
ELECTRONIC SUPPORTING INFORMATION

For

Synthesis of New Heteroscorpionate Iridium(I) and Iridium(III) Complexes

Arián E. Roa,^a Jesús Campos,^a Margarita Paneque^{a,} Verónica Salazar,^{b,*} Antonio Otero,^{c,*} Agustín Lara-Sánchez,^{c,*} Ana M. Rodríguez,^c I. López-Solera^c and M. Victoria Gómez^c*

^aInstituto de Investigaciones Químicas (IIQ), Departamento de Química Inorgánica, and Centro de Innovación en Química Avanzada (ORFEO-CINQA), CSIC and Universidad de Sevilla, Avenida Américo Vespucio 49, 41092-Sevilla, Spain.

^bCentro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Pachuca, Hidalgo, México.

^cDepartamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica, and Centro de Innovación en Química Avanzada (ORFEO-CINQA), Universidad de Castilla-La Mancha, 13071-Ciudad Real, Spain.

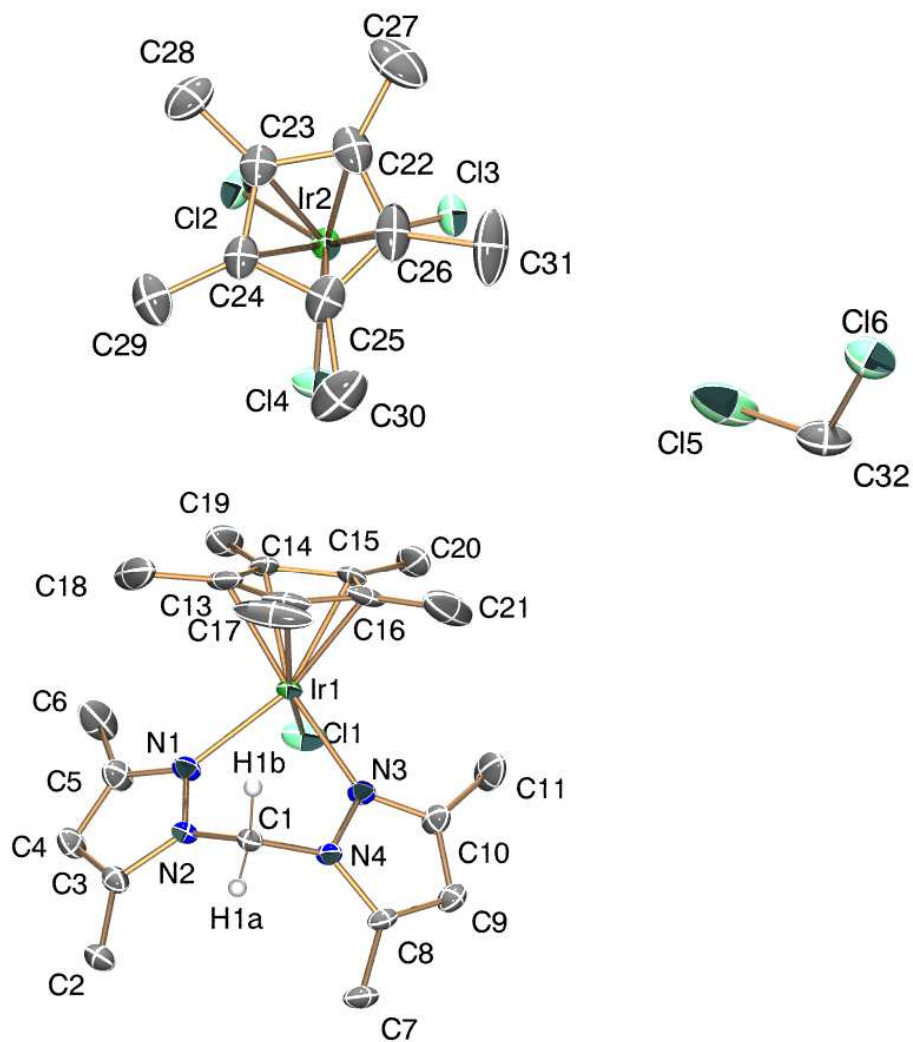
CORRESPONDING AUTHOR: paneque@iiq.csic.es, Salazar@uaeh.reduaeh.edu, Antonio.Otero@uclm.es and Agustin.Lara@uclm.es.

