(1A)	44(3)	47(3)	48(4)	7(3)	-12(3)	3(3)
O(1A)	46(16)	75(25)	220(56)	37(30)	-52(24)	-8(15)
O(2A)	89(26)	91(26)	61(17)	-30(17)	-7(16)	27(19)
O(3A)	82(21)	95(23)	88(22)	39(19)	11(18)	-13(17)
C(1A)	44(3)	47(3)	48(4)	7(3)	-12(3)	3(3)
F(1A)	46(16)	75(25)	220(56)	37(30)	-52(24)	-8(15)
F(2A)	89(26)	91(26)	61(17)	-30(17)	-7(16)	27(19)
F(3A)	82(21)	95(23)	88(22)	39(19)	11(18)	-13(17)
O(1B)	118(35)	31(15)	220(57)	-39(24)	-99(37)	19(17)
O(2B)	279(70)	88(29)	123(34)	3(25)	-142(44)	77(35)
O(3B)	103(31)	83(25)	212(52)	5(31)	40(34)	54(23)
F(1B)	118(35)	31(15)	220(57)	-39(24)	-99(37)	19(17)
F(2B)	279(70)	88(29)	123(34)	3(25)	-142(44)	77(35)
F(3B)	103(31)	83(25)	212(52)	5(31)	40(34)	54(23)

Tables S-13. Positional parameters ($\times 10^4$) and U_{eq} ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for hydrogen atoms for 6.

	x	y	z	U(eq)
H(6A)	9268(35)	-10(54)	4898(13)	64
H(6B)	8355(32)	-95(60)	4787(6)	64
H(6C)	8830(65)	-837(12)	4957(9)	64
H(7A)	10131(10)	-532(14)	5717(31)	53
H(7B)	9562(32)	-1223(35)	5567(21)	53
H(7C)	9651(38)	-1048(46)	6035(11)	53
H(8A)	9410(42)	584(47)	6514(9)	56
H(8B)	9166(58)	-320(18)	6570(12)	56
H(8C)	8556(19)	363(62)	6682(6)	56
H(9A)	7947(28)	1762(26)	6178(29)	63
H(9B)	7482(60)	1099(24)	6423(12)	63
H(9C)	7119(35)	1444(48)	6017(18)	63
H(10A)	7798(28)	1502(39)	5131(28)	67
H(10B)	7008(34)	1217(59)	5347(12)	67
H(10C)	7359(60)	721(24)	4981(17)	67
H(11A)	5692(43)	-1957(39)	5415(18)	61
H(11B)	5880(56)	-1730(24)	5869(15)	61
H(11C)	6479(16)	-2272(18)	5623(32)	61
H(12A)	6499(25)	-1443(74)	4793(14)	83
H(12B)	7379(53)	-1579(61)	4950(5)	83
H(12C)	7112(75)	-727(16)	4797(14)	83
H(13A)	5451(36)	-461(26)	5199(32)	76
H(13B)	6097(19)	224(34)	5219(34)	76
H(13C)	5667(52)	-63(56)	5619(6)	76
H(14A)	6724(55)	-1633(22)	6864(17)	63
H(14B)	7571(11)	-1718(28)	6659(31)	63
H(14C)	6800(60)	-2009(10)	6427(15)	63
H(16A)	8168(16)	-3500(14)	5715(34)	65
H(16B)	8818(60)	-3268(29)	6041(12)	65
H(16C)	8985(49)	-3120(19)	5576(24)	65