JA993628M

Facile Conversion of $[(\eta^6\text{-}C_6H_6)Rh(CO)_2][1\text{-}Et\text{-}CB_{11}F_{11}]$ into the Nonclassical Rhodium(I) Carbonyl $[Rh(CO)_4][1\text{-}Et\text{-}CB_{11}F_{11}]$

Anthony J. Lupinetti, Matthew D. Havighurst, Susie M. Miller, Oren P. Anderson,

and Steven H. Strauss*

Supporting Information

IR spectra and two views of the structure of $[(\eta^6\text{-}C_6H_6)Rh(CO)_2][1\text{-}Et\text{-}CB_{11}F_{11}]$

Figure S–1.

X-Ray Structural Information for $[(\eta^6\text{-}C_6H_6)Rh(CO)_2][1\text{-}Et\text{-}CB_{11}F_{11}]$

Table 1. Crystal data and structure refinement parameters

Table 2. Atomic coordinates for nonhydrogen atoms

Table 3. Interatomic distances and angles

Table 4. Anisotropic thermal parameters

Table 5. Hydrogen atom positions

X-Ray Structural Information for $[Rh(CO)_4][1\text{-}Et\text{-}CB_{11}F_{11}]$

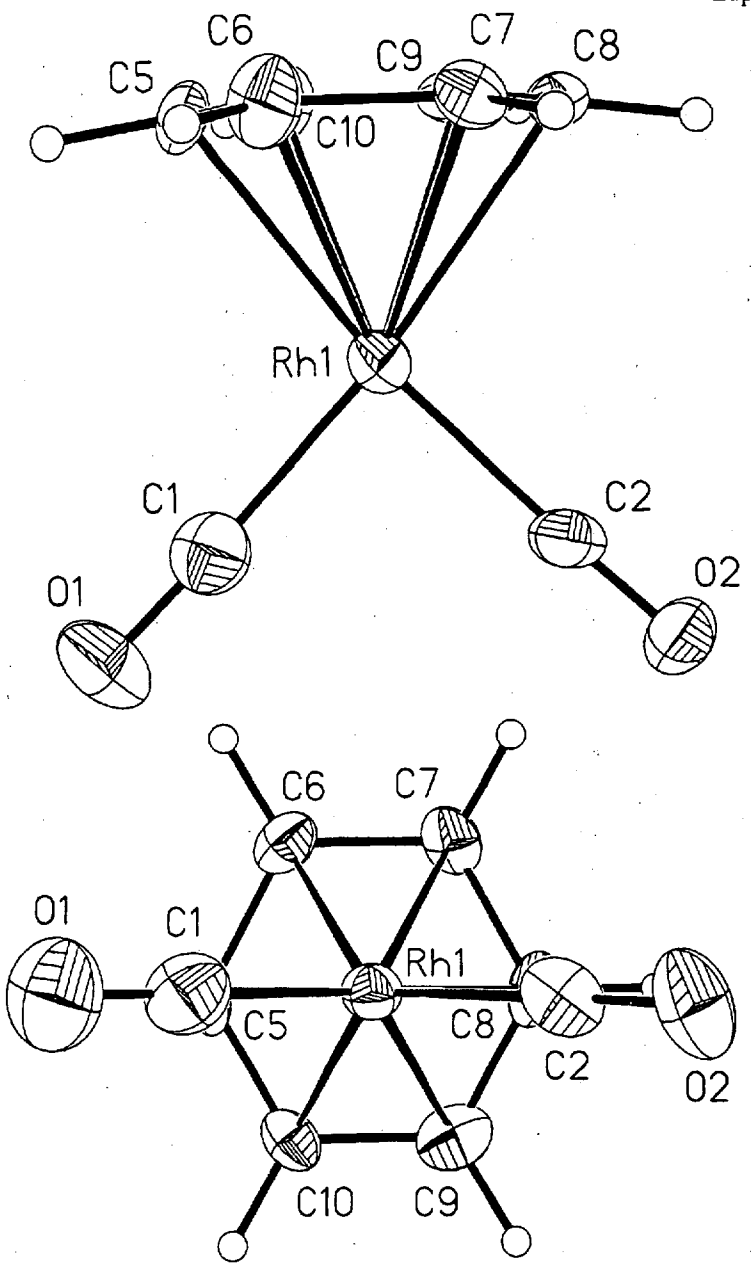
Table 1. Crystal data and structure refinement parameters

Table 2. Atomic coordinates for nonhydrogen atoms

Table 3. Interatomic distances and angles

Table 4. Anisotropic thermal parameters

Table 5. Hydrogen atom positions



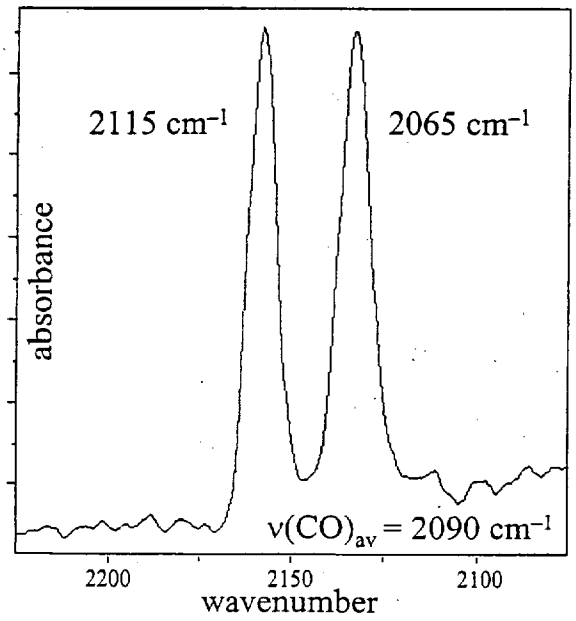


Table 1. Crystal data and structure refinement for [(C6H6)Rh(CO)2][1-Et-CB11F11].