CONTENTS

1. Crystallographic details of compound **9**

S1

1. Crystallographic details of compound 9



Crystal data

$C_{32}H_{48}Cl_6Ir_2N_4$	$F(000) = 2096$
$M_r = 1085.84$	$D_x = 1.927 \text{ Mg m}^{-3}$
Monoclinic, $P2_1/n$	Mo $K\alpha$ radiation, $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$
$a = 9.9001 (2) \text{ \AA}$	Cell parameters from 9435 reflections
$b = 14.2474 (3) \text{ \AA}$	$\theta = 2.6\text{--}30.1^\circ$
$c = 26.5788 (6) \text{ \AA}$	$\mu = 7.56 \text{ mm}^{-1}$
$\beta = 93.156 (1)^\circ$	$T = 173 \text{ K}$
$V = 3743.27 (14) \text{ \AA}^3$	Prism, red
$Z = 4$	$0.48 \times 0.42 \times 0.28 \text{ mm}$

Data collection

Bruker-Nonius X8kappa APEX II CCD area detector' diffractometer	8597 independent reflections
Radiation source: fine-focus sealed tube graphite	7693 reflections with $I > 2\sigma(I)$
phi and ω scans with narrow frames	$R_{\text{int}} = 0.040$
Absorption correction: multi-scan SADABS, Bruker (2006). APEX 2. Version 2.1. Bruker Analytical X-ray Solutions, Madison, Wisconsin, USA.	$\theta_{\text{max}} = 27.5^\circ$, $\theta_{\text{min}} = 2.1^\circ$
$T_{\text{min}} = 0.122$, $T_{\text{max}} = 0.226$	$h = -12 \rightarrow 12$
89941 measured reflections	$k = -18 \rightarrow 18$
	$l = -34 \rightarrow 34$

Refinement

Refinement on F^2	Primary atom site location: structure-invariant direct methods
Least-squares matrix: full	Secondary atom site location: difference Fourier map
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.023$	Hydrogen site location: inferred from neighbouring sites
$wR(F^2) = 0.057$	H-atom parameters constrained
$S = 1.14$	$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0167P)^2 + 11.3229P]$ where $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
8597 reflections	$(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0.001$
411 parameters	$\Delta\rho_{\text{max}} = 1.63 \text{ e \AA}^{-3}$
0 restraints	$\Delta\rho_{\text{min}} = -1.09 \text{ e \AA}^{-3}$

Geometric parameters (Å, °)

Ir1—N1	2.115 (3)	C17—H17B	0.9800
Ir1—N3	2.119 (3)	C17—H17C	0.9800
Ir1—C14	2.153 (3)	C18—H18A	0.9800
Ir1—C12	2.157 (4)	C18—H18B	0.9800
Ir1—C15	2.161 (3)	C18—H18C	0.9800
Ir1—C13	2.172 (4)	C19—H19A	0.9800
Ir1—C16	2.179 (3)	C19—H19B	0.9800
Ir1—C11	2.3977 (9)	C19—H19C	0.9800
N1—C5	1.341 (5)	C20—H20A	0.9800
N1—N2	1.365 (4)	C20—H20B	0.9800
N2—C3	1.359 (4)	C20—H20C	0.9800
N2—C1	1.435 (4)	C21—H21A	0.9800
N3—C10	1.337 (4)	C21—H21B	0.9800
N3—N4	1.366 (4)	C21—H21C	0.9800
N4—C8	1.350 (4)	Ir2—C24	2.128 (4)
N4—C1	1.445 (4)	Ir2—C22	2.131 (4)
C1—H1A	0.9900	Ir2—C26	2.134 (4)
C1—H1B	0.9900	Ir2—C23	2.137 (4)
C2—C3	1.487 (5)	Ir2—C25	2.147 (4)
C2—H2A	0.9800	Ir2—C14	2.4170 (10)
C2—H2B	0.9800	Ir2—C12	2.4255 (9)
C2—H2C	0.9800	Ir2—C13	2.4284 (9)
C3—C4	1.370 (5)	C22—C23	1.431 (6)
C4—C5	1.403 (5)	C22—C26	1.432 (7)
C4—H4	0.9500	C22—C27	1.493 (7)
C5—C6	1.491 (5)	C23—C24	1.429 (6)
C6—H6A	0.9800	C23—C28	1.492 (6)
C6—H6B	0.9800	C24—C25	1.444 (6)
C6—H6C	0.9800	C24—C29	1.484 (6)
C7—C8	1.486 (5)	C25—C26	1.423 (7)
C7—H7A	0.9800	C25—C30	1.489 (7)
C7—H7B	0.9800	C26—C31	1.507 (6)
C7—H7C	0.9800	C27—H27A	0.9800
C8—C9	1.377 (5)	C27—H27B	0.9800
C9—C10	1.401 (5)	C27—H27C	0.9800
C9—H9	0.9500	C28—H28A	0.9800
C10—C11	1.493 (5)	C28—H28B	0.9800
C11—H11A	0.9800	C28—H28C	0.9800
C11—H11B	0.9800	C29—H29A	0.9800
C11—H11C	0.9800	C29—H29B	0.9800

