

# Appendix

**A. Cut off solvents****Table 37** Solvents for UV-Visible spectrum and the minimum values for measurement

Solvents	$\lambda$ (nm)
CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	230
DMF	270
DMSO	265
EtOH	195
MeOH	195
CH <sub>3</sub> CN	195

**B. Bond distances (Å) and bond angles (°)**

**Table 38** Bond distances (Å) and bond angles (°) of the diazpy ligand

Bond distances

Atoms	(Angstroms)
N(3A)-C(7A)	1.327(2)
N(3A)-C(11A)	1.335(2)
N(3B)-C(11B)	1.328(2)
N(3B)-C(7B)	1.332(2)
N(4B)-N(5B)	1.243(2)
N(4B)-C(11B)	1.442(2)
N(2B)-N(1B)	1.239(2)
N(2B)-C(7B)	1.435(2)
N(4A)-N(5A)	1.240(2)
N(4A)-C(11A)	1.432(2)
N(2A)-N(1A)	1.246(2)
N(2A)-C(7A)	1.437(2)
C(7A)-C(8A)	1.382(3)
N(5A)-C(12A)	1.433(3)
N(1B)-C(1B)	1.430(3)
N(5B)-C(12B)	1.421(3)
C(11A)-C(10A)	1.388(3)
C(11B)-C(10B)	1.387(3)
N(1A)-C(1A)	1.422(3)
C(7B)-C(8B)	1.388(3)

Table 38 (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(12B)-C(13B)	1.378(3)
C(12B)-C(17B)	1.384(3)
C(12A)-C(13A)	1.377(3)
C(12A)-C(17A)	1.381(3)
C(1A)-C(2A)	1.377(3)
C(1A)-C(6A)	1.380(3)
C(17B)-C(16B)	1.371(3)
C(17B)-H(17B)	0.930
C(8A)-C(9A)	1.370(3)
C(8A)-H(8A)	0.930
C(8B)-C(9B)	1.364(3)
C(8B)-H(8B)	0.930
C(1B)-C(2B)	1.379(3)
C(1B)-C(6B)	1.377(3)
C(10A)-C(9A)	1.373(3)
C(10A)-H(10A)	0.930
C(17A)-C(16A)	1.388(3)
C(17A)-H(17A)	0.930
C(13A)-C(14A)	1.378(3)
C(13A)-H(13A)	0.9300
C(10B)-C(9B)	1.366(3)
C(10B)-H(10B)	0.930
C(13B)-C(14B)	1.376(3)
C(13B)-H(13B)	0.930

**Table 38** (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(9A)-H(9A)	0.930
C(6B)-C(5B)	1.384(4)
C(6B)-H(6B)	0.930
C(2B)-C(3B)	1.375(3)
C(2B)-H(2B)	0.930
C(16B)-C(15B)	1.367(3)
C(16B)-H(16B)	0.930
C(6A)-C(5A)	1.373(4)
C(6A)-H(6A)	0.930
C(2A)-C(3A)	1.371(3)
C(2A)-H(2A)	0.930
C(14A)-C(15A)	1.369(4)
C(14A)-H(14A)	0.930
C(9B)-H(9B)	0.930
C(15A)-C(16A)	1.360(4)
C(15A)-H(15A)	0.930
C(15B)-C(14B)	1.373(4)
C(15B)-H(15B)	0.930
C(16A)-H(16A)	0.930
C(3B)-C(4B)	1.363(4)
C(3B)-H(3B)	0.930
C(5A)-C(4A)	1.364(4)
C(5A)-H(5A)	0.930
C(14B)-H(14B)	0.930

**Table 38** (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(4B)-C(5B)	1.369(4)
C(4B)-H(4B)	0.930
C(5B)-H(5B)	0.930
C(3A)-C(4A)	1.369(4)
C(3A)-H(3A)	0.930
C(4A)-H(4A)	0.930

**Table 38** (continued)Bond angle (°)

Atoms	Angle (°)
C(7A)-N(3A)-C(11A)	117.26(17)
C(11B)-N(3B)-C(7B)	116.96(17)
N(5B)-N(4B)-C(11B)	112.87(17)
N(1B)-N(2B)-C(7B)	113.25(17)
N(5A)-N(4A)-C(11A)	113.24(17)
N(1A)-N(2A)-C(7A)	112.84(17)
N(3A)-C(7A)-C(8A)	123.74(19)
N(3A)-C(7A)-N(2A)	112.04(16)
C(8A)-C(7A)-N(2A)	124.20(19)
N(4A)-N(5A)-C(12A)	114.87(18)
N(2B)-N(1B)-C(1B)	114.89(19)
N(4B)-N(5B)-C(12B)	114.41(17)
N(3A)-C(11A)-C(10A)	123.30(19)
N(3A)-C(11A)-N(4A)	112.21(16)
C(10A)-C(11A)-N(4A)	124.47(19)
N(3B)-C(11B)-C(10B)	123.67(19)
N(3B)-C(11B)-N(4B)	112.19(16)
C(10B)-C(11B)-N(4B)	124.14(19)
N(2A)-N(1A)-C(1A)	114.46(18)
N(3B)-C(7B)-C(8B)	123.45(19)
N(3B)-C(7B)-N(2B)	112.27(17)
C(8B)-C(7B)-N(2B)	124.28(19)

**Table 38** (continued)

Atoms	Angle (°)
C(13B)-C(12B)-C(17B)	119.60(2)
C(13B)-C(12B)-N(5B)	124.74(19)
C(17B)-C(12B)-N(5B)	115.70(2)
C(13A)-C(12A)-C(17A)	120.50(2)
C(13A)-C(12A)-N(5A)	124.40(2)
C(17A)-C(12A)-N(5A)	115.10(2)
C(2A)-C(1A)-C(6A)	119.70(2)
C(2A)-C(1A)-N(1A)	124.90(2)
C(6A)-C(1A)-N(1A)	115.50(2)
C(16B)-C(17B)-C(12B)	120.20(2)
C(16B)-C(17B)-H(17B)	119.90
C(12B)-C(17B)-H(17B)	119.90
C(9A)-C(8A)-C(7A)	117.80(2)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.10
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.10
C(9B)-C(8B)-C(7B)	117.90(2)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.00
C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.00
C(2B)-C(1B)-C(6B)	120.30(2)
C(2B)-C(1B)-N(1B)	124.40(2)
C(6B)-C(1B)-N(1B)	115.40(2)
C(9A)-C(10A)-C(11A)	117.70(2)
C(9A)-C(10A)-H(10A)	121.20
C(11A)-C(10A)-H(10A)	121.20



**Table 38** (continued)

Atoms	Angle (°)
C(12A)-C(17A)-C(16A)	119.40(3)
C(12A)-C(17A)-H(17A)	120.30
C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.30
C(14A)-C(13A)-C(12A)	119.00(2)
C(14A)-C(13A)-H(13A)	120.50
C(12A)-C(13A)-H(13A)	120.50
C(9B)-C(10B)-C(11B)	117.80(2)
C(9B)-C(10B)-H(10B)	121.10
C(11B)-C(10B)-H(10B)	121.10
C(14B)-C(13B)-C(12B)	119.50(2)
C(14B)-C(13B)-H(13B)	120.30
C(12B)-C(13B)-H(13B)	120.30
C(10A)-C(9A)-C(8A)	120.20(2)
C(10A)-C(9A)-H(9A)	119.90
C(8A)-C(9A)-H(9A)	119.90
C(5B)-C(6B)-C(1B)	119.80(3)
C(5B)-C(6B)-H(6B)	120.10
C(1B)-C(6B)-H(6B)	120.10
C(3B)-C(2B)-C(1B)	119.10(2)
C(3B)-C(2B)-H(2B)	120.40
C(1B)-C(2B)-H(2B)	120.40
C(15B)-C(16B)-C(17B)	120.30(2)
C(15B)-C(16B)-H(16B)	119.90
C(17B)-C(16B)-H(16B)	119.90

Table 38 (continued)

Atoms	Angle (°)
C(5A)-C(6A)-C(1A)	120.00(3)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	120.00
C(1A)-C(6A)-H(6A)	120.00
C(3A)-C(2A)-C(1A)	119.70(2)
C(3A)-C(2A)-H(2A)	120.20
C(1A)-C(2A)-H(2A)	120.20
C(15A)-C(14A)-C(13A)	120.80(3)
C(15A)-C(14A)-H(14A)	119.60
C(13A)-C(14A)-H(14A)	119.60
C(8B)-C(9B)-C(10B)	120.20(2)
C(8B)-C(9B)-H(9B)	119.90
C(10B)-C(9B)-H(9B)	119.90
C(16A)-C(15A)-C(14A)	120.40(3)
C(16A)-C(15A)-H(15A)	119.80
C(14A)-C(15A)-H(15A)	119.80
C(16B)-C(15B)-C(14B)	119.70(3)
C(16B)-C(15B)-H(15B)	120.10
C(14B)-C(15B)-H(15B)	120.10
C(15A)-C(16A)-C(17A)	119.90(3)
C(15A)-C(16A)-H(16A)	120.10
C(17A)-C(16A)-H(16A)	120.10
C(4B)-C(3B)-C(2B)	120.90(3)
C(4B)-C(3B)-H(3B)	119.60
C(2B)-C(3B)-H(3B)	119.60

**Table 38** (continued)

Atoms	Angle (°)
C(4A)-C(5A)-C(6A)	120.20(3)
C(4A)-C(5A)-H(5A)	119.90
C(6A)-C(5A)-H(5A)	119.90
C(15B)-C(14B)-C(13B)	120.80(3)
C(15B)-C(14B)-H(14B)	119.60
C(13B)-C(14B)-H(14B)	119.60
C(3B)-C(4B)-C(5B)	120.30(3)
C(3B)-C(4B)-H(4B)	119.80
C(5B)-C(4B)-H(4B)	119.80
C(4B)-C(5B)-C(6B)	119.70(3)
C(4B)-C(5B)-H(5B)	120.20
C(6B)-C(5B)-H(5B)	120.20
C(4A)-C(3A)-C(2A)	120.60(3)
C(4A)-C(3A)-H(3A)	119.70
C(2A)-C(3A)-H(3A)	119.70
C(5A)-C(4A)-C(3A)	119.90(3)
C(5A)-C(4A)-H(4A)	120.00
C(3A)-C(4A)-H(4A)	120.00