Identification code	shs44
Empirical formula	$C_{11}H_{11}B_{11}F_{11}O_2Rh$
Formula weight	606.02
Temperature	171(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/c$
Unit cell dimensions	a = 25.1687(5) Å alpha = 90° b = 10.59130(10) Å beta = 102.6210(10)° c = 16.1831(3) Å gamma = 90°
Volume, Z	4209.68(12) $Å^3$, 8
Density (calculated)	1.912 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.917 mm^{-1}
F(000)	2336
Crystal size	0.03 x 0.20 x 0.20 mm
θ range for data collection	1.66 to 28.27°
Limiting indices	$-32 \le h \le 23$, $-13 \le k \le 13$, $-21 \le l \le 19$
Reflections collected	21111
Independent reflections	9921 (R_{int} = 0.1068)
Absorption correction	SADABS
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	9921 / 0 / 650
Goodness-of-fit on F^2	0.943
Final R indices [$I>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0682, wR2 = 0.1040
R indices (all data)	R1 = 0.1820, wR2 = 0.1497
Extinction coefficient	0.00018(8)
Largest diff. peak and hole	0.681 and -0.813 $eÅ^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for [(C6H6)Rh(CO)2][1-Et-CB11F11]. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Rh(1)	1537(1)	7622(1)	546(1)	21(1)
Rh(2)	4113(1)	2972(1)	1979(1)	23(1)
O(1)	2465(3)	5777(6)	969(4)	52(2)
O(2)	2319(2)	9807(5)	884(4)	41(2)
O(3)	4440(3)	2755(5)	3877(3)	50(2)
O(4)	4894(2)	5142(5)	2059(3)	38(2)
C(1)	2122(4)	6492(8)	813(5)	36(2)
C(2)	2035(3)	8985(8)	770(5)	29(2)
C(3)	4317(3)	2843(7)	3159(5)	31(2)
C(4)	4600(3)	4316(8)	2031(4)	27(2)
C(5)	857(3)	6180(7)	198(5)	31(2)
C(6)	758(3)	6772(8)	934(5)	32(2)
C(7)	714(3)	8093(7)	933(5)	26(2)
C(8)	758(3)	8757(7)	195(5)	26(2)
C(9)	800(3)	8144(8)	-552(5)	31(2)
C(10)	852(3)	6847(7)	-549(5)	30(2)
C(11)	3859(3)	2843(7)	546(4)	25(2)
C(12)	4088(3)	1647(7)	810(4)	27(2)
C(13)	3868(3)	961(7)	1406(5)	31(2)
C(14)	3437(3)	1488(7)	1717(5)	30(2)
C(15)	3180(3)	2623(8)	1397(5)	33(2)
C(16)	3398(3)	3311(7)	813(5)	31(2)
C(17)	3115(3)	8067(7)	-1277(5)	28(2)
C(18)	2552(3)	8693(8)	-1503(6)	45(2)
C(19)	2064(3)	7855(8)	-1757(5)	42(2)
C(20)	-1640(3)	7023(7)	2070(4)	22(2)
C(21)	-2229(3)	6542(8)	1949(5)	32(2)
C(22)	-2667(3)	7363(9)	1451(6)	58(3)
F(2)	2951(2)	6446(4)	-2590(3)	41(1)
F(3)	3385(2)	9256(4)	-2575(3)	45(1)
F(4)	3499(2)	10337(4)	-761(3)	38(1)
F(5)	3131(2)	8257(4)	374(3)	40(1)
F(6)	2806(2)	5826(4)	-727(3)	43(1)
F(7)	4254(2)	6877(4)	-2510(3)	42(1)
F(8)	4623(2)	9364(4)	-1316(3)	37(1)
F(9)	4452(2)	8757(4)	559(3)	32(1)
F(10)	3993(2)	5840(4)	550(3)	37(1)
F(11)	3860(2)	4724(4)	-1345(3)	36(1)
F(12)	4890(2)	6574(4)	-548(3)	32(1)
F(13)	-1320(2)	4612(4)	2188(3)	32(1)
F(14)	-1552(2)	6215(4)	534(3)	34(1)
F(15)	-1820(2)	9032(4)	1003(3)	35(1)
F(16)	-1796(2)	9042(4)	2977(3)	34(1)
F(17)	-1465(2)	6323(4)	3692(3)	34(1)
F(18)	-276(2)	5659(4)	1441(2)	29(1)

F(19)	-604(2)	8465(4)	715(2)	30(1)
F(20)	-775(2)	10250(4)	2271(2)	26(1)
F(21)	-524(2)	8551(4)	3994(2)	29(1)
F(22)	-229(2)	5699(4)	3499(2)	26(1)
F(23)	196(2)	8111(4)	2562(2)	24(1)
B(2)	3309(4)	6915(8)	-1902(6)	27(2)
B(3)	3566(4)	8484(9)	-1898(6)	32(2)
B(4)	3627(4)	9090(9)	-860(6)	30(2)
B(5)	3420(4)	7921(8)	-200(5)	25(2)
B(6)	3225(4)	6565(9)	-860(6)	29(2)
B(7)	4016(4)	7190(9)	-1855(5)	27(2)
B(8)	4215(4)	8577(8)	-1190(6)	27(2)
B(9)	4125(3)	8206(8)	-133(5)	22(2)
B(10)	3865(4)	6626(8)	-142(5)	23(2)
B(11)	3806(4)	6000(8)	-1201(5)	24(2)
B(12)	4367(4)	7015(8)	-761(5)	21(2)
B(13)	-1149(4)	5840(8)	2207(6)	27(2)
B(14)	-1288(4)	6767(8)	1266(5)	21(2)
B(15)	-1446(3)	8329(8)	1546(5)	22(2)
B(16)	-1429(4)	8351(8)	2664(5)	22(2)
B(17)	-1232(3)	6814(8)	3081(5)	22(2)
B(18)	-602(4)	6424(8)	1801(5)	22(2)
B(19)	-792(4)	7991(8)	1387(5)	23(2)
B(20)	-878(4)	8964(8)	2255(5)	20(2)
B(21)	-745(3)	8035(7)	3214(5)	18(2)
B(22)	-579(3)	6451(8)	2927(5)	20(2)
B(23)	-346(3)	7794(7)	2424(5)	16(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for [(C6H6)Rh(CO)2][1-Et-CB11F11].