C12—C13	1.423 (6)	C29—H29C	0.9800
C12—C16	1.434 (6)	C30—H30A	0.9800
C12—C17	1.501 (6)	C30—H30B	0.9800
C13—C14	1.424 (5)	C30—H30C	0.9800
C13—C18	1.484 (6)	C31—H31A	0.9800
C14—C15	1.454 (5)	C31—H31B	0.9800
C14—C19	1.493 (5)	C31—H31C	0.9800
C15—C16	1.423 (5)	C32—C15	1.726 (6)
C15—C20	1.494 (5)	C32—C16	1.743 (5)
C16—C21	1.481 (6)	C32—H32A	0.9900
C17—H17A	0.9800	C32—H32B	0.9900
N1—Ir1—N3	86.22 (11)	C12—C17—H17C	109.5
N1—Ir1—C14	116.31 (13)	H17A—C17—H17C	109.5
N3—Ir1—C14	157.44 (13)	H17B—C17—H17C	109.5
N1—Ir1—C12	108.45 (14)	C13—C18—H18A	109.5
N3—Ir1—C12	108.36 (14)	C13—C18—H18B	109.5
C14—Ir1—C12	65.10 (14)	H18A—C18—H18B	109.5
N1—Ir1—C15	155.71 (12)	C13—C18—H18C	109.5
N3—Ir1—C15	118.07 (12)	H18A—C18—H18C	109.5
C14—Ir1—C15	39.39 (14)	H18B—C18—H18C	109.5
C12—Ir1—C15	65.15 (13)	C14—C19—H19A	109.5
N1—Ir1—C13	95.32 (13)	C14—C19—H19B	109.5
N3—Ir1—C13	145.15 (14)	H19A—C19—H19B	109.5
C14—Ir1—C13	38.44 (14)	C14—C19—H19C	109.5
C12—Ir1—C13	38.38 (17)	H19A—C19—H19C	109.5
C15—Ir1—C13	64.72 (14)	H19B—C19—H19C	109.5
N1—Ir1—C16	145.94 (13)	C15—C20—H20A	109.5
N3—Ir1—C16	96.37 (13)	C15—C20—H20B	109.5
C14—Ir1—C16	64.65 (14)	H20A—C20—H20B	109.5
C12—Ir1—C16	38.62 (16)	C15—C20—H20C	109.5
C15—Ir1—C16	38.29 (13)	H20A—C20—H20C	109.5
C13—Ir1—C16	63.86 (16)	H20B—C20—H20C	109.5
N1—Ir1—C11	87.54 (8)	C16—C21—H21A	109.5
N3—Ir1—C11	87.29 (8)	C16—C21—H21B	109.5
C14—Ir1—C11	94.44 (10)	H21A—C21—H21B	109.5
C12—Ir1—C11	157.92 (10)	C16—C21—H21C	109.5
C15—Ir1—C11	93.97 (10)	H21A—C21—H21C	109.5
C13—Ir1—C11	127.54 (12)	H21B—C21—H21C	109.5
C16—Ir1—C11	126.46 (11)	C24—Ir2—C22	66.37 (17)
C5—N1—N2	105.8 (3)	C24—Ir2—C26	65.88 (16)
C5—N1—Ir1	133.4 (2)	C22—Ir2—C26	39.23 (19)

N2—N1—Ir1	120.7 (2)	C24—Ir2—C23	39.14 (16)
C3—N2—N1	111.4 (3)	C22—Ir2—C23	39.18 (17)
C3—N2—C1	128.9 (3)	C26—Ir2—C23	65.16 (17)
N1—N2—C1	119.6 (3)	C24—Ir2—C25	39.47 (16)
C10—N3—N4	105.8 (3)	C22—Ir2—C25	65.80 (19)
C10—N3—Ir1	133.4 (2)	C26—Ir2—C25	38.85 (18)
N4—N3—Ir1	120.4 (2)	C23—Ir2—C25	65.25 (17)
C8—N4—N3	111.5 (3)	C24—Ir2—Cl4	103.21 (12)
C8—N4—C1	128.9 (3)	C22—Ir2—Cl4	158.15 (14)
N3—N4—C1	119.3 (3)	C26—Ir2—Cl4	119.45 (15)
N2—C1—N4	110.1 (3)	C23—Ir2—Cl4	140.09 (12)
N2—C1—H1A	109.6	C25—Ir2—Cl4	93.74 (13)
N4—C1—H1A	109.6	C24—Ir2—Cl2	105.63 (11)
N2—C1—H1B	109.6	C22—Ir2—Cl2	113.17 (14)
N4—C1—H1B	109.6	C26—Ir2—Cl2	152.35 (15)
H1A—C1—H1B	108.2	C23—Ir2—Cl2	91.37 (12)
C3—C2—H2A	109.5	C25—Ir2—Cl2	144.36 (12)
C3—C2—H2B	109.5	Cl4—Ir2—Cl2	87.80 (4)
H2A—C2—H2B	109.5	C24—Ir2—Cl3	160.27 (11)
C3—C2—H2C	109.5	C22—Ir2—Cl3	96.82 (13)
H2A—C2—H2C	109.5	C26—Ir2—Cl3	94.64 (12)
H2B—C2—H2C	109.5	C23—Ir2—Cl3	131.06 (12)
N2—C3—C4	106.3 (3)	C25—Ir2—Cl3	125.42 (12)
N2—C3—C2	122.0 (3)	Cl4—Ir2—Cl3	88.85 (4)
C4—C3—C2	131.6 (3)	Cl2—Ir2—Cl3	90.19 (3)
C3—C4—C5	106.8 (3)	C23—C22—C26	106.9 (4)
C3—C4—H4	126.6	C23—C22—C27	126.7 (5)
C5—C4—H4	126.6	C26—C22—C27	126.3 (5)
N1—C5—C4	109.6 (3)	C23—C22—Ir2	70.6 (2)
N1—C5—C6	122.8 (3)	C26—C22—Ir2	70.5 (2)
C4—C5—C6	127.6 (3)	C27—C22—Ir2	126.2 (3)
C5—C6—H6A	109.5	C24—C23—C22	109.2 (4)
C5—C6—H6B	109.5	C24—C23—C28	124.6 (4)
H6A—C6—H6B	109.5	C22—C23—C28	126.2 (4)
C5—C6—H6C	109.5	C24—C23—Ir2	70.1 (2)
H6A—C6—H6C	109.5	C22—C23—Ir2	70.2 (2)
H6B—C6—H6C	109.5	C28—C23—Ir2	126.7 (3)
C8—C7—H7A	109.5	C23—C24—C25	107.0 (4)
C8—C7—H7B	109.5	C23—C24—C29	125.5 (4)
H7A—C7—H7B	109.5	C25—C24—C29	127.2 (4)
C8—C7—H7C	109.5	C23—C24—Ir2	70.8 (2)
H7A—C7—H7C	109.5	C25—C24—Ir2	71.0 (2)