**Table 39** Bond distances (Å) and bond angles (°) of the  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{bpy})_2](\text{BF}_4)_2$  complex

Bond distances

Atoms	(Angstroms)
F(15)-B(4)	1.273(19)
B(4)-F(25)	1.282(18)
B(4)-F(13)	1.378(19)
B(4)-F(14)	1.353(16)
Ru(1A)-N(5A)	1.910(11)
Ru(1A)-N(7A)	2.060(10)
Ru(1A)-N(2A)	2.081(8)
Ru(1A)-N(4A)	2.092(9)
Ru(1A)-N(1A)	2.109(9)
Ru(1A)-N(3A)	2.109(9)
N(5A)-N(6A)	1.362(13)
N(5A)-C(21A)	1.387(14)
N(7A)-C(27A)	1.364(14)
N(7A)-C(31A)	1.409(13)
N(1A)-C(1A)	1.331(14)
N(1A)-C(5A)	1.346(14)
N(3A)-C(15A)	1.319(15)
N(3A)-C(11A)	1.366(13)
N(2A)-C(6A)	1.336(13)
N(2A)-C(10A)	1.342(13)
N(8A)-N(9A)	1.287(13)

Table 39 (continued)

Atoms	(Angstroms)
N(8A)-C(31A)	1.343(14)
N(9A)-C(32A)	1.404(15)
N(4A)-C(20A)	1.319(13)
N(4A)-C(16A)	1.397(14)
N(6A)-C(27A)	1.500(14)
C(21A)-C(22A)	1.332(15)
C(21A)-C(26A)	1.371(16)
C(6A)-C(7A)	1.324(16)
C(6A)-C(5A)	1.508(15)
C(22A)-C(23A)	1.369(16)
C(22A)-H(22A)	0.930
C(32A)-C(37A)	1.330(17)
C(32A)-C(33A)	1.412(15)
C(5A)-C(4A)	1.338(15)
C(31A)-C(30A)	1.371(15)
C(27A)-C(28A)	1.367(14)
C(15A)-C(14A)	1.413(16)
C(15A)-C(16A)	1.502(17)
C(16A)-C(17A)	1.406(17)
C(19A)-C(20A)	1.307(16)
C(19A)-C(18A)	1.37(2)
C(19A)-H(19A)	0.930
C(30A)-C(29A)	1.391(18)
C(30A)-H(30A)	0.930

Table 39 (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(33A)-C(34A)	1.383(18)
C(33A)-H(33A)	0.930
C(12A)-C(11A)	1.356(18)
C(12A)-C(13A)	1.410(2)
C(12A)-H(12A)	0.930
C(10A)-C(9A)	1.393(16)
C(10A)-H(10A)	0.9300
C(26A)-C(25A)	1.449(15)
C(26A)-H(26A)	0.930
C(29A)-C(28A)	1.366(16)
C(29A)-H(29A)	0.9300
B(2)-F(8)	1.300(14)
B(2)-F(7)	1.325(16)
B(2)-F(6)	1.386(16)
B(2)-F(5)	1.459(15)
C(2A)-C(3A)	1.334(19)
C(2A)-C(1A)	1.367(17)
C(2A)-H(2A)	0.930
C(4A)-C(3A)	1.424(17)
C(4A)-H(4A)	0.930
C(11A)-H(11A)	0.930
C(28A)-H(28A)	0.930
C(23A)-C(24A)	1.350(2)
C(23A)-H(23A)	0.930

Table 39 (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(13A)-C(14A)	1.310(19)
C(13A)-H(13A)	0.930
C(7A)-C(8A)	1.301(18)
C(7A)-H(7A)	0.930
C(37A)-C(36A)	1.388(19)
C(37A)-H(37A)	0.930
C(1A)-H(1A)	0.930
C(9A)-C(8A)	1.423(18)
C(9A)-H(9A)	0.930
C(3A)-H(3A)	0.930
C(17A)-C(18A)	1.330(2)
C(17A)-H(17A)	0.930
C(34A)-C(35A)	1.350(2)
C(34A)-H(34A)	0.930
C(25A)-C(24A)	1.356(19)
C(25A)-H(25A)	0.930
C(18A)-H(18A)	0.930
C(20A)-H(20A)	0.930
C(24A)-H(24A)	0.930
C(14A)-H(14A)	0.930
C(8A)-H(8A)	0.930
C(35A)-C(36A)	1.354(19)
C(35A)-H(35A)	0.930
C(36A)-H(36A)	0.930

**Table 39** (continued)

Atoms	(Angstroms)
Ru(1B)-N(1B)	1.993(9)
Ru(1B)-N(5B)	2.007(8)
Ru(1B)-N(2B)	2.046(9)
Ru(1B)-N(3B)	2.059(8)
Ru(1B)-N(7B)	2.093(8)
Ru(1B)-N(4B)	2.125(9)
N(1B)-C(1B)	1.334(15)
N(1B)-C(5B)	1.380(13)
N(5B)-N(6B)	1.236(12)
N(5B)-C(21B)	1.516(13)
N(7B)-C(31B)	1.282(14)
N(7B)-C(27B)	1.355(13)
N(2B)-C(10B)	1.342(14)
N(2B)-C(6B)	1.378(14)
N(8B)-N(9B)	1.219(11)
N(8B)-C(31B)	1.501(13)
N(4B)-C(20B)	1.314(16)
N(4B)-C(16B)	1.376(15)
N(3B)-C(15B)	1.325(15)
N(3B)-C(11B)	1.338(15)
N(9B)-C(32B)	1.445(14)
N(6B)-C(27B)	1.281(13)
C(6B)-C(7B)	1.420(14)
C(6B)-C(5B)	1.425(16)



**Table 39** (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(21B)-C(26B)	1.369(16)
C(21B)-C(22B)	1.440(14)
C(22B)-C(23B)	1.403(14)
C(22B)-H(22B)	0.930
C(32B)-C(37B)	1.362(16)
C(32B)-C(33B)	1.433(18)
C(5B)-C(4B)	1.398(14)
C(27B)-C(28B)	1.405(14)
C(30B)-C(29B)	1.367(18)
C(30B)-C(31B)	1.429(14)
C(30B)-H(30B)	0.930
C(16B)-C(17B)	1.361(18)
C(16B)-C(15B)	1.408(17)
C(34B)-C(33B)	1.359(18)
C(34B)-C(35B)	1.387(18)
C(34B)-H(34B)	0.930
C(10B)-C(9B)	1.358(15)
C(10B)-H(10B)	0.930
C(26B)-C(25B)	1.320(17)
C(26B)-H(26B)	0.930
C(37B)-C(36B)	1.367(16)
C(37B)-H(37B)	0.930
C(15B)-C(14B)	1.343(17)
C(4B)-C(3B)	1.334(18)

**Table 39** (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(4B)-H(4B)	0.930
C(3B)-C(2B)	1.395(16)
C(3B)-H(3B)	0.930
C(7B)-C(8B)	1.452(17)
C(7B)-H(7B)	0.930
C(28B)-C(29B)	1.366(17)
C(28B)-H(28B)	0.930
C(23B)-C(24B)	1.366(17)
C(23B)-H(23B)	0.930
C(2B)-C(1B)	1.374(16)
C(2B)-H(2B)	0.930
C(29B)-H(29B)	0.930
C(9B)-C(8B)	1.303(18)
C(9B)-H(9B)	0.930
C(33B)-H(33B)	0.930
C(14B)-C(13B)	1.40(2)
C(14B)-H(14B)	0.930
C(36B)-C(35B)	1.415(18)
C(36B)-H(36B)	0.930
C(1B)-H(1B)	0.930
C(20B)-C(19B)	1.418(19)
C(20B)-H(20B)	0.930
C(25B)-C(24B)	1.389(19)
C(25B)-H(25B)	0.930

Table 39 (continued)

Atoms	(Angstroms)
C(35B)-H(35B)	0.930
C(13B)-C(12B)	1.370(2)
C(13B)-H(13B)	0.930
C(11B)-C(12B)	1.452(16)
C(11B)-H(11B)	0.930
C(24B)-H(24B)	0.930
C(12B)-H(12B)	0.930
C(17B)-C(18B)	1.440(2)
C(17B)-H(17B)	0.930
C(8B)-H(8B)	0.930
C(19B)-C(18B)	1.330(2)
C(19B)-H(19B)	0.930
C(18B)-H(18B)	0.930
F(4)-B(1)	1.398(15)
F(1)-B(1)	1.340(15)
F(3)-B(1)	1.416(16)
F(2)-B(1)	1.230(15)
F(10)-B(3)	1.341(16)
F(12)-B(3)	1.316(18)
F(11)-B(3)	1.334(17)
B(3)-F(9)	1.400(2)