Rh(1)-C(1)	1.874(9)	Rh(1)-C(2)	1.895(9)
Rh(1)-C(8)	2.263(7)	Rh(1)-C(5)	2.270(7)
Rh(1)-C(10)	2.335(7)	Rh(1)-C(9)	2.337(7)
Rh(1)-C(7)	2.343(7)	Rh(1)-C(6)	2.364(8)
Rh(2)-C(4)	1.868(8)	Rh(2)-C(3)	1.870(8)
Rh(2)-C(11)	2.271(7)	Rh(2)-C(14)	2.286(8)
Rh(2)-C(16)	2.333(7)	Rh(2)-C(12)	2.346(7)
Rh(2)-C(13)	2.351(8)	Rh(2)-C(15)	2.361(8)
O(1)-C(1)	1.134(9)	O(2)-C(2)	1.116(9)
O(3)-C(3)	1.139(8)	O(4)-C(4)	1.141(8)
C(5)-C(10)	1.398(10)	C(5)-C(6)	1.415(10)
C(6)-C(7)	1.404(10)	C(7)-C(8)	1.412(10)
C(8)-C(9)	1.397(10)	C(9)-C(10)	1.380(10)
C(11)-C(16)	1.413(10)	C(11)-C(12)	1.417(10)
C(12)-C(13)	1.414(10)	C(13)-C(14)	1.407(11)
C(14)-C(15)	1.409(10)	C(15)-C(16)	1.398(10)
C(17)-C(18)	1.535(11)	C(17)-B(4)	1.705(11)
C(17)-B(2)	1.721(12)	C(17)-B(6)	1.727(12)
C(17)-B(3)	1.730(12)	C(17)-B(5)	1.752(11)
C(18)-C(19)	1.498(10)	C(20)-C(21)	1.540(10)
C(20)-B(16)	1.721(11)	C(20)-B(13)	1.740(12)
C(20)-B(17)	1.745(11)	C(20)-B(15)	1.747(11)
C(20)-B(14)	1.748(11)	C(21)-C(22)	1.493(11)
F(2)-B(2)	1.363(9)	F(3)-B(3)	1.364(9)
F(4)-B(4)	1.377(9)	F(5)-B(5)	1.347(9)
F(6)-B(6)	1.368(10)	F(7)-B(7)	1.368(9)
F(8)-B(8)	1.373(10)	F(9)-B(9)	1.368(9)
F(10)-B(10)	1.376(9)	F(11)-B(11)	1.384(9)
F(12)-B(12)	1.368(9)	F(13)-B(13)	1.368(9)
F(14)-B(14)	1.359(9)	F(15)-B(15)	1.362(9)
F(16)-B(16)	1.360(9)	F(17)-B(17)	1.357(9)
F(18)-B(18)	1.371(9)	F(19)-B(19)	1.372(9)
F(20)-B(20)	1.387(9)	F(21)-B(21)	1.376(8)
F(22)-B(22)	1.383(9)	F(23)-B(23)	1.375(8)
B(2)-B(11)	1.780(12)	B(2)-B(3)	1.783(13)
B(2)-B(6)	1.784(13)	B(2)-B(7)	1.788(13)
B(3)-B(7)	1.768(13)	B(3)-B(4)	1.773(13)
B(3)-B(8)	1.780(13)	B(4)-B(8)	1.767(13)
B(4)-B(9)	1.786(12)	B(4)-B(5)	1.786(13)
B(5)-B(10)	1.760(13)	B(5)-B(9)	1.778(12)
B(5)-B(6)	1.793(13)	B(6)-B(10)	1.769(13)
B(6)-B(11)	1.774(13)	B(7)-B(11)	1.798(12)
B(7)-B(12)	1.807(11)	B(7)-B(8)	1.825(13)
B(8)-B(12)	1.802(12)	B(8)-B(9)	1.818(12)
B(9)-B(10)	1.795(12)	B(9)-B(12)	1.809(12)
B(10)-B(11)	1.812(12)	B(10)-B(12)	1.823(12)
B(11)-B(12)	1.794(12)	B(13)-B(22)	1.762(12)
B(13)-B(18)	1.763(12)	B(13)-B(14)	1.781(12)
B(13)-B(17)	1.801(12)	B(14)-B(19)	1.779(12)
B(14)-B(15)	1.783(12)	B(14)-B(18)	1.791(12)
B(15)-B(19)	1.755(12)	B(15)-B(20)	1.759(12)
B(15)-B(16)	1.800(12)	B(16)-B(20)	1.783(12)
B(16)-B(21)	1.788(12)	B(16)-B(17)	1.790(12)
B(17)-B(22)	1.758(12)	B(17)-B(21)	1.763(12)

B(18)-B(23)	1.803(11)	B(18)-B(22)	1.811(12)
B(18)-B(19)	1.815(12)	B(19)-B(20)	1.793(12)
B(19)-B(23)	1.816(11)	B(20)-B(23)	1.802(12)
B(20)-B(21)	1.806(11)	B(21)-B(23)	1.810(11)
B(21)-B(22)	1.814(11)	B(22)-B(23)	1.800(12)

C(1)-Rh(1)-C(2)	89.3(4)	C(1)-Rh(1)-C(8)	172.4(3)
C(2)-Rh(1)-C(8)	98.3(3)	C(1)-Rh(1)-C(5)	98.0(3)
C(2)-Rh(1)-C(5)	172.5(3)	C(8)-Rh(1)-C(5)	74.4(3)
C(1)-Rh(1)-C(10)	111.3(3)	C(2)-Rh(1)-C(10)	139.6(3)
C(8)-Rh(1)-C(10)	62.7(3)	C(5)-Rh(1)-C(10)	35.3(3)
C(1)-Rh(1)-C(9)	141.2(3)	C(2)-Rh(1)-C(9)	110.3(3)
C(8)-Rh(1)-C(9)	35.3(3)	C(5)-Rh(1)-C(9)	62.7(3)
C(10)-Rh(1)-C(9)	34.4(3)	C(1)-Rh(1)-C(7)	140.4(3)
C(2)-Rh(1)-C(7)	111.9(3)	C(8)-Rh(1)-C(7)	35.6(2)
C(5)-Rh(1)-C(7)	63.1(3)	C(10)-Rh(1)-C(7)	74.3(3)
C(9)-Rh(1)-C(7)	63.5(3)	C(1)-Rh(1)-C(6)	110.6(3)
C(2)-Rh(1)-C(6)	142.4(3)	C(8)-Rh(1)-C(6)	63.0(3)
C(5)-Rh(1)-C(6)	35.5(3)	C(10)-Rh(1)-C(6)	63.3(3)
C(9)-Rh(1)-C(6)	74.1(3)	C(7)-Rh(1)-C(6)	34.7(2)
C(4)-Rh(2)-C(3)	88.8(3)	C(4)-Rh(2)-C(11)	97.3(3)
C(3)-Rh(2)-C(11)	172.3(3)	C(4)-Rh(2)-C(14)	170.5(3)
C(3)-Rh(2)-C(14)	99.6(3)	C(11)-Rh(2)-C(14)	74.8(3)
C(4)-Rh(2)-C(16)	107.6(3)	C(3)-Rh(2)-C(16)	145.9(3)
C(11)-Rh(2)-C(16)	35.7(2)	C(14)-Rh(2)-C(16)	62.9(3)
C(4)-Rh(2)-C(12)	113.2(3)	C(3)-Rh(2)-C(12)	137.1(3)
C(11)-Rh(2)-C(12)	35.7(2)	C(14)-Rh(2)-C(12)	63.3(3)
C(16)-Rh(2)-C(12)	63.8(3)	C(4)-Rh(2)-C(13)	145.1(3)
C(3)-Rh(2)-C(13)	109.1(3)	C(11)-Rh(2)-C(13)	63.3(3)
C(14)-Rh(2)-C(13)	35.3(3)	C(16)-Rh(2)-C(13)	74.4(3)
C(12)-Rh(2)-C(13)	35.0(3)	C(4)-Rh(2)-C(15)	136.3(3)
C(3)-Rh(2)-C(15)	115.0(3)	C(11)-Rh(2)-C(15)	63.2(3)
C(14)-Rh(2)-C(15)	35.2(3)	C(16)-Rh(2)-C(15)	34.7(3)
C(12)-Rh(2)-C(15)	74.6(3)	C(13)-Rh(2)-C(15)	63.1(3)
O(1)-C(1)-Rh(1)	177.8(8)	O(2)-C(2)-Rh(1)	177.9(7)
O(3)-C(3)-Rh(2)	179.5(7)	O(4)-C(4)-Rh(2)	179.5(8)
C(10)-C(5)-C(6)	122.3(7)	C(10)-C(5)-Rh(1)	74.9(4)
C(6)-C(5)-Rh(1)	75.9(4)	C(7)-C(6)-C(5)	117.9(7)
C(7)-C(6)-Rh(1)	71.9(4)	C(5)-C(6)-Rh(1)	68.7(4)
C(6)-C(7)-C(8)	118.5(7)	C(6)-C(7)-Rh(1)	73.4(5)
C(8)-C(7)-Rh(1)	69.1(4)	C(9)-C(8)-C(7)	122.4(7)
C(9)-C(8)-Rh(1)	75.3(4)	C(7)-C(8)-Rh(1)	75.3(4)
C(10)-C(9)-C(8)	119.0(7)	C(10)-C(9)-Rh(1)	72.7(4)
C(8)-C(9)-Rh(1)	69.4(4)	C(9)-C(10)-C(5)	119.3(7)
C(9)-C(10)-Rh(1)	72.9(4)	C(5)-C(10)-Rh(1)	69.8(4)
C(16)-C(11)-C(12)	121.9(7)	C(16)-C(11)-Rh(2)	74.6(4)
C(12)-C(11)-Rh(2)	75.1(4)	C(13)-C(12)-C(11)	118.1(7)
C(13)-C(12)-Rh(2)	72.7(4)	C(11)-C(12)-Rh(2)	69.2(4)
C(14)-C(13)-C(12)	119.2(7)	C(14)-C(13)-Rh(2)	69.8(4)
C(12)-C(13)-Rh(2)	72.3(4)	C(13)-C(14)-C(15)	122.4(7)
C(13)-C(14)-Rh(2)	74.9(5)	C(15)-C(14)-Rh(2)	75.3(5)
C(16)-C(15)-C(14)	118.4(8)	C(16)-C(15)-Rh(2)	71.6(5)
C(14)-C(15)-Rh(2)	69.5(4)	C(15)-C(16)-C(11)	119.6(7)
C(15)-C(16)-Rh(2)	73.7(4)	C(11)-C(16)-Rh(2)	69.7(4)
C(18)-C(17)-B(4)	113.5(6)	C(18)-C(17)-B(2)	122.1(6)
B(4)-C(17)-B(2)	113.3(6)	C(18)-C(17)-B(6)	123.5(7)
B(4)-C(17)-B(6)	112.8(6)	B(2)-C(17)-B(6)	62.3(5)
C(18)-C(17)-B(3)	116.2(7)	B(4)-C(17)-B(3)	62.2(5)