H7B—C7—H7C	109.5	C29—C24—Ir2	127.5 (3)
N4—C8—C9	106.4 (3)	C26—C25—C24	107.9 (4)
N4—C8—C7	122.2 (3)	C26—C25—C30	126.5 (5)
C9—C8—C7	131.3 (3)	C24—C25—C30	125.6 (5)
C8—C9—C10	106.5 (3)	C26—C25—Ir2	70.1 (2)
C8—C9—H9	126.8	C24—C25—Ir2	69.6 (2)
C10—C9—H9	126.8	C30—C25—Ir2	126.2 (3)
N3—C10—C9	109.8 (3)	C25—C26—C22	108.9 (4)
N3—C10—C11	122.6 (3)	C25—C26—C31	125.3 (5)
C9—C10—C11	127.6 (3)	C22—C26—C31	125.6 (5)
C10—C11—H11A	109.5	C25—C26—Ir2	71.1 (2)
C10—C11—H11B	109.5	C22—C26—Ir2	70.3 (2)
H11A—C11—H11B	109.5	C31—C26—Ir2	127.8 (3)
C10—C11—H11C	109.5	C22—C27—H27A	109.5
H11A—C11—H11C	109.5	C22—C27—H27B	109.5
H11B—C11—H11C	109.5	H27A—C27—H27B	109.5
C13—C12—C16	107.3 (3)	C22—C27—H27C	109.5
C13—C12—C17	126.6 (5)	H27A—C27—H27C	109.5
C16—C12—C17	125.3 (5)	H27B—C27—H27C	109.5
C13—C12—Ir1	71.4 (2)	C23—C28—H28A	109.5
C16—C12—Ir1	71.5 (2)	C23—C28—H28B	109.5
C17—C12—Ir1	130.6 (3)	H28A—C28—H28B	109.5
C12—C13—C14	109.1 (3)	C23—C28—H28C	109.5
C12—C13—C18	123.6 (4)	H28A—C28—H28C	109.5
C14—C13—C18	127.3 (4)	H28B—C28—H28C	109.5
C12—C13—Ir1	70.2 (2)	C24—C29—H29A	109.5
C14—C13—Ir1	70.1 (2)	C24—C29—H29B	109.5
C18—C13—Ir1	126.4 (3)	H29A—C29—H29B	109.5
C13—C14—C15	107.4 (3)	C24—C29—H29C	109.5
C13—C14—C19	126.7 (4)	H29A—C29—H29C	109.5
C15—C14—C19	125.7 (3)	H29B—C29—H29C	109.5
C13—C14—Ir1	71.50 (19)	C25—C30—H30A	109.5
C15—C14—Ir1	70.61 (18)	C25—C30—H30B	109.5
C19—C14—Ir1	126.8 (3)	H30A—C30—H30B	109.5
C16—C15—C14	107.2 (3)	C25—C30—H30C	109.5
C16—C15—C20	128.0 (4)	H30A—C30—H30C	109.5
C14—C15—C20	124.6 (3)	H30B—C30—H30C	109.5
C16—C15—Ir1	71.55 (19)	C26—C31—H31A	109.5
C14—C15—Ir1	70.00 (18)	C26—C31—H31B	109.5
C20—C15—Ir1	127.0 (3)	H31A—C31—H31B	109.5
C15—C16—C12	108.9 (3)	C26—C31—H31C	109.5
C15—C16—C21	127.1 (4)	H31A—C31—H31C	109.5