**Table 39** (continued)Bond angle (°)

Atoms	Angle (°)
F(15)-B(4)-F(25)	115.2(13)
F(15)-B(4)-F(13)	103.5(16)
F(25)-B(4)-F(13)	118.4(15)
F(15)-B(4)-F(14)	104.8(15)
F(25)-B(4)-F(14)	105.9(15)
F(13)-B(4)-F(14)	108.0(11)
N(5A)-Ru(1A)-N(7A)	77.6(4)
N(5A)-Ru(1A)-N(2A)	96.8(4)
N(7A)-Ru(1A)-N(2A)	102.3(3)
N(5A)-Ru(1A)-N(4A)	94.7(4)
N(7A)-Ru(1A)-N(4A)	86.0(3)
N(2A)-Ru(1A)-N(4A)	167.0(3)
N(5A)-Ru(1A)-N(1A)	92.0(4)
N(7A)-Ru(1A)-N(1A)	169.6(4)
N(2A)-Ru(1A)-N(1A)	79.4(4)
N(4A)-Ru(1A)-N(1A)	94.2(4)
N(5A)-Ru(1A)-N(3A)	174.4(4)
N(7A)-Ru(1A)-N(3A)	101.6(3)
N(2A)-Ru(1A)-N(3A)	88.7(3)
N(4A)-Ru(1A)-N(3A)	79.7(4)
N(1A)-Ru(1A)-N(3A)	88.6(4)
N(6A)-N(5A)-C(21A)	107.8(9)

**Table 39** (continued)

Atoms	Angle (°)
N(6A)-N(5A)-Ru(1A)	122.2(8)
C(21A)-N(5A)-Ru(1A)	129.2(8)
C(27A)-N(7A)-C(31A)	113.5(9)
C(27A)-N(7A)-Ru(1A)	113.4(7)
C(31A)-N(7A)-Ru(1A)	30.8(7)
C(1A)-N(1A)-C(5A)	124.9(10)
C(1A)-N(1A)-Ru(1A)	120.8(8)
C(5A)-N(1A)-Ru(1A)	114.3(8)
C(15A)-N(3A)-C(11A)	119.2(9)
C(15A)-N(3A)-Ru(1A)	114.8(8)
C(11A)-N(3A)-Ru(1A)	125.8(7)
C(6A)-N(2A)-C(10A)	120.4(9)
C(6A)-N(2A)-Ru(1A)	114.2(6)
C(10A)-N(2A)-Ru(1A)	124.9(7)
N(9A)-N(8A)-C(31A)	111.2(10)
N(8A)-N(9A)-C(32A)	117.3(10)
C(20A)-N(4A)-C(16A)	119.6(10)
C(20A)-N(4A)-Ru(1A)	127.0(8)
C(16A)-N(4A)-Ru(1A)	113.4(8)
N(5A)-N(6A)-C(27A)	109.2(9)
C(22A)-C(21A)-C(26A)	114.0(11)
C(22A)-C(21A)-N(5A)	123.1(10)
C(26A)-C(21A)-N(5A)	122.9(10)
C(7A)-C(6A)-N(2A)	121.7(10)

**Table 39** (continued)

Atoms	Angle (°)
C(7A)-C(6A)-C(5A)	121.5(10)
N(2A)-C(6A)-C(5A)	116.8(8)
C(21A)-C(22A)-C(23A)	127.7(11)
C(21A)-C(22A)-H(22A)	116.2
C(23A)-C(22A)-H(22A)	116.1
C(37A)-C(32A)-N(9A)	121.0(11)
C(37A)-C(32A)-C(33A)	121.1(11)
N(9A)-C(32A)-C(33A)	117.8(11)
C(4A)-C(5A)-N(1A)	119.1(11)
C(4A)-C(5A)-C(6A)	126.3(10)
N(1A)-C(5A)-C(6A)	114.6(10)
N(8A)-C(31A)-C(30A)	128.8(10)
N(8A)-C(31A)-N(7A)	109.1(9)
C(30A)-C(31A)-N(7A)	121.5(11)
N(7A)-C(27A)-C(28A)	126.5(10)
N(7A)-C(27A)-N(6A)	112.9(9)
C(28A)-C(27A)-N(6A)	120.2(10)
N(3A)-C(15A)-C(14A)	121.4(11)
N(3A)-C(15A)-C(16A)	116.9(10)
C(14A)-C(15A)-C(16A)	121.5(11)
N(4A)-C(16A)-C(17A)	119.1(12)
N(4A)-C(16A)-C(15A)	115.1(10)
C(17A)-C(16A)-C(15A)	125.8(11)
C(20A)-C(19A)-C(18A)	121.5(13)

**Table 39** (continued)

Atoms	Angle (°)
C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.2
C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.3
C(31A)-C(30A)-C(29A)	121.9(12)
C(31A)-C(30A)-H(30A)	119.0
C(29A)-C(30A)-H(30A)	119.0
C(34A)-C(33A)-C(32A)	114.5(12)
C(34A)-C(33A)-H(33A)	122.7
C(32A)-C(33A)-H(33A)	122.8
C(11A)-C(12A)-C(13A)	121.3(14)
C(11A)-C(12A)-H(12A)	119.4
C(13A)-C(12A)-H(12A)	119.3
N(2A)-C(10A)-C(9A)	117.6(11)
N(2A)-C(10A)-H(10A)	121.3
C(9A)-C(10A)-H(10A)	121.1
C(21A)-C(26A)-C(25A)	123.3(12)
C(21A)-C(26A)-H(26A)	118.4
C(25A)-C(26A)-H(26A)	118.3
C(28A)-C(29A)-C(30A)	117.3(11)
C(28A)-C(29A)-H(29A)	121.4
C(30A)-C(29A)-H(29A)	121.3
F(8)-B(2)-F(7)	112.9(11)
F(8)-B(2)-F(6)	106.8(13)
F(7)-B(2)-F(6)	106.3(10)
F(8)-B(2)-F(5)	108.8(10)

Table 39 (continued)

Atoms	Angle (°)
F(7)-B(2)-F(5)	114.7(13)
F(6)-B(2)-F(5)	106.8(9)
C(3A)-C(2A)-C(1A)	121.5(13)
C(3A)-C(2A)-H(2A)	119.2
C(1A)-C(2A)-H(2A)	119.3
C(5A)-C(4A)-C(3A)	117.9(11)
C(5A)-C(4A)-H(4A)	121.1
C(3A)-C(4A)-H(4A)	121.0
N(3A)-C(11A)-C(12A)	119.3(12)
N(3A)-C(11A)-H(11A)	120.4
C(12A)-C(11A)-H(11A)	120.3
C(29A)-C(28A)-C(27A)	118.9(10)
C(29A)-C(28A)-H(28A)	120.5
C(27A)-C(28A)-H(28A)	120.6
C(24A)-C(23A)-C(22A)	115.6(12)
C(24A)-C(23A)-H(23A)	122.2
C(22A)-C(23A)-H(23A)	122.2
C(14A)-C(13A)-C(12A)	116.8(12)
C(14A)-C(13A)-H(13A)	121.6
C(12A)-C(13A)-H(13A)	121.6
C(8A)-C(7A)-C(6A)	123.1(12)
C(8A)-C(7A)-H(7A)	118.5
C(6A)-C(7A)-H(7A)	118.5
C(32A)-C(37A)-C(36A)	119.3(12)



**Table 39** (continued)

Atoms	Angle (°)
C(32A)-C(37A)-H(37A)	120.4
C(36A)-C(37A)-H(37A)	120.3
N(1A)-C(1A)-C(2A)	116.4(12)
N(1A)-C(1A)-H(1A)	121.9
C(2A)-C(1A)-H(1A)	121.7
C(10A)-C(9A)-C(8A)	120.3(12)
C(10A)-C(9A)-H(9A)	119.9
C(8A)-C(9A)-H(9A)	119.9
C(2A)-C(3A)-C(4A)	119.9(11)
C(2A)-C(3A)-H(3A)	120.0
C(4A)-C(3A)-H(3A)	120.0
C(18A)-C(17A)-C(16A)	117.9(14)
C(18A)-C(17A)-H(17A)	121.0
C(16A)-C(17A)-H(17A)	121.1
C(35A)-C(34A)-C(33A)	127.2(13)
C(35A)-C(34A)-H(34A)	116.3
C(33A)-C(34A)-H(34A)	116.5
C(24A)-C(25A)-C(26A)	114.5(12)
C(24A)-C(25A)-H(25A)	122.7
C(26A)-C(25A)-H(25A)	122.8
C(17A)-C(18A)-C(19A)	120.6(13)
C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.7
C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.6
C(19A)-C(20A)-N(4A)	121.3(12)

Table 39 (continued)

Atoms	Angle (°)
C(19A)-C(20A)-H(20A)	119.3
N(4A)-C(20A)-H(20A)	119.4
C(25A)-C(24A)-C(23A)	123.9(14)
C(25A)-C(24A)-H(24A)	117.9
C(23A)-C(24A)-H(24A)	118.2
C(13A)-C(14A)-C(15A)	120.1(12)
C(13A)-C(14A)-H(14A)	120.0
C(15A)-C(14A)-H(14A)	119.9
C(7A)-C(8A)-C(9A)	116.6(11)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.7
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.7
C(34A)-C(35A)-C(36A)	114.1(13)
C(34A)-C(35A)-H(35A)	122.9
C(36A)-C(35A)-H(35A)	123.0
C(35A)-C(36A)-C(37A)	123.6(13)
C(35A)-C(36A)-H(36A)	118.1
C(37A)-C(36A)-H(36A)	118.3
N(1B)-Ru(1B)-N(5B)	96.6(4)
N(1B)-Ru(1B)-N(2B)	78.5(3)
N(5B)-Ru(1B)-N(2B)	98.6(3)
N(1B)-Ru(1B)-N(3B)	95.1(3)
N(5B)-Ru(1B)-N(3B)	94.9(4)
N(2B)-Ru(1B)-N(3B)	165.6(4)
N(1B)-Ru(1B)-N(7B)	170.1(4)

Table 39 (continued)