B(2)-C(17)-B(3)	62.2(5)	B(6)-C(17)-B(3)	113.1(6)
C(18)-C(17)-B(5)	117.2(6)	B(4)-C(17)-B(5)	62.2(5)
B(2)-C(17)-B(5)	113.7(6)	B(6)-C(17)-B(5)	62.0(5)
B(3)-C(17)-B(5)	113.6(6)	C(19)-C(18)-C(17)	117.9(7)
C(21)-C(20)-B(16)	120.8(6)	C(21)-C(20)-B(13)	114.5(6)
B(16)-C(20)-B(13)	113.2(6)	C(21)-C(20)-B(17)	115.5(6)
B(16)-C(20)-B(17)	62.2(5)	B(13)-C(20)-B(17)	62.2(5)
C(21)-C(20)-B(15)	124.3(6)	B(16)-C(20)-B(15)	62.6(5)
B(13)-C(20)-B(15)	111.5(6)	B(17)-C(20)-B(15)	112.7(5)
C(21)-C(20)-B(14)	119.0(6)	B(16)-C(20)-B(14)	113.4(6)
B(13)-C(20)-B(14)	61.4(5)	B(17)-C(20)-B(14)	112.9(5)
B(15)-C(20)-B(14)	61.4(5)	C(22)-C(21)-C(20)	116.9(7)
F(2)-B(2)-C(17)	121.1(7)	F(2)-B(2)-B(11)	124.7(7)
C(17)-B(2)-B(11)	105.1(6)	F(2)-B(2)-B(3)	121.1(7)
C(17)-B(2)-B(3)	59.1(5)	B(11)-B(2)-B(3)	107.5(6)
F(2)-B(2)-B(6)	120.2(7)	C(17)-B(2)-B(6)	59.0(5)
B(11)-B(2)-B(6)	59.7(5)	B(3)-B(2)-B(6)	108.0(6)
F(2)-B(2)-B(7)	124.5(7)	C(17)-B(2)-B(7)	105.5(6)
B(11)-B(2)-B(7)	60.5(5)	B(3)-B(2)-B(7)	59.4(5)
B(6)-B(2)-B(7)	108.4(6)	F(3)-B(3)-C(17)	118.1(7)
F(3)-B(3)-B(7)	126.6(7)	C(17)-B(3)-B(7)	106.0(6)
F(3)-B(3)-B(4)	119.2(7)	C(17)-B(3)-B(4)	58.2(5)
B(7)-B(3)-B(4)	108.8(6)	F(3)-B(3)-B(8)	125.7(7)
C(17)-B(3)-B(8)	105.5(6)	B(7)-B(3)-B(8)	61.9(5)
B(4)-B(3)-B(8)	59.6(5)	F(3)-B(3)-B(2)	119.9(7)
C(17)-B(3)-B(2)	58.7(5)	B(7)-B(3)-B(2)	60.5(5)
B(4)-B(3)-B(2)	107.2(6)	B(8)-B(3)-B(2)	109.6(6)
F(4)-B(4)-C(17)	118.7(7)	F(4)-B(4)-B(8)	124.3(7)
C(17)-B(4)-B(8)	107.2(6)	F(4)-B(4)-B(3)	119.0(7)
C(17)-B(4)-B(3)	59.6(5)	B(8)-B(4)-B(3)	60.4(5)
F(4)-B(4)-B(9)	125.0(6)	C(17)-B(4)-B(9)	106.8(6)
B(8)-B(4)-B(9)	61.6(5)	B(3)-B(4)-B(9)	109.7(6)
F(4)-B(4)-B(5)	119.3(7)	C(17)-B(4)-B(5)	60.2(5)
B(8)-B(4)-B(5)	109.9(6)	B(3)-B(4)-B(5)	109.9(6)
B(9)-B(4)-B(5)	59.7(5)	F(5)-B(5)-C(17)	118.5(7)
F(5)-B(5)-B(10)	127.1(7)	C(17)-B(5)-B(10)	104.9(6)
F(5)-B(5)-B(9)	126.6(7)	C(17)-B(5)-B(9)	105.1(6)
B(10)-B(5)-B(9)	61.0(5)	F(5)-B(5)-B(4)	120.1(7)
C(17)-B(5)-B(4)	57.6(5)	B(10)-B(5)-B(4)	107.9(6)
B(9)-B(5)-B(4)	60.1(5)	F(5)-B(5)-B(6)	120.2(7)
C(17)-B(5)-B(6)	58.3(5)	B(10)-B(5)-B(6)	59.7(5)
B(9)-B(5)-B(6)	108.2(6)	B(4)-B(5)-B(6)	106.0(6)
F(6)-B(6)-C(17)	121.6(7)	F(6)-B(6)-B(10)	122.8(7)
C(17)-B(6)-B(10)	105.5(6)	F(6)-B(6)-B(11)	124.9(7)
C(17)-B(6)-B(11)	105.1(6)	B(10)-B(6)-B(11)	61.5(5)
F(6)-B(6)-B(2)	121.5(7)	C(17)-B(6)-B(2)	58.7(5)
B(10)-B(6)-B(2)	109.5(6)	B(11)-B(6)-B(2)	60.0(5)
F(6)-B(6)-B(5)	119.0(7)	C(17)-B(6)-B(5)	59.7(5)
B(10)-B(6)-B(5)	59.2(5)	B(11)-B(6)-B(5)	108.5(6)
B(2)-B(6)-B(5)	108.8(6)	F(7)-B(7)-B(3)	122.8(7)
F(7)-B(7)-B(2)	121.9(7)	B(3)-B(7)-B(2)	60.2(5)
F(7)-B(7)-B(11)	121.4(7)	B(3)-B(7)-B(11)	107.4(6)
B(2)-B(7)-B(11)	59.5(5)	F(7)-B(7)-B(12)	122.0(7)
B(3)-B(7)-B(12)	106.9(6)	B(2)-B(7)-B(12)	107.1(6)
B(11)-B(7)-B(12)	59.7(5)	F(7)-B(7)-B(8)	122.8(7)
B(3)-B(7)-B(8)	59.4(5)	B(2)-B(7)-B(8)	107.4(6)
B(11)-B(7)-B(8)	107.2(6)	B(12)-B(7)-B(8)	59.5(5)
F(8)-B(8)-B(4)	124.2(7)	F(8)-B(8)-B(3)	123.3(7)