C12—C16—C21	124.0 (4)	H31B—C31—H31C	109.5
C15—C16—Ir1	70.16 (19)	C15—C32—C16	112.7 (3)
C12—C16—Ir1	69.8 (2)	C15—C32—H32A	109.0
C21—C16—Ir1	127.3 (3)	C16—C32—H32A	109.0
C12—C17—H17A	109.5	C15—C32—H32B	109.0
C12—C17—H17B	109.5	C16—C32—H32B	109.0
H17A—C17—H17B	109.5	H32A—C32—H32B	107.8
N3—Ir1—N1—C5	-144.0 (4)	C14—C15—C16— C21	-176.4 (4)
C14—Ir1—N1—C5	37.2 (4)	C20—C15—C16— C21	-0.7 (6)
C12—Ir1—N1—C5	107.9 (4)	Ir1—C15—C16—C21	122.3 (4)
C15—Ir1—N1—C5	37.6 (5)	C14—C15—C16—Ir1	61.3 (2)
C13—Ir1—N1—C5	70.9 (4)	C20—C15—C16—Ir1	-123.0 (4)
C16—Ir1—N1—C5	120.2 (4)	C13—C12—C16— C15	-3.3 (4)
C11—Ir1—N1—C5	-56.6 (4)	C17—C12—C16— C15	-173.3 (4)
N3—Ir1—N1—N2	31.3 (2)	Ir1—C12—C16—C15	59.5 (2)
C14—Ir1—N1—N2	-147.5 (2)	C13—C12—C16— C21	175.1 (4)
C12—Ir1—N1—N2	-76.8 (3)	C17—C12—C16— C21	5.1 (6)
C15—Ir1—N1—N2	-147.1 (3)	Ir1—C12—C16—C21	-122.1 (4)
C13—Ir1—N1—N2	-113.8 (3)	C13—C12—C16—Ir1	-62.8 (3)
C16—Ir1—N1—N2	-64.5 (3)	C17—C12—C16—Ir1	127.2 (4)
C11—Ir1—N1—N2	118.7 (2)	N1—Ir1—C16—C15	-138.8 (2)
C5—N1—N2—C3	0.6 (4)	N3—Ir1—C16—C15	128.5 (2)
Ir1—N1—N2—C3	-175.8 (2)	C14—Ir1—C16—C15	-38.7 (2)
C5—N1—N2—C1	-175.4 (3)	C12—Ir1—C16—C15	-119.9 (3)
Ir1—N1—N2—C1	8.1 (4)	C13—Ir1—C16—C15	-81.6 (2)
N1—Ir1—N3—C10	143.5 (3)	C11—Ir1—C16—C15	37.2 (3)
C14—Ir1—N3—C10	-39.3 (5)	N1—Ir1—C16—C12	-18.9 (3)
C12—Ir1—N3—C10	-108.3 (3)	N3—Ir1—C16—C12	-111.6 (2)
C15—Ir1—N3—C10	-37.3 (4)	C14—Ir1—C16—C12	81.2 (2)
C13—Ir1—N3—C10	-122.7 (4)	C15—Ir1—C16—C12	119.9 (3)
C16—Ir1—N3—C10	-70.6 (4)	C13—Ir1—C16—C12	38.3 (2)
C11—Ir1—N3—C10	55.7 (3)	C11—Ir1—C16—C12	157.08 (18)
N1—Ir1—N3—N4	-29.2 (2)	N1—Ir1—C16—C21	99.0 (5)
C14—Ir1—N3—N4	148.1 (3)	N3—Ir1—C16—C21	6.4 (4)
C12—Ir1—N3—N4	79.0 (3)	C14—Ir1—C16—C21	-160.9 (5)
C15—Ir1—N3—N4	150.1 (2)	C12—Ir1—C16—C21	118.0 (5)
C13—Ir1—N3—N4	64.7 (3)	C15—Ir1—C16—C21	-122.1 (5)