Atoms	Angle (°)
N(1B)-Ru(1B)-N(7B)	170.1(4)
N(5B)-Ru(1B)-N(7B)	73.7(3)
N(2B)-Ru(1B)-N(7B)	104.7(4)
N(3B)-Ru(1B)-N(7B)	83.9(3)
N(1B)-Ru(1B)-N(4B)	85.3(4)
N(5B)-Ru(1B)-N(4B)	170.6(4)
N(2B)-Ru(1B)-N(4B)	90.8(4)
N(3B)-Ru(1B)-N(4B)	75.7(4)
N(7B)-Ru(1B)-N(4B)	104.0(4)
C(1B)-N(1B)-C(5B)	112.2(10)
C(1B)-N(1B)-Ru(1B)	129.9(8)
C(5B)-N(1B)-Ru(1B)	117.4(7)
N(6B)-N(5B)-C(21B)	114.7(8)
N(6B)-N(5B)-Ru(1B)	121.0(7)
C(21B)-N(5B)-Ru(1B)	123.9(7)
C(31B)-N(7B)-C(27B)	120.3(8)
C(31B)-N(7B)-Ru(1B)	129.8(7)
C(27B)-N(7B)-Ru(1B)	108.9(6)
C(10B)-N(2B)-C(6B)	117.5(10)
C(10B)-N(2B)-Ru(1B)	125.7(8)
C(6B)-N(2B)-Ru(1B)	115.6(7)
N(9B)-N(8B)-C(31B)	115.9(9)
C(20B)-N(4B)-C(16B)	118.5(11)
C(20B)-N(4B)-Ru(1B)	127.1(10)

**Table 39** (continued)

Atoms	Angle (°)
CC(16B)-N(4B)-Ru(1B)	114.3(7)
C(15B)-N(3B)-C(11B)	116.6(10)
C(15B)-N(3B)-Ru(1B)	119.0(7)
C(11B)-N(3B)-Ru(1B)	124.4(8)
N(8B)-N(9B)-C(32B)	108.9(8)
N(5B)-N(6B)-C(27B)	113.2(9)
N(2B)-C(6B)-C(7B)	119.8(11)
N(2B)-C(6B)-C(5B)	114.0(10)
C(7B)-C(6B)-C(5B)	126.2(11)
C(26B)-C(21B)-C(22B)	126.8(11)
C(26B)-C(21B)-N(5B)	119.0(10)
C(22B)-C(21B)-N(5B)	114.2(9)
C(23B)-C(22B)-C(21B)	110.7(9)
C(23B)-C(22B)-H(22B)	124.6
C(21B)-C(22B)-H(22B)	124.6
C(37B)-C(32B)-C(33B)	119.4(12)
C(37B)-C(32B)-N(9B)	127.7(11)
C(33B)-C(32B)-N(9B)	112.8(11)
N(1B)-C(5B)-C(4B)	123.3(11)
N(1B)-C(5B)-C(6B)	114.1(9)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	122.3(11)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	122.3(11)
N(6B)-C(27B)-N(7B)	120.6(8)
N(6B)-C(27B)-C(28B)	119.3(9)

Table 39 (continued)

Atoms	Angle (°)
N(6B)-C(27B)-C(28B)	119.3(9)
N(7B)-C(27B)-C(28B)	120.0(10)
C(29B)-C(30B)-C(31B)	116.7(11)
C(29B)-C(30B)-H(30B)	121.6
C(31B)-C(30B)-H(30B)	121.7
N(7B)-C(31B)-C(30B)	122.9(10)
N(7B)-C(31B)-N(8B)	117.3(9)
C(30B)-C(31B)-N(8B)	119.7(10)
N(4B)-C(16B)-C(17B)	119.4(13)
N(4B)-C(16B)-C(15B)	115.7(9)
C(17B)-C(16B)-C(15B)	124.7(12)
C(33B)-C(34B)-C(35B)	116.7(13)
C(33B)-C(34B)-H(34B)	121.6
C(35B)-C(34B)-H(34B)	121.7
N(2B)-C(10B)-C(9B)	125.5(11)
N(2B)-C(10B)-H(10B)	117.1
C(9B)-C(10B)-H(10B)	117.3
C(25B)-C(26B)-C(21B)	116.0(12)
C(25B)-C(26B)-H(26B)	122.1
C(21B)-C(26B)-H(26B)	122.0
C(32B)-C(37B)-C(36B)	124.6(12)
C(32B)-C(37B)-H(37B)	117.7
C(36B)-C(37B)-H(37B)	117.7
N(3B)-C(15B)-C(14B)	122.9(12)

Table 39 (continued)

Atoms	Angle (°)
N(3B)-C(15B)-C(14B)	122.9(12)
N(3B)-C(15B)-C(16B)	115.2(10)
C(14B)-C(15B)-C(16B)	121.9(13)
C(3B)-C(4B)-C(5B)	120.3(11)
C(3B)-C(4B)-H(4B)	119.9
C(5B)-C(4B)-H(4B)	119.8
C(4B)-C(3B)-C(2B)	119.2(11)
C(4B)-C(3B)-H(3B)	120.4
C(2B)-C(3B)-H(3B)	120.4
C(6B)-C(7B)-C(8B)	117.2(11)
C(6B)-C(7B)-H(7B)	121.4
C(8B)-C(7B)-H(7B)	121.4
C(29B)-C(28B)-C(27B)	118.9(10)
C(29B)-C(28B)-H(28B)	120.5
C(27B)-C(28B)-H(28B)	120.5
C(24B)-C(23B)-C(22B)	124.5(11)
C(24B)-C(23B)-H(23B)	117.8
C(22B)-C(23B)-H(23B)	117.7
C(1B)-C(2B)-C(3B)	116.2(12)
C(1B)-C(2B)-H(2B)	121.9
C(3B)-C(2B)-H(2B)	121.9
C(28B)-C(29B)-C(30B)	120.8(10)
C(28B)-C(29B)-H(29B)	119.5
C(30B)-C(29B)-H(29B)	119.7

Table 39 (continued)

Atoms	Angle (°)
C(30B)-C(29B)-H(29B)	119.7
C(8B)-C(9B)-C(10B)	119.1(11)
C(8B)-C(9B)-H(9B)	120.5
C(10B)-C(9B)-H(9B)	120.4
C(34B)-C(33B)-C(32B)	119.6(13)
C(34B)-C(33B)-H(33B)	120.2
C(32B)-C(33B)-H(33B)	120.1
C(15B)-C(14B)-C(13B)	121.3(14)
C(15B)-C(14B)-H(14B)	119.3
C(13B)-C(14B)-H(14B)	119.4
C(37B)-C(36B)-C(35B)	112.5(12)
C(37B)-C(36B)-H(36B)	123.7
C(35B)-C(36B)-H(36B)	123.8
N(1B)-C(1B)-C(2B)	128.6(12)
N(1B)-C(1B)-H(1B)	115.6
C(2B)-C(1B)-H(1B)	115.8
N(4B)-C(20B)-C(19B)	126.4(13)
N(4B)-C(20B)-H(20B)	116.8
C(19B)-C(20B)-H(20B)	116.8
C(26B)-C(25B)-C(24B)	123.6(12)
C(26B)-C(25B)-H(25B)	118.2
C(24B)-C(25B)-H(25B)	118.2
C(34B)-C(35B)-C(36B)	126.8(12)
C(34B)-C(35B)-C(36B)	126.8(12)

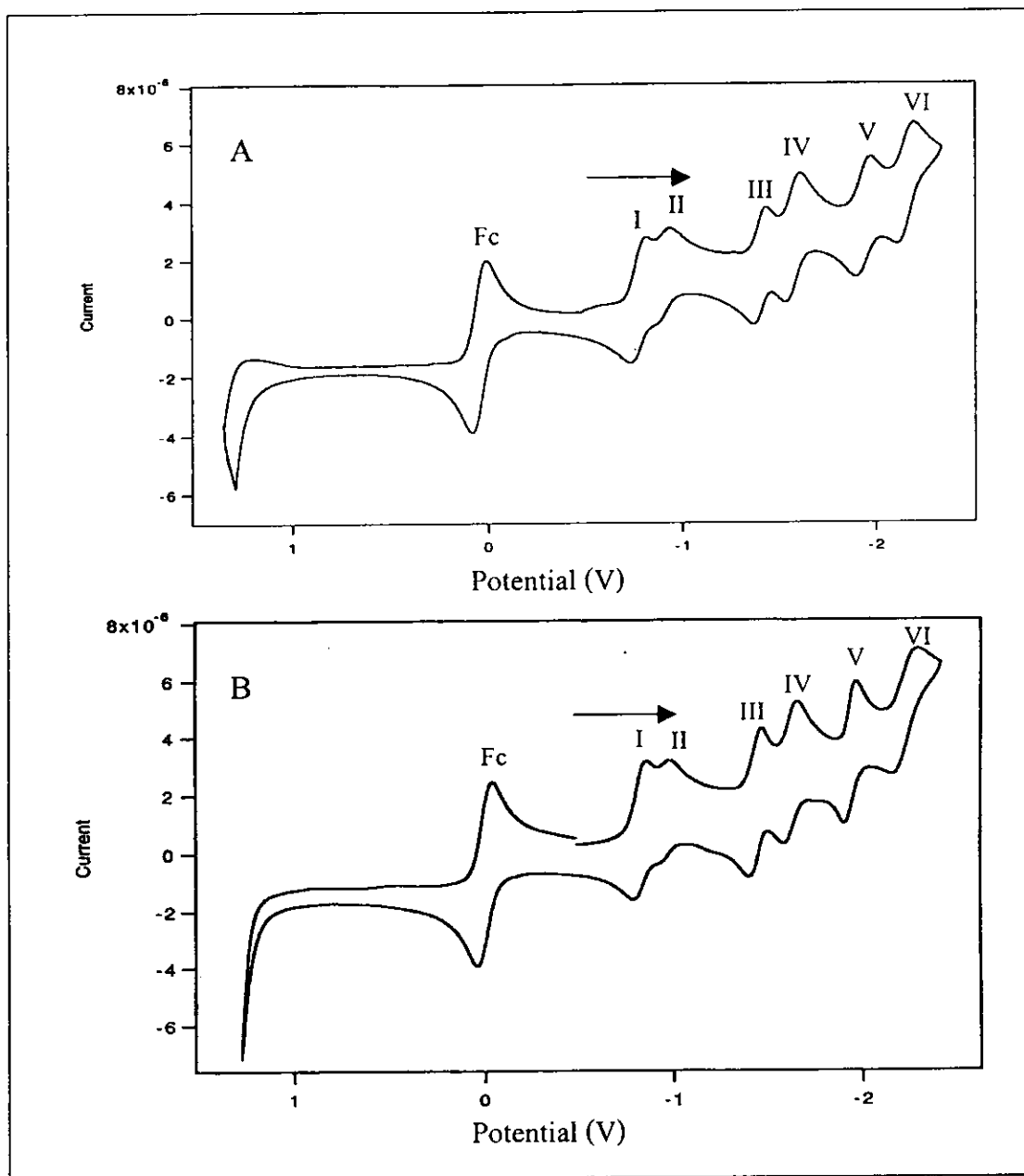
Table 39 (continued)