B(4)-B(8)-B(3)	60.0(5)	F(8)-B(8)-B(12)	120.8(7)
B(4)-B(8)-B(12)	106.7(6)	B(3)-B(8)-B(12)	106.5(6)
F(8)-B(8)-B(9)	121.5(7)	B(4)-B(8)-B(9)	59.7(5)
B(3)-B(8)-B(9)	107.9(6)	B(12)-B(8)-B(9)	59.9(5)
F(8)-B(8)-B(7)	121.3(7)	B(4)-B(8)-B(7)	106.6(6)
B(3)-B(8)-B(7)	58.7(5)	B(12)-B(8)-B(7)	59.8(5)
B(9)-B(8)-B(7)	107.8(6)	F(9)-B(9)-B(5)	122.5(7)
F(9)-B(9)-B(4)	121.8(6)	B(5)-B(9)-B(4)	60.1(5)
F(9)-B(9)-B(10)	123.9(7)	B(5)-B(9)-B(10)	59.0(5)
B(4)-B(9)-B(10)	106.4(6)	F(9)-B(9)-B(12)	122.8(7)
B(5)-B(9)-B(12)	107.6(6)	B(4)-B(9)-B(12)	105.6(6)
B(10)-B(9)-B(12)	60.8(5)	F(9)-B(9)-B(8)	120.1(7)
B(5)-B(9)-B(8)	107.9(6)	B(4)-B(9)-B(8)	58.7(5)
B(10)-B(9)-B(8)	108.3(6)	B(12)-B(9)-B(8)	59.6(5)
F(10)-B(10)-B(5)	123.2(7)	F(10)-B(10)-B(6)	121.9(7)
B(5)-B(10)-B(6)	61.1(5)	F(10)-B(10)-B(9)	122.5(6)
B(5)-B(10)-B(9)	60.0(5)	B(6)-B(10)-B(9)	108.5(6)
F(10)-B(10)-B(11)	120.3(6)	B(5)-B(10)-B(11)	108.3(6)
B(6)-B(10)-B(11)	59.4(5)	B(9)-B(10)-B(11)	107.7(6)
F(10)-B(10)-B(12)	121.2(7)	B(5)-B(10)-B(12)	107.7(6)
B(6)-B(10)-B(12)	106.8(6)	B(9)-B(10)-B(12)	60.0(5)
B(11)-B(10)-B(12)	59.1(5)	F(11)-B(11)-B(6)	120.0(7)
F(11)-B(11)-B(2)	120.4(7)	B(6)-B(11)-B(2)	60.2(5)
F(11)-B(11)-B(12)	123.6(7)	B(6)-B(11)-B(12)	107.8(6)
B(2)-B(11)-B(12)	108.0(6)	F(11)-B(11)-B(7)	122.2(7)
B(6)-B(11)-B(7)	108.4(6)	B(2)-B(11)-B(7)	59.9(5)
B(12)-B(11)-B(7)	60.4(5)	F(11)-B(11)-B(10)	121.8(6)
B(6)-B(11)-B(10)	59.1(5)	B(2)-B(11)-B(10)	107.8(6)
B(12)-B(11)-B(10)	60.7(5)	B(7)-B(11)-B(10)	109.0(6)
F(12)-B(12)-B(11)	121.8(6)	F(12)-B(12)-B(8)	121.5(7)
B(11)-B(12)-B(8)	108.3(6)	F(12)-B(12)-B(7)	121.4(6)
B(11)-B(12)-B(7)	59.9(5)	B(8)-B(12)-B(7)	60.7(5)
F(12)-B(12)-B(9)	121.4(6)	B(11)-B(12)-B(9)	107.9(6)
B(8)-B(12)-B(9)	60.5(5)	B(7)-B(12)-B(9)	109.0(6)
F(12)-B(12)-B(10)	121.9(6)	B(11)-B(12)-B(10)	60.1(5)
B(8)-B(12)-B(10)	107.7(6)	B(7)-B(12)-B(10)	108.2(6)
B(9)-B(12)-B(10)	59.2(5)	F(13)-B(13)-C(20)	118.1(7)
F(13)-B(13)-B(22)	124.8(7)	C(20)-B(13)-B(22)	105.8(6)
F(13)-B(13)-B(18)	126.4(7)	C(20)-B(13)-B(18)	106.9(6)
B(22)-B(13)-B(18)	61.8(5)	F(13)-B(13)-B(14)	120.3(7)
C(20)-B(13)-B(14)	59.5(5)	B(22)-B(13)-B(14)	110.0(6)
B(18)-B(13)-B(14)	60.7(5)	F(13)-B(13)-B(17)	118.2(7)
C(20)-B(13)-B(17)	59.1(5)	B(22)-B(13)-B(17)	59.1(5)
B(18)-B(13)-B(17)	109.0(6)	B(14)-B(13)-B(17)	108.7(6)
F(14)-B(14)-C(20)	119.0(6)	F(14)-B(14)-B(19)	127.4(7)
C(20)-B(14)-B(19)	105.2(6)	F(14)-B(14)-B(13)	118.4(6)
C(20)-B(14)-B(13)	59.1(5)	B(19)-B(14)-B(13)	107.9(6)
F(14)-B(14)-B(15)	121.8(6)	C(20)-B(14)-B(15)	59.3(5)
B(19)-B(14)-B(15)	59.0(5)	B(13)-B(14)-B(15)	107.9(6)
F(14)-B(14)-B(18)	124.8(6)	C(20)-B(14)-B(18)	105.3(6)
B(19)-B(14)-B(18)	61.1(5)	B(13)-B(14)-B(18)	59.2(5)
B(15)-B(14)-B(18)	108.1(6)	F(15)-B(15)-C(20)	121.2(6)
F(15)-B(15)-B(19)	123.7(7)	C(20)-B(15)-B(19)	106.3(6)
F(15)-B(15)-B(20)	124.1(7)	C(20)-B(15)-B(20)	105.0(6)
B(19)-B(15)-B(20)	61.4(5)	F(15)-B(15)-B(14)	120.3(6)
C(20)-B(15)-B(14)	59.3(5)	B(19)-B(15)-B(14)	60.4(5)
B(20)-B(15)-B(14)	109.0(6)	F(15)-B(15)-B(16)	120.2(7)
C(20)-B(15)-B(16)	58.0(4)	B(19)-B(15)-B(16)	109.5(6)