C16—Ir1—N3—N4	116.7 (3)	C13—Ir1—C16—C21	156.3 (5)
C11—Ir1—N3—N4	-116.9 (2)	C11—Ir1—C16—C21	-85.0 (4)
C10—N3—N4—C8	-0.3 (4)	C24—Ir2—C22—C23	-36.6 (3)
Ir1—N3—N4—C8	174.1 (2)	C26—Ir2—C22—C23	-116.8 (4)
C10—N3—N4—C1	173.5 (3)	C25—Ir2—C22—C23	-79.9 (3)
Ir1—N3—N4—C1	-12.1 (4)	C14—Ir2—C22—C23	-101.7 (4)
C3—N2—C1—N4	120.5 (3)	C12—Ir2—C22—C23	61.1 (3)
N1—N2—C1—N4	-64.3 (4)	C13—Ir2—C22—C23	154.2 (2)
C8—N4—C1—N2	-120.7 (3)	C24—Ir2—C22—C26	80.3 (3)
N3—N4—C1—N2	66.7 (4)	C23—Ir2—C22—C26	116.8 (4)
N1—N2—C3—C4	-1.0 (4)	C25—Ir2—C22—C26	36.9 (3)
C1—N2—C3—C4	174.5 (3)	C14—Ir2—C22—C26	15.1 (5)
N1—N2—C3—C2	176.5 (3)	C12—Ir2—C22—C26	177.9 (2)
C1—N2—C3—C2	-7.9 (5)	C13—Ir2—C22—C26	-89.0 (2)
N2—C3—C4—C5	1.0 (4)	C24—Ir2—C22—C27	-158.4 (6)
C2—C3—C4—C5	-176.2 (4)	C26—Ir2—C22—C27	121.3 (6)
N2—N1—C5—C4	0.0 (4)	C23—Ir2—C22—C27	-121.9 (6)
Ir1—N1—C5—C4	175.9 (3)	C25—Ir2—C22—C27	158.2 (6)
N2—N1—C5—C6	-178.5 (4)	C14—Ir2—C22—C27	136.5 (4)
Ir1—N1—C5—C6	-2.7 (6)	C12—Ir2—C22—C27	-60.8 (5)
C3—C4—C5—N1	-0.7 (5)	C13—Ir2—C22—C27	32.3 (5)
C3—C4—C5—C6	177.8 (4)	C26—C22—C23— C24	-2.1 (4)
N3—N4—C8—C9	0.5 (4)	C27—C22—C23— C24	-179.3 (4)
C1—N4—C8—C9	-172.5 (3)	Ir2—C22—C23—C24	59.4 (3)
N3—N4—C8—C7	-178.0 (3)	C26—C22—C23— C28	176.9 (4)
C1—N4—C8—C7	8.9 (5)	C27—C22—C23— C28	-0.3 (7)
N4—C8—C9—C10	-0.5 (4)	Ir2—C22—C23—C28	-121.6 (4)
C7—C8—C9—C10	177.9 (4)	C26—C22—C23—Ir2	-61.5 (3)
N4—N3—C10—C9	0.0 (4)	C27—C22—C23—Ir2	121.3 (5)
Ir1—N3—C10—C9	-173.4 (2)	C22—Ir2—C23—C24	-120.2 (4)
N4—N3—C10—C11	179.3 (4)	C26—Ir2—C23—C24	-81.7 (3)
Ir1—N3—C10—C11	6.0 (6)	C25—Ir2—C23—C24	-38.7 (2)
C8—C9—C10—N3	0.3 (4)	C14—Ir2—C23—C24	25.2 (3)
C8—C9—C10—C11	-179.0 (4)	C12—Ir2—C23—C24	113.4 (2)
N1—Ir1—C12—C13	-74.7 (2)	C13—Ir2—C23—C24	-155.13 (19)
N3—Ir1—C12—C13	-166.8 (2)	C24—Ir2—C23—C22	120.2 (4)
C14—Ir1—C12—C13	36.4 (2)	C26—Ir2—C23—C22	38.5 (3)
C15—Ir1—C12—C13	80.0 (2)	C25—Ir2—C23—C22	81.4 (3)
C16—Ir1—C12—C13	116.3 (3)	C14—Ir2—C23—C22	145.4 (2)