Atoms	Angle (°)
C(36B)-C(35B)-H(35B)	116.6
C(12B)-C(13B)-C(14B)	119.6(12)
C(12B)-C(13B)-H(13B)	120.3
C(14B)-C(13B)-H(13B)	120.1
N(3B)-C(11B)-C(12B)	125.3(13)
N(3B)-C(11B)-H(11B)	117.3
C(12B)-C(11B)-H(11B)	117.4
C(23B)-C(24B)-C(25B)	117.7(12)
C(23B)-C(24B)-H(24B)	121.0
C(25B)-C(24B)-H(24B)	121.3
C(13B)-C(12B)-C(11B)	114.2(13)
C(13B)-C(12B)-H(12B)	122.8
C(11B)-C(12B)-H(12B)	122.9
C(16B)-C(17B)-C(18B)	118.8(14)
C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.6
C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.5
C(9B)-C(8B)-C(7B)	120.7(11)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	119.7
C(7B)-C(8B)-H(8B)	119.6
C(18B)-C(19B)-C(20B)	113.7(14)
C(18B)-C(19B)-H(19B)	123.2
C(20B)-C(19B)-H(19B)	123.1
C(19B)-C(18B)-C(17B)	121.7(14)
C(19B)-C(18B)-H(18B)	119.1



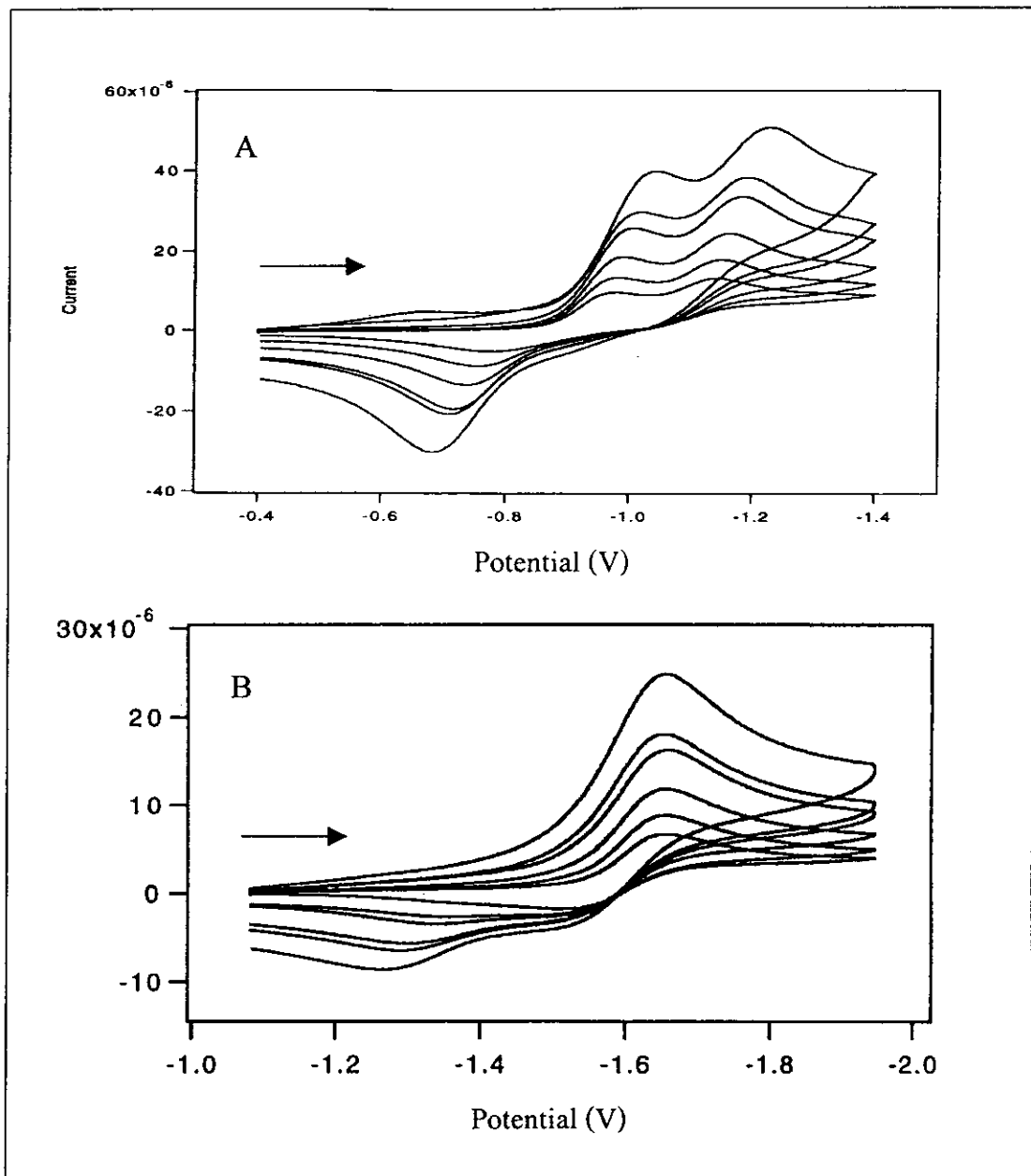
**Table 39** (continued)

Atoms	Angle (°)
C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.2
F(2)-B(1)-F(1)	111.7(14)
F(2)-B(1)-F(4)	104.6(10)
F(1)-B(1)-F(4)	109.3(11)
F(2)-B(1)-F(3)	112.7(12)
F(1)-B(1)-F(3)	113.5(9)
F(4)-B(1)-F(3)	104.3(12)
F(12)-B(3)-F(11)	111.0(14)
F(12)-B(3)-F(10)	114.7(15)
F(11)-B(3)-F(10)	102.3(11)
F(12)-B(3)-F(9)	114.6(13)
F(11)-B(3)-F(9)	102.7(15)
F(10)-B(3)-F(9)	110.2(13)

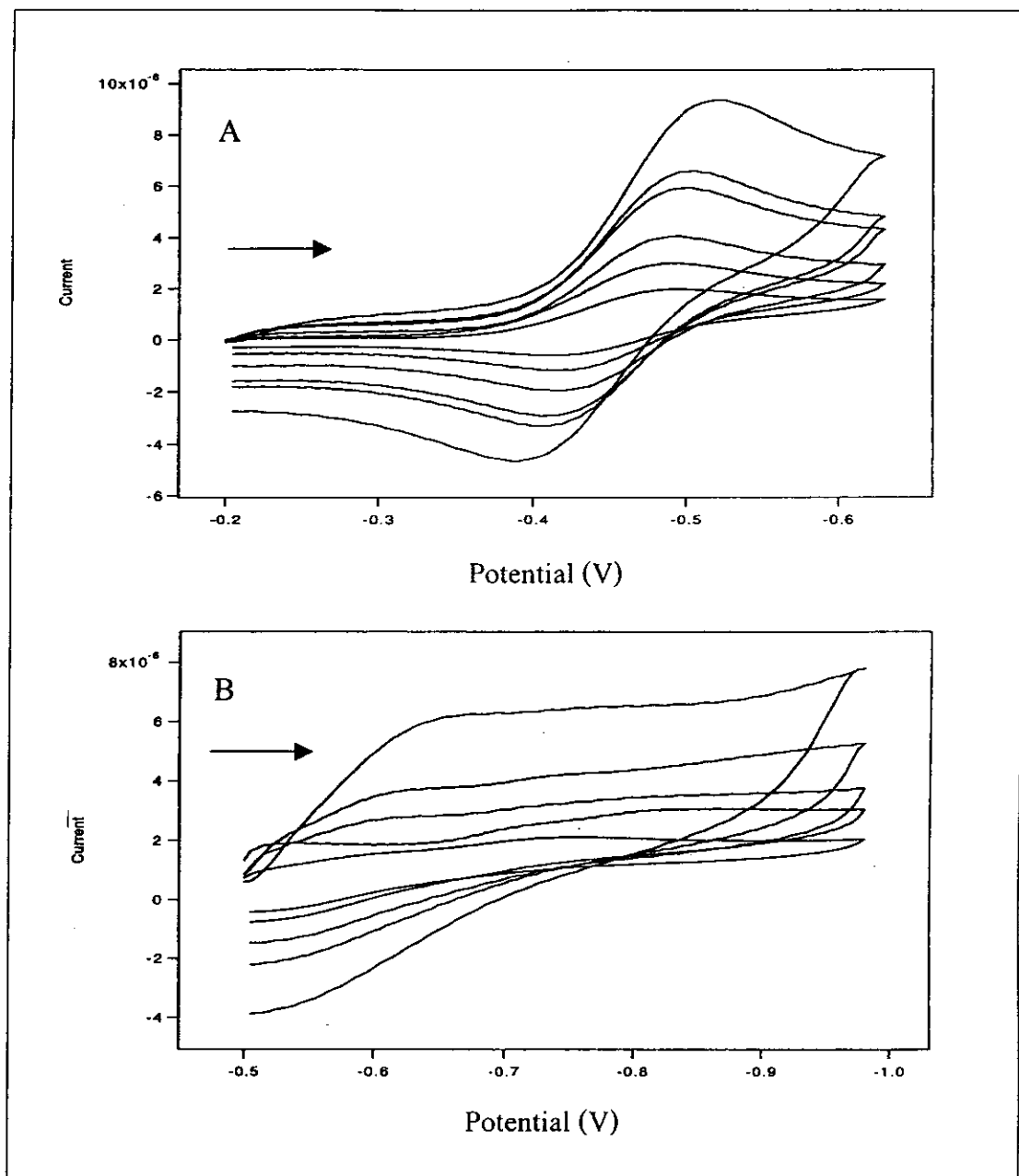


**Figure 72** Cyclic voltammogram of  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{bpy})_2]^{2+}$  (A) and  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{phen})_2]^{2+}$