B(20)-B(15)-B(16)	60.1(5)	B(14)-B(15)-B(16)	108.0(6)
F(16)-B(16)-C(20)	119.7(7)	F(16)-B(16)-B(20)	126.1(7)
C(20)-B(16)-B(20)	105.1(6)	F(16)-B(16)-B(21)	125.0(6)
C(20)-B(16)-B(21)	105.8(6)	B(20)-B(16)-B(21)	60.7(5)
F(16)-B(16)-B(17)	120.2(7)	C(20)-B(16)-B(17)	59.6(4)
B(20)-B(16)-B(17)	107.3(6)	B(21)-B(16)-B(17)	59.0(5)
F(16)-B(16)-B(15)	120.8(6)	C(20)-B(16)-B(15)	59.4(4)
B(20)-B(16)-B(15)	58.8(5)	B(21)-B(16)-B(15)	107.9(6)
B(17)-B(16)-B(15)	108.1(6)	F(17)-B(17)-C(20)	118.2(6)
F(17)-B(17)-B(22)	125.8(7)	C(20)-B(17)-B(22)	105.7(6)
F(17)-B(17)-B(21)	126.2(7)	C(20)-B(17)-B(21)	105.8(6)
B(22)-B(17)-B(21)	62.0(5)	F(17)-B(17)-B(16)	119.7(6)
C(20)-B(17)-B(16)	58.2(4)	B(22)-B(17)-B(16)	109.6(6)
B(21)-B(17)-B(16)	60.4(5)	F(17)-B(17)-B(13)	119.7(6)
C(20)-B(17)-B(13)	58.7(5)	B(22)-B(17)-B(13)	59.3(5)
B(21)-B(17)-B(13)	108.6(6)	B(16)-B(17)-B(13)	107.1(6)
F(18)-B(18)-B(13)	122.7(7)	F(18)-B(18)-B(14)	121.2(6)
B(13)-B(18)-B(14)	60.1(5)	F(18)-B(18)-B(23)	122.6(7)
B(13)-B(18)-B(23)	106.7(6)	B(14)-B(18)-B(23)	107.2(6)
F(18)-B(18)-B(22)	123.1(6)	B(13)-B(18)-B(22)	59.1(5)
B(14)-B(18)-B(22)	107.3(6)	B(23)-B(18)-B(22)	59.7(4)
F(18)-B(18)-B(19)	121.2(6)	B(13)-B(18)-B(19)	107.1(6)
B(14)-B(18)-B(19)	59.1(5)	B(23)-B(18)-B(19)	60.3(4)
B(22)-B(18)-B(19)	107.7(6)	F(19)-B(19)-B(15)	122.6(6)
F(19)-B(19)-B(14)	122.3(6)	B(15)-B(19)-B(14)	60.6(5)
F(19)-B(19)-B(20)	122.1(7)	B(15)-B(19)-B(20)	59.4(5)
B(14)-B(19)-B(20)	107.7(6)	F(19)-B(19)-B(18)	121.2(7)
B(15)-B(19)-B(18)	108.2(6)	B(14)-B(19)-B(18)	59.8(5)
B(20)-B(19)-B(18)	107.6(5)	F(19)-B(19)-B(23)	121.5(7)
B(15)-B(19)-B(23)	107.4(6)	B(14)-B(19)-B(23)	107.1(6)
B(20)-B(19)-B(23)	59.9(4)	B(18)-B(19)-B(23)	59.6(4)
F(20)-B(20)-B(15)	120.7(6)	F(20)-B(20)-B(16)	120.6(6)
B(15)-B(20)-B(16)	61.1(5)	F(20)-B(20)-B(19)	121.6(6)
B(15)-B(20)-B(19)	59.2(5)	B(16)-B(20)-B(19)	108.5(6)
F(20)-B(20)-B(23)	122.9(6)	B(15)-B(20)-B(23)	107.9(6)
B(16)-B(20)-B(23)	107.8(6)	B(19)-B(20)-B(23)	60.7(4)
F(20)-B(20)-B(21)	121.4(6)	B(15)-B(20)-B(21)	108.9(6)
B(16)-B(20)-B(21)	59.8(5)	B(19)-B(20)-B(21)	109.2(6)
B(23)-B(20)-B(21)	60.2(4)	F(21)-B(21)-B(17)	122.3(6)
F(21)-B(21)-B(16)	122.3(6)	B(17)-B(21)-B(16)	60.5(5)
F(21)-B(21)-B(20)	122.3(6)	B(17)-B(21)-B(20)	107.5(6)
B(16)-B(21)-B(20)	59.5(5)	F(21)-B(21)-B(23)	122.0(6)
B(17)-B(21)-B(23)	106.8(6)	B(16)-B(21)-B(23)	107.3(5)
B(20)-B(21)-B(23)	59.8(4)	F(21)-B(21)-B(22)	122.2(6)
B(17)-B(21)-B(22)	58.9(5)	B(16)-B(21)-B(22)	107.2(6)
B(20)-B(21)-B(22)	107.0(5)	B(23)-B(21)-B(22)	59.6(4)
F(22)-B(22)-B(17)	120.6(7)	F(22)-B(22)-B(13)	122.6(6)
B(17)-B(22)-B(13)	61.5(5)	F(22)-B(22)-B(23)	122.3(6)
B(17)-B(22)-B(23)	107.4(6)	B(13)-B(22)-B(23)	106.9(6)
F(22)-B(22)-B(18)	122.7(6)	B(17)-B(22)-B(18)	108.8(6)
B(13)-B(22)-B(18)	59.1(5)	B(23)-B(22)-B(18)	59.9(5)
F(22)-B(22)-B(21)	120.7(6)	B(17)-B(22)-B(21)	59.1(5)
B(13)-B(22)-B(21)	108.1(6)	B(23)-B(22)-B(21)	60.1(4)
B(18)-B(22)-B(21)	108.3(5)	F(23)-B(23)-B(22)	122.0(6)
F(23)-B(23)-B(20)	122.4(6)	B(22)-B(23)-B(20)	107.8(6)
F(23)-B(23)-B(18)	120.6(6)	B(22)-B(23)-B(18)	60.3(4)
B(20)-B(23)-B(18)	107.8(6)	F(23)-B(23)-B(21)	122.3(6)
B(22)-B(23)-B(21)	60.3(4)	B(20)-B(23)-B(21)	60.0(4)

B(18)-B(23)-B(21)	108.8(6)	F(23)-B(23)-B(19)	121.0(6)
B(22)-B(23)-B(19)	108.1(6)	B(20)-B(23)-B(19)	59.4(5)
B(18)-B(23)-B(19)	60.2(5)	B(21)-B(23)-B(19)	108.0(6)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for [(C6H6)Rh(CO)2][1-Et-CB11F11].