Cl1—Ir1—C12—C13	59.9 (4)	Cl2—Ir2—C23—C22	-126.4 (3)
N1—Ir1—C12—C16	169.0 (2)	Cl3—Ir2—C23—C22	-35.0 (3)
N3—Ir1—C12—C16	76.8 (2)	C24—Ir2—C23—C28	-118.9 (5)
C14—Ir1—C12—C16	-79.9 (2)	C22—Ir2—C23—C28	121.0 (5)
C15—Ir1—C12—C16	-36.3 (2)	C26—Ir2—C23—C28	159.4 (5)
C13—Ir1—C12—C16	-116.3 (3)	C25—Ir2—C23—C28	-157.6 (5)
Cl1—Ir1—C12—C16	-56.4 (4)	Cl4—Ir2—C23—C28	-93.6 (4)
N1—Ir1—C12—C17	47.9 (5)	Cl2—Ir2—C23—C28	-5.4 (4)
N3—Ir1—C12—C17	-44.2 (5)	Cl3—Ir2—C23—C28	86.0 (4)
C14—Ir1—C12—C17	159.1 (6)	C22—C23—C24— C25	2.6 (4)
C15—Ir1—C12—C17	-157.3 (6)	C28—C23—C24— C25	-176.4 (4)
C13—Ir1—C12—C17	122.6 (6)	Ir2—C23—C24—C25	62.1 (2)
C16—Ir1—C12—C17	-121.0 (6)	C22—C23—C24— C29	177.7 (4)
Cl1—Ir1—C12—C17	-177.5 (4)	C28—C23—C24— C29	-1.4 (6)
C16—C12—C13— C14	3.4 (4)	Ir2—C23—C24—C29	-122.9 (4)
C17—C12—C13— C14	173.3 (4)	C22—C23—C24—Ir2	-59.5 (3)
Ir1—C12—C13—C14	-59.5 (3)	C28—C23—C24—Ir2	121.5 (4)
C16—C12—C13— C18	-175.8 (4)	C22—Ir2—C24—C23	36.6 (3)
C17—C12—C13— C18	-6.0 (6)	C26—Ir2—C24—C23	79.7 (3)
Ir1—C12—C13—C18	121.3 (4)	C25—Ir2—C24—C23	116.7 (3)
C16—C12—C13—Ir1	62.9 (2)	Cl4—Ir2—C24—C23	-163.7 (2)
C17—C12—C13—Ir1	-127.2 (4)	Cl2—Ir2—C24—C23	-72.3 (2)
N1—Ir1—C13—C12	113.2 (2)	Cl3—Ir2—C24—C23	69.9 (4)
N3—Ir1—C13—C12	22.2 (3)	C22—Ir2—C24—C25	-80.1 (3)
C14—Ir1—C13—C12	-120.0 (3)	C26—Ir2—C24—C25	-37.0 (3)
C15—Ir1—C13—C12	-81.2 (2)	C23—Ir2—C24—C25	-116.7 (3)
C16—Ir1—C13—C12	-38.5 (2)	Cl4—Ir2—C24—C25	79.6 (2)
Cl1—Ir1—C13—C12	-155.78 (18)	Cl2—Ir2—C24—C25	171.1 (2)
N1—Ir1—C13—C14	-126.8 (2)	Cl3—Ir2—C24—C25	-46.8 (5)
N3—Ir1—C13—C14	142.2 (2)	C22—Ir2—C24—C29	157.1 (5)
C12—Ir1—C13—C14	120.0 (3)	C26—Ir2—C24—C29	-159.8 (5)
C15—Ir1—C13—C14	38.8 (2)	C23—Ir2—C24—C29	120.5 (5)
C16—Ir1—C13—C14	81.4 (2)	C25—Ir2—C24—C29	-122.8 (5)
Cl1—Ir1—C13—C14	-35.8 (3)	Cl4—Ir2—C24—C29	-43.1 (4)
N1—Ir1—C13—C18	-4.5 (5)	Cl2—Ir2—C24—C29	48.3 (4)
N3—Ir1—C13—C18	-95.5 (5)	Cl3—Ir2—C24—C29	-169.6 (3)

C14—Ir1—C13—C18	122.3 (6)	C23—C24—C25— C26	-2.1 (4)
C12—Ir1—C13—C18	-117.7 (5)	C29—C24—C25— C26	-177.0 (4)
C15—Ir1—C13—C18	161.0 (5)	Ir2—C24—C25—C26	59.9 (3)
C16—Ir1—C13—C18	-156.3 (5)	C23—C24—C25— C30	177.5 (4)
C11—Ir1—C13—C18	86.5 (5)	C29—C24—C25— C30	2.5 (6)
C12—C13—C14— C15	-2.3 (4)	Ir2—C24—C25—C30	-120.6 (4)
C18—C13—C14— C15	176.9 (4)	C23—C24—C25—Ir2	-62.0 (2)
Ir1—C13—C14—C15	-61.9 (2)	C29—C24—C25—Ir2	123.1 (4)
C12—C13—C14— C19	-177.8 (4)	C24—Ir2—C25—C26	-118.9 (4)
C18—C13—C14— C19	1.4 (6)	C22—Ir2—C25—C26	-37.3 (3)
Ir1—C13—C14—C19	122.6 (4)	C23—Ir2—C25—C26	-80.5 (3)
C12—C13—C14—Ir1	59.6 (3)	C14—Ir2—C25—C26	134.8 (3)
C18—C13—C14—Ir1	-121.2 (4)	C12—Ir2—C25—C26	-133.8 (3)
N1—Ir1—C14—C13	62.8 (3)	C13—Ir2—C25—C26	43.5 (3)
N3—Ir1—C14—C13	-114.1 (3)	C22—Ir2—C25—C24	81.6 (3)
C12—Ir1—C14—C13	-36.4 (2)	C26—Ir2—C25—C24	118.9 (4)
C15—Ir1—C14—C13	-116.9 (3)	C23—Ir2—C25—C24	38.4 (2)
C16—Ir1—C14—C13	-79.2 (3)	C14—Ir2—C25—C24	-106.3 (2)
C11—Ir1—C14—C13	152.3 (2)	C12—Ir2—C25—C24	-14.9 (4)
N1—Ir1—C14—C15	179.70 (18)	C13—Ir2—C25—C24	162.4 (2)
N3—Ir1—C14—C15	2.8 (4)	C24—Ir2—C25—C30	119.8 (6)
C12—Ir1—C14—C15	80.5 (2)	C22—Ir2—C25—C30	-158.5 (5)
C13—Ir1—C14—C15	116.9 (3)	C26—Ir2—C25—C30	-121.3 (6)
C16—Ir1—C14—C15	37.7 (2)	C23—Ir2—C25—C30	158.2 (5)
C11—Ir1—C14—C15	-90.85 (19)	C14—Ir2—C25—C30	13.5 (5)
N1—Ir1—C14—C19	-59.7 (4)	C12—Ir2—C25—C30	104.9 (4)
N3—Ir1—C14—C19	123.4 (4)	C13—Ir2—C25—C30	-77.7 (5)
C12—Ir1—C14—C19	-158.9 (4)	C24—C25—C26— C22	0.8 (4)
C15—Ir1—C14—C19	120.6 (4)	C30—C25—C26— C22	-178.7 (4)
C13—Ir1—C14—C19	-122.5 (5)	Ir2—C25—C26—C22	60.3 (3)
C16—Ir1—C14—C19	158.3 (4)	C24—C25—C26— C31	177.1 (4)
C11—Ir1—C14—C19	29.8 (3)	C30—C25—C26— C31	-2.5 (7)
C13—C14—C15— C16	0.2 (4)	Ir2—C25—C26—C31	-123.4 (4)