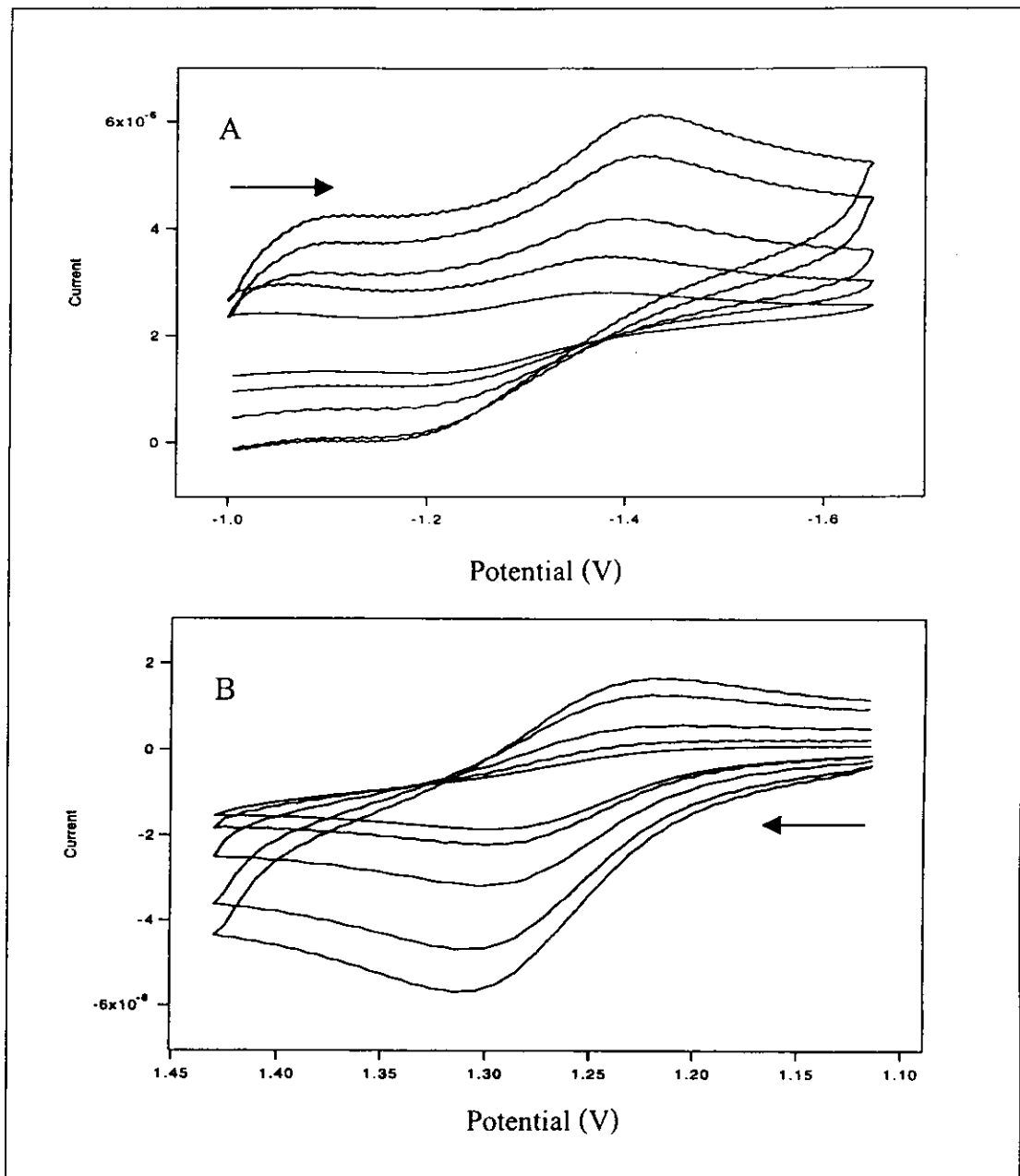
(B) with various scan rate 50 mV/s (Ferrocene was an internal standard).



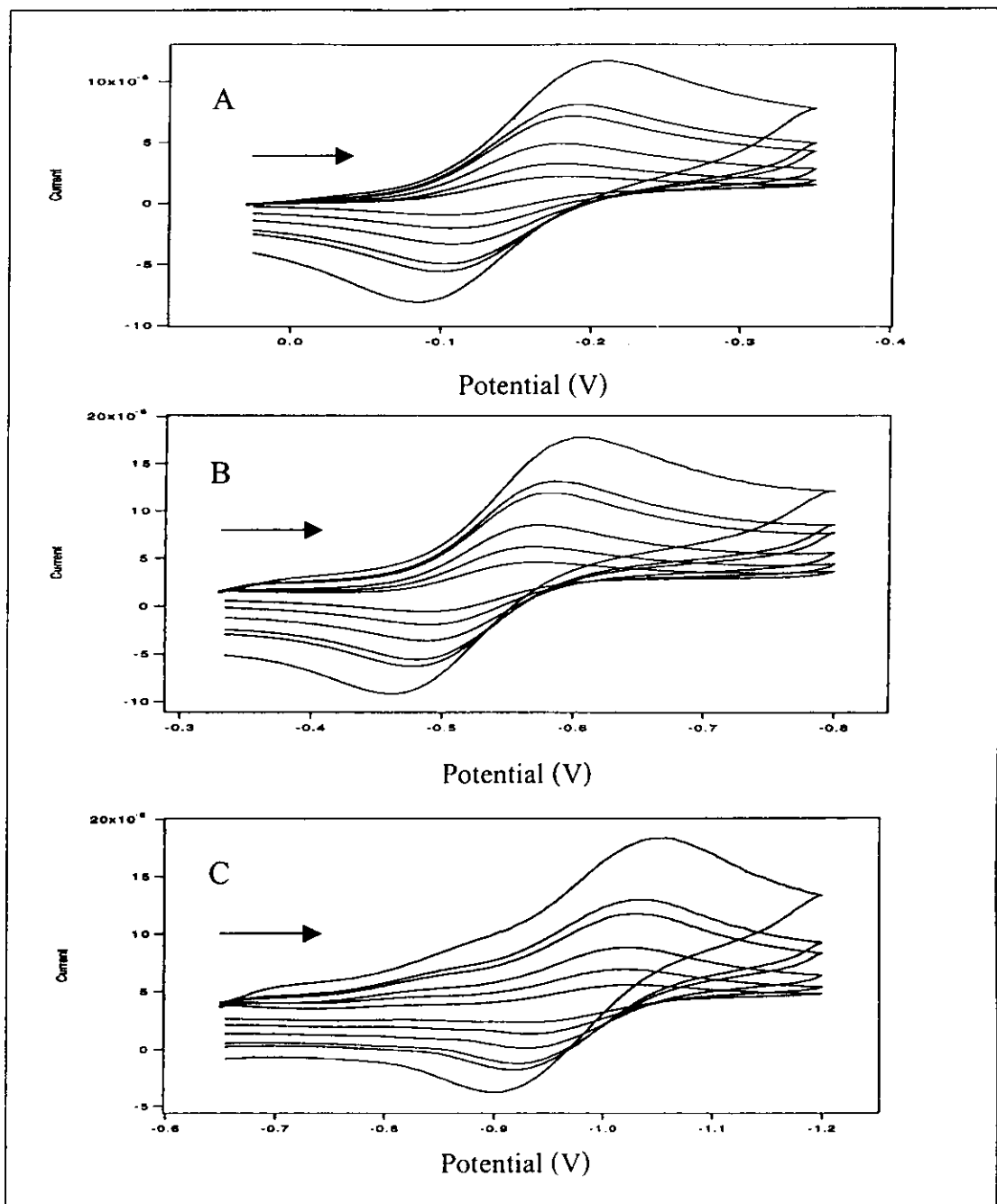
**Figure 73** Cyclic voltammogram of diazpy (A) and azpy (B) with various scan rates 50-1000 mV/s in the reduction range.