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + ... + 2hka^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Rh(1)	22(1)	23(1)	18(1)	1(1)	4(1)	2(1)
Rh(2)	27(1)	19(1)	22(1)	-2(1)	5(1)	0(1)
O(1)	43(4)	52(4)	58(4)	7(3)	4(3)	19(4)
O(2)	30(4)	33(4)	58(4)	-15(3)	9(3)	-4(3)
O(3)	72(5)	46(4)	26(3)	6(3)	0(3)	-26(3)
O(4)	42(4)	32(4)	43(4)	-9(3)	14(3)	-13(3)
C(1)	36(6)	38(6)	36(5)	4(4)	11(4)	-3(5)
C(2)	19(5)	36(5)	29(5)	-5(4)	0(4)	4(4)
C(3)	46(5)	12(4)	31(5)	2(4)	2(4)	-8(4)
C(4)	36(5)	27(5)	19(4)	-7(4)	7(4)	1(4)
C(5)	27(5)	15(4)	53(6)	-5(4)	13(4)	-4(4)
C(6)	40(5)	29(5)	28(5)	7(4)	11(4)	-3(4)
C(7)	19(4)	27(5)	37(5)	-5(4)	16(4)	3(4)
C(8)	15(4)	20(5)	41(5)	5(4)	3(4)	-2(3)
C(9)	20(4)	43(6)	25(5)	5(4)	-3(4)	-3(4)
C(10)	37(5)	26(5)	25(4)	-10(4)	6(4)	-3(4)
C(11)	33(5)	19(4)	20(4)	2(3)	1(3)	-2(4)
C(12)	27(5)	32(5)	20(4)	-13(4)	-1(4)	1(4)
C(13)	37(5)	17(4)	33(5)	4(4)	-6(4)	2(4)
C(14)	30(5)	30(5)	26(5)	11(4)	1(4)	2(4)
C(15)	33(5)	36(5)	30(5)	1(4)	11(4)	-1(4)
C(16)	40(5)	25(5)	23(4)	-6(4)	0(4)	10(4)
C(17)	29(5)	22(4)	30(5)	-5(4)	0(4)	-5(4)
C(18)	32(6)	37(6)	58(6)	-7(5)	-8(5)	5(4)
C(19)	22(5)	48(6)	52(6)	-14(5)	3(4)	3(4)
C(20)	16(4)	18(4)	30(4)	2(3)	2(3)	-2(3)
C(21)	21(5)	30(5)	47(5)	-4(4)	7(4)	-1(4)
C(22)	29(5)	61(7)	71(7)	11(6)	-14(5)	-6(5)
F(2)	35(3)	46(3)	36(3)	-22(2)	-7(2)	-4(2)
F(3)	52(3)	37(3)	39(3)	10(2)	-6(2)	-1(3)
F(4)	34(3)	20(3)	52(3)	-8(2)	-6(2)	2(2)
F(5)	34(3)	49(3)	42(3)	-17(2)	17(2)	5(2)
F(6)	38(3)	35(3)	57(3)	-2(2)	15(2)	-12(2)
F(7)	44(3)	57(3)	28(3)	-6(2)	15(2)	7(3)
F(8)	32(3)	32(3)	44(3)	10(2)	5(2)	-10(2)
F(9)	29(3)	28(3)	34(3)	-10(2)	-3(2)	-1(2)
F(10)	53(3)	29(3)	30(3)	13(2)	9(2)	0(2)
F(11)	39(3)	18(2)	48(3)	-11(2)	7(2)	2(2)
F(12)	29(3)	31(3)	34(3)	1(2)	4(2)	7(2)
F(13)	28(3)	17(2)	49(3)	0(2)	7(2)	-6(2)
F(14)	35(3)	31(3)	30(3)	-11(2)	-3(2)	1(2)
F(15)	32(3)	26(3)	40(3)	3(2)	-2(2)	11(2)
F(16)	37(3)	31(3)	39(3)	-5(2)	17(2)	8(2)
F(17)	34(3)	34(3)	38(3)	6(2)	16(2)	-4(2)
F(18)	33(3)	23(3)	30(2)	-8(2)	8(2)	3(2)

F(19)	39(3)	27(3)	23(2)	3(2)	8(2)	0(2)
F(20)	37(3)	15(2)	25(2)	-1(2)	6(2)	-1(2)
F(21)	41(3)	30(3)	16(2)	-6(2)	6(2)	-8(2)
F(22)	30(3)	19(2)	29(2)	8(2)	4(2)	-1(2)
F(23)	20(2)	24(2)	28(2)	3(2)	7(2)	-6(2)
B(2)	27(5)	17(5)	36(6)	-8(4)	1(4)	0(4)
B(3)	41(6)	31(6)	20(5)	6(4)	1(4)	-6(5)
B(4)	34(6)	13(5)	37(6)	-13(4)	-4(5)	-2(4)
B(5)	26(5)	24(5)	25(5)	-4(4)	7(4)	-1(4)
B(6)	28(6)	25(5)	36(6)	5(4)	9(5)	-1(4)
B(7)	26(5)	36(6)	19(5)	-1(4)	7(4)	4(4)
B(8)	28(6)	19(5)	31(5)	3(4)	0(4)	-5(4)
B(9)	19(5)	20(5)	28(5)	-5(4)	2(4)	0(4)
B(10)	33(6)	18(5)	16(5)	1(4)	3(4)	-8(4)
B(11)	27(5)	16(5)	28(5)	2(4)	7(4)	0(4)
B(12)	25(5)	13(4)	22(5)	1(4)	1(4)	0(4)
B(13)	30(6)	15(5)	38(6)	-1(4)	11(5)	-10(4)
B(14)	20(5)	17(5)	25(5)	-2(4)	2(4)	4(4)
B(15)	13(5)	22(5)	27(5)	1(4)	-5(4)	-1(4)
B(16)	24(5)	14(5)	29(5)	-4(4)	6(4)	3(4)
B(17)	17(5)	18(5)	31(5)	-1(4)	10(4)	0(4)
B(18)	32(6)	15(5)	22(5)	0(4)	9(4)	5(4)
B(19)	29(5)	22(5)	16(4)	4(4)	1(4)	-2(4)
B(20)	23(5)	16(5)	23(5)	0(4)	9(4)	0(4)
B(21)	31(5)	5(4)	18(4)	3(3)	8(4)	-4(4)
B(22)	22(5)	7(4)	30(5)	-1(4)	4(4)	3(4)
B(23)	19(5)	12(5)	15(4)	-1(3)	1(3)	0(4)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for [(C6H6)Rh(CO)2][1-Et-CB11F11].