C19—C14—C15— C16	175.8 (3)	C24—C25—C26—Ir2	-59.5 (3)
Ir1—C14—C15—C16	-62.3 (2)	C30—C25—C26—Ir2	120.9 (4)
C13—C14—C15— C20	-175.8 (3)	C23—C22—C26— C25	0.8 (4)
C19—C14—C15— C20	-0.2 (6)	C27—C22—C26— C25	178.0 (4)
Ir1—C14—C15—C20	121.8 (4)	Ir2—C22—C26—C25	-60.8 (3)
C13—C14—C15—Ir1	62.4 (2)	C23—C22—C26— C31	-175.4 (4)
C19—C14—C15—Ir1	-121.9 (4)	C27—C22—C26— C31	1.8 (7)
N1—Ir1—C15—C16	116.3 (3)	Ir2—C22—C26—C31	122.9 (4)
N3—Ir1—C15—C16	-61.8 (3)	C23—C22—C26—Ir2	61.6 (3)
C14—Ir1—C15—C16	117.0 (3)	C27—C22—C26—Ir2	-121.2 (5)
C12—Ir1—C15—C16	36.6 (2)	C24—Ir2—C26—C25	37.6 (3)
C13—Ir1—C15—C16	79.1 (3)	C22—Ir2—C26—C25	119.2 (4)
Cl1—Ir1—C15—C16	-150.9 (2)	C23—Ir2—C26—C25	80.8 (3)
N1—Ir1—C15—C14	-0.6 (4)	Cl4—Ir2—C26—C25	-54.4 (3)
N3—Ir1—C15—C14	-178.79 (19)	Cl2—Ir2—C26—C25	114.9 (3)
C12—Ir1—C15—C14	-80.4 (2)	Cl3—Ir2—C26—C25	-145.7 (2)
C13—Ir1—C15—C14	-37.8 (2)	C24—Ir2—C26—C22	-81.6 (3)
C16—Ir1—C15—C14	-117.0 (3)	C23—Ir2—C26—C22	-38.4 (3)
Cl1—Ir1—C15—C14	92.17 (19)	C25—Ir2—C26—C22	-119.2 (4)
N1—Ir1—C15—C20	-119.5 (4)	Cl4—Ir2—C26—C22	-173.6 (2)
N3—Ir1—C15—C20	62.3 (4)	Cl2—Ir2—C26—C22	-4.2 (4)
C14—Ir1—C15—C20	-118.9 (4)	Cl3—Ir2—C26—C22	95.1 (2)
C12—Ir1—C15—C20	160.8 (4)	C24—Ir2—C26—C31	158.1 (6)
C13—Ir1—C15—C20	-156.7 (4)	C22—Ir2—C26—C31	-120.3 (7)
C16—Ir1—C15—C20	124.2 (4)	C23—Ir2—C26—C31	-158.7 (6)
Cl1—Ir1—C15—C20	-26.7 (3)	C25—Ir2—C26—C31	120.5 (7)
C14—C15—C16— C12	1.9 (4)	Cl4—Ir2—C26—C31	66.1 (6)
C20—C15—C16— C12	177.7 (4)	Cl2—Ir2—C26—C31	-124.6 (5)
Ir1—C15—C16—C12	-59.3 (2)	Cl3—Ir2—C26—C31	-25.2 (6)