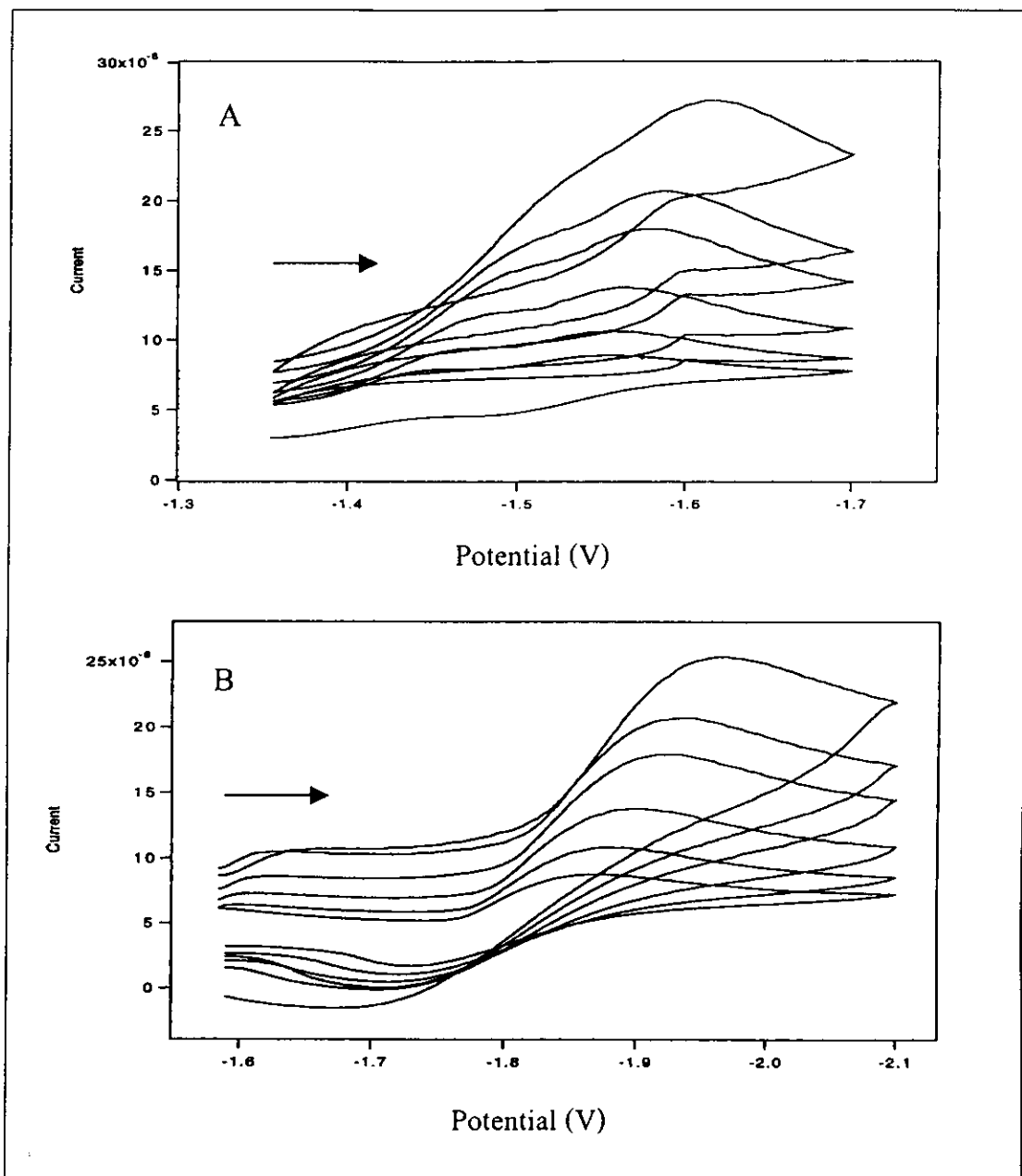
**Figure 74** Cyclic voltammogram of [Ru(diazpy)Cl<sub>2</sub>] -couple I (A) and couple II (B) with various scan rates 50-1000 mV/s in the reduction range.



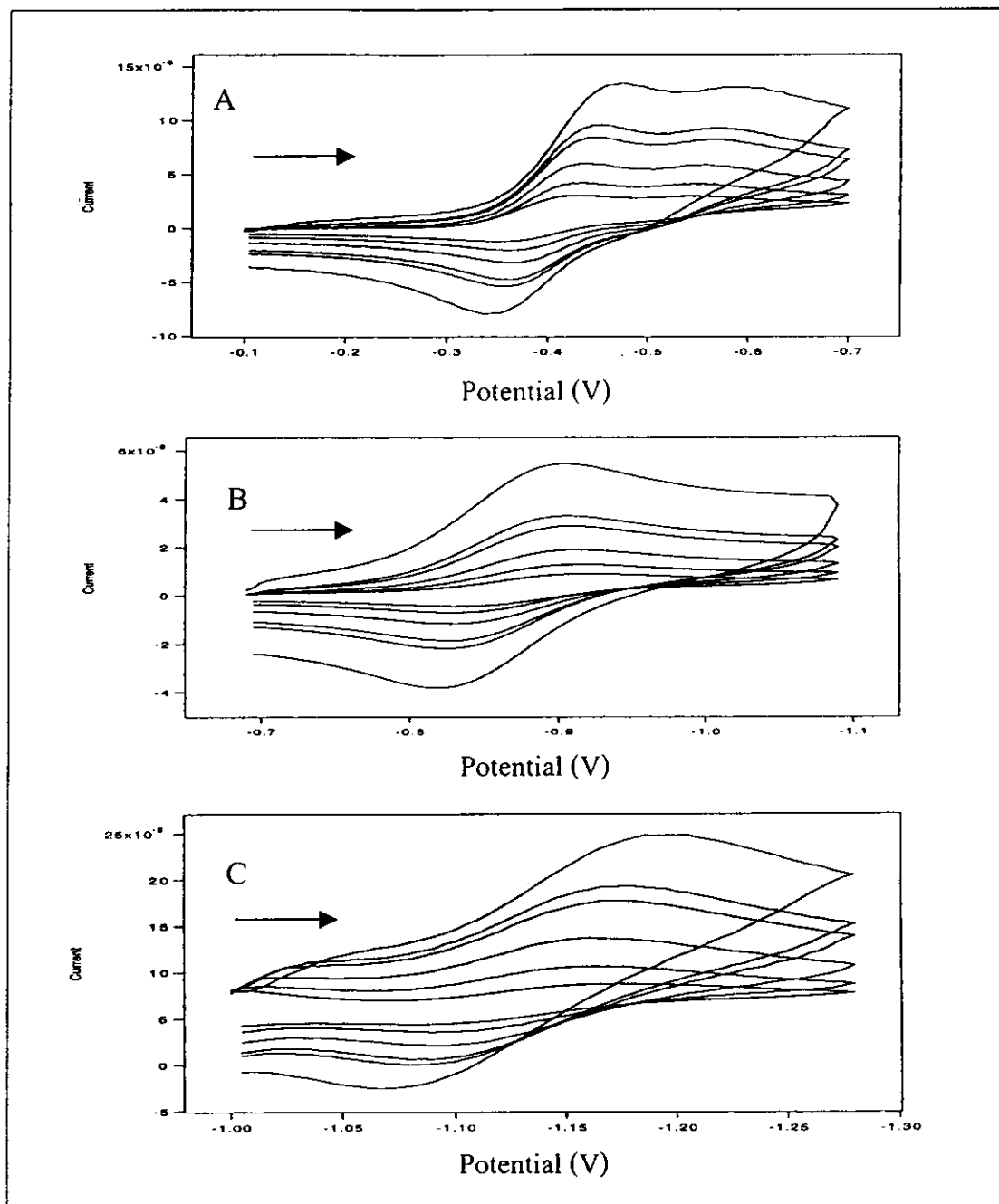
**Figure 75** Cyclic voltammogram of [Ru(diazpy)Cl<sub>2</sub>]-couple III (A) in reduction range and couple Ru(II/III) (B) in the oxidation range with various scan rates 50-1000 mV/s.



**Figure 76** Cyclic voltammogram of  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{azpy})_2](\text{BF}_4)_2$  -couple I (A), couple II (B) and couple III (C) of azpy with various scan rates 50-1000 mV/s in the reduction range.

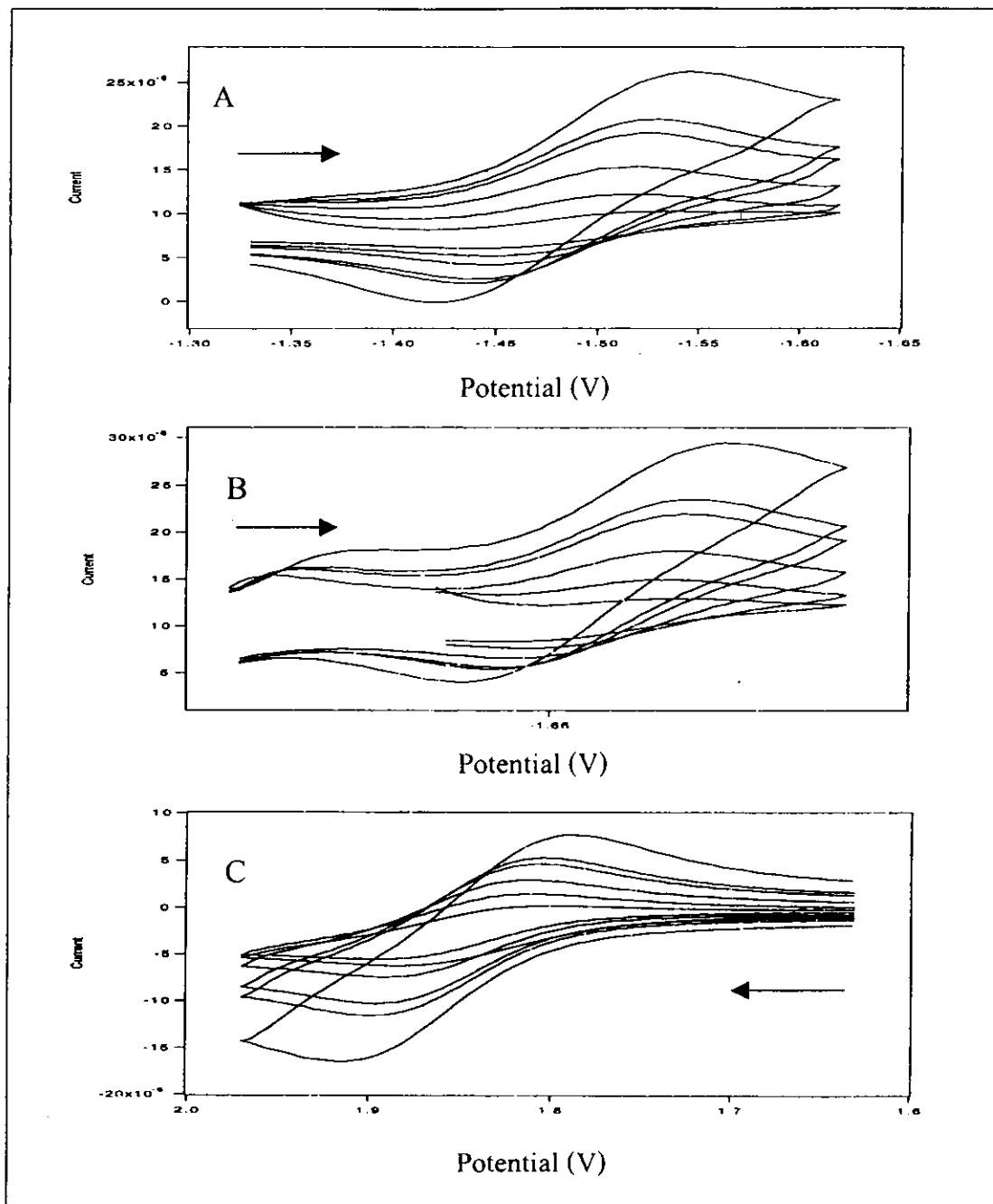


**Figure 77** Cyclic voltammogram of  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{azpy})_2](\text{BF}_4)_2$  -couple of diazpy (A), and couple IV of azpy (B) in with various scan rates 50-1000 mV/s in reduction range.

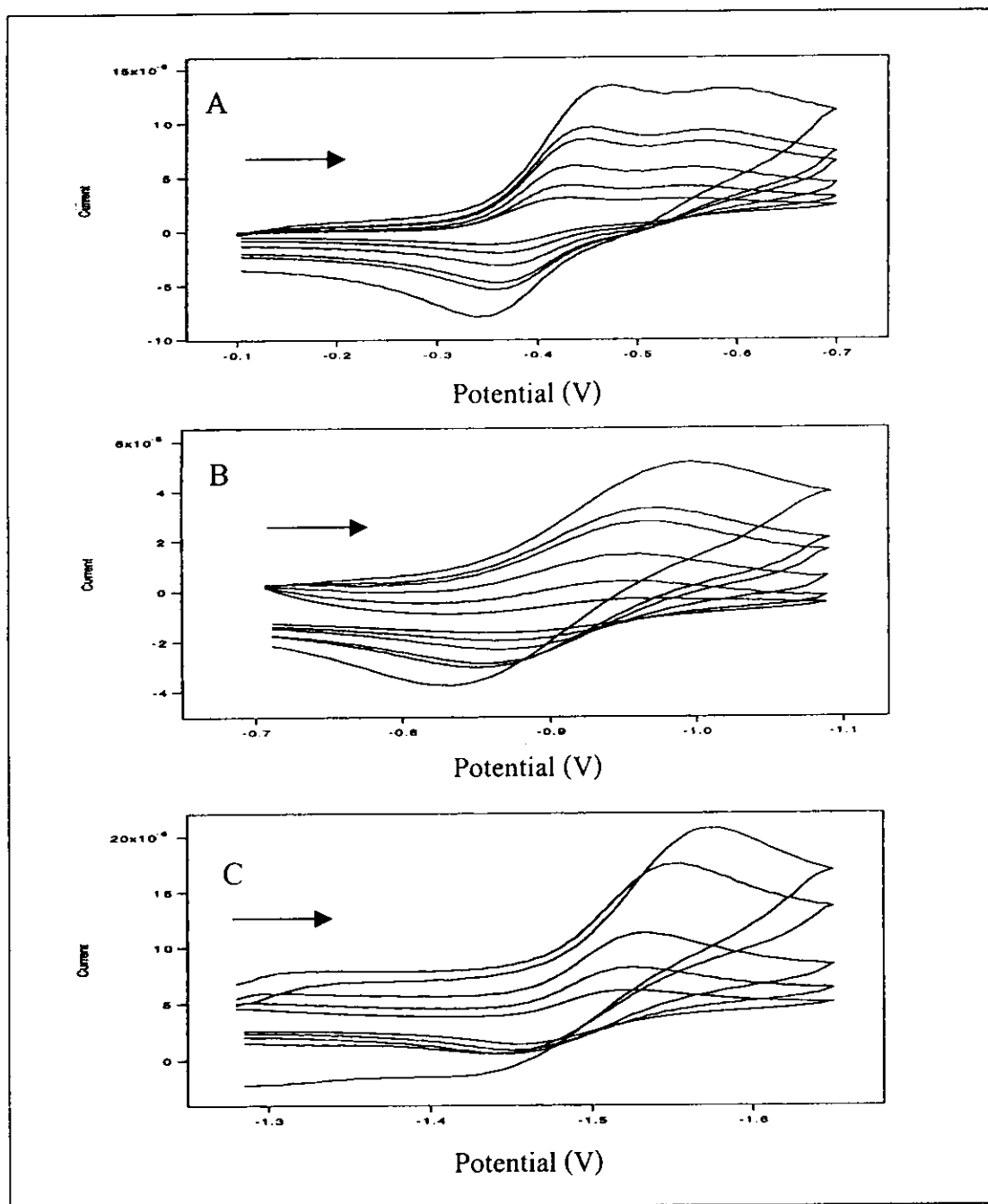


**Figure 78** Cyclic voltammogram of  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{bpy})_2](\text{BF}_4)_2$  -couple of diazpy (A), couple I (B) and couple II (C) of bpy with various scan rates 50-1000 mV/s in the reduction range.

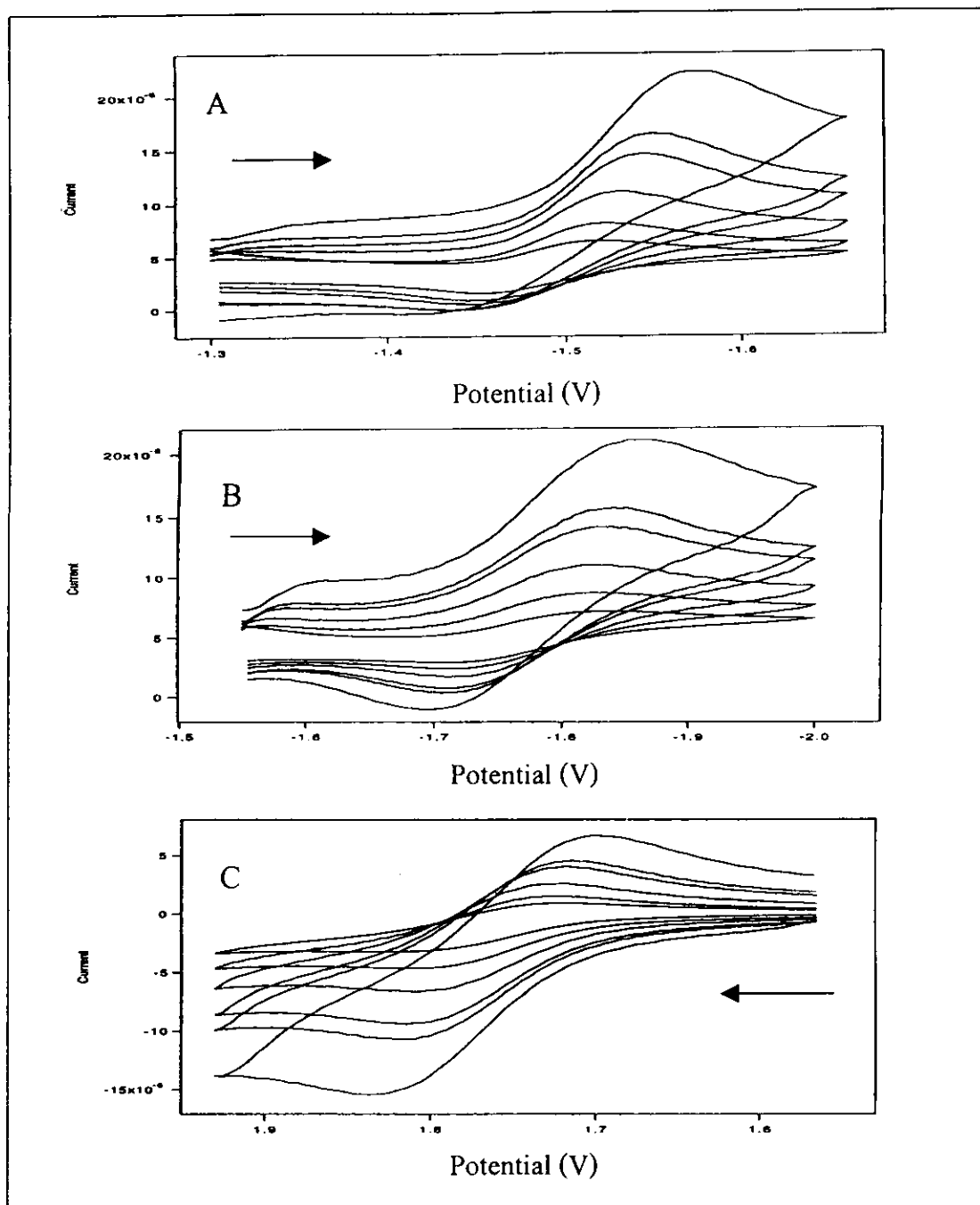




**Figure 79** Cyclic voltammogram of  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{bpy})_2](\text{BF}_4)_2$  -couple III (A), couple IV (B) of bpy in reduction range and couple Ru(II/III) (C) in the oxidation range with various scan rates 50-1000 mV/s.



**Figure 80** Cyclic voltammogram of  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{phen})_2](\text{BF}_4)_2$  -couple of diazpy (A), couple I (B) and couple II (C) of phen with various scan rates 50-1000 mV/s in the reduction range.



**Figure 81** Cyclic voltammogram of  $[\text{Ru}(\text{diazpy})(\text{phen})_2](\text{BF}_4)_2$  -couple III (A), couple IV (B) of phen in reduction range and couple Ru(II/III) (C) in the oxidation range with various scan rates 50-1000 mV/s.