	x	y	z	U(eq)
H(5)	952(3)	5263(7)	223(5)	37
H(6)	793(3)	6285(8)	1473(5)	38
H(7)	714(3)	8559(7)	1471(5)	32
H(8)	782(3)	9700(7)	218(5)	31
H(9)	861(3)	8645(8)	-1047(5)	37
H(10)	950(3)	6408(7)	-1042(5)	36
H(11)	4045(3)	3395(7)	194(4)	30
H(12)	4433(3)	1366(7)	655(4)	33
H(13)	4061(3)	195(7)	1682(5)	37
H(14)	3326(3)	1073(7)	2208(5)	35
H(15)	2896(3)	3009(8)	1665(5)	39
H(16)	3268(3)	4190(7)	659(5)	37
H(18A)	2505(3)	9196(8)	-1008(6)	54
H(18B)	2551(3)	9293(8)	-1972(6)	54
H(19A)	1733(3)	8373(8)	-1883(5)	62
H(19B)	2046(3)	7274(8)	-1293(5)	62
H(19C)	2093(3)	7371(8)	-2262(5)	62
H(21A)	-2252(3)	5708(8)	1667(5)	39
H(21B)	-2308(3)	6409(8)	2516(5)	39
H(22A)	-3022(3)	6961(9)	1417(6)	87
H(22B)	-2605(3)	7481(9)	879(6)	87
H(22C)	-2661(3)	8185(9)	1731(6)	87

Table 1. Crystal data and structure refinement for [Rh(CO)4][1-Et-CB11F11].

Identification code	shsccd47 Havighurst/Lupinetti
Empirical formula	$C_7H_5B_{11}F_{11}O_4Rh$
Formula weight	583.93
Temperature	171(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/c$
Unit cell dimensions	a = 10.634(3) Å alpha = 90° b = 8.853(3) Å beta = 94.03(2)° c = 20.918(7) Å gamma = 90°
Volume, Z	1964.4(10) $Å^3$, 4
Density (calculated)	1.974 Mg/m^3
Absorption coefficient	0.986 mm^{-1}
F(000)	1112
Crystal size	0.20 x 0.20 x 0.78 mm , clear yellow rods
θ range for data collection	1.92 to 28.40°
Limiting indices	$-13 \le h \le 13$, $-10 \le k \le 11$, $-25 \le l \le 27$
Reflections collected	12784
Independent reflections	4769 (R_{int} = 0.1072)
Absorption correction	SADABS
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	4769 / 0 / 308
Goodness-of-fit on F^2	0.537
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 = 0.0546, wR2 = 0.1333
R indices (all data)	R1 = 0.0939, wR2 = 0.1477
Extinction coefficient	0.0020(5)
Largest diff. peak and hole	1.398 and -0.869 $eÅ^{-3}$

Table 2. Atomic coordinates [x 10^4] and equivalent isotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for [Rh(CO)4][1-Et-CB11F11]. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Rh(1)	12437(1)	1302(1)	4031(1)	28(1)
C(1)	10608(6)	1313(7)	4040(4)	46(2)
C(2)	14273(6)	1335(7)	4062(3)	41(2)
C(3)	12374(5)	3456(7)	3819(3)	35(2)
C(4)	12493(5)	-834(7)	4261(3)	33(1)
O(1)	9558(4)	1331(5)	4069(4)	89(2)
O(2)	15318(4)	1358(5)	4097(3)	58(2)
O(3)	12388(4)	4693(5)	3698(3)	58(2)
O(4)	12520(4)	-2050(5)	4402(2)	51(1)
C(5)	12668(5)	-67(6)	1744(3)	28(1)
C(6)	12812(6)	-1582(6)	2116(3)	42(2)
C(7)	11871(7)	-1936(8)	2585(4)	61(2)
B(2)	13528(6)	1474(7)	2057(3)	29(2)
B(3)	13998(6)	450(7)	1368(3)	26(1)
B(4)	12608(6)	-198(7)	922(3)	30(2)
B(5)	11279(6)	415(7)	1330(3)	28(2)
B(6)	11836(6)	1457(8)	2019(3)	31(2)
B(7)	12647(6)	3107(8)	1778(3)	31(2)
B(8)	14005(6)	2460(7)	1370(3)	29(2)
B(9)	13430(6)	1420(7)	673(3)	31(2)
B(10)	11737(5)	1381(7)	644(3)	27(1)
B(11)	11257(6)	2427(7)	1326(3)	28(1)
B(12)	12601(6)	3031(7)	925(3)	30(2)
F(2)	14192(3)	1339(4)	2628(2)	45(1)
F(3)	15024(3)	-467(4)	1441(2)	39(1)
F(4)	12598(3)	-1591(3)	649(2)	41(1)
F(5)	10258(3)	-501(4)	1347(2)	38(1)
F(6)	11220(3)	1392(4)	2571(2)	41(1)
F(7)	12642(4)	4420(4)	2113(2)	52(1)
F(8)	15105(3)	3266(4)	1381(2)	45(1)
F(9)	14072(3)	1420(4)	117(2)	39(1)
F(10)	11029(3)	1390(4)	66(2)	38(1)
F(11)	10133(3)	3212(4)	1291(2)	42(1)
F(12)	12555(3)	4329(4)	550(2)	38(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for [Rh(CO)4][1-Et-CB11F11].

Rh(1)-C(1)	1.947(6)	Rh(1)-C(2)	1.949(6)
Rh(1)-C(4)	1.951(6)	Rh(1)-C(3)	1.958(6)
C(1)-O(1)	1.122(7)	C(2)-O(2)	1.109(7)
C(3)-O(3)	1.124(7)	C(4)-O(4)	1.116(7)
C(5)-C(6)	1.553(7)	C(5)-B(5)	1.712(8)
C(5)-B(4)	1.718(9)	C(5)-B(3)	1.726(8)
C(5)-B(6)	1.735(8)	C(5)-B(2)	1.745(8)
C(6)-C(7)	1.483(8)	B(2)-F(2)	1.350(7)
B(2)-B(8)	1.784(9)	B(2)-B(6)	1.796(9)
B(2)-B(7)	1.798(9)	B(2)-B(3)	1.801(10)
B(3)-F(3)	1.360(6)	B(3)-B(9)	1.759(9)
B(3)-B(8)	1.779(9)	B(3)-B(4)	1.786(9)
B(4)-F(4)	1.359(7)	B(4)-B(10)	1.754(9)
B(4)-B(9)	1.776(9)	B(4)-B(5)	1.786(9)
B(5)-F(5)	1.358(7)	B(5)-B(10)	1.768(9)
B(5)-B(6)	1.777(10)	B(5)-B(11)	1.781(9)
B(6)-F(6)	1.368(7)	B(6)-B(11)	1.759(9)
B(6)-B(7)	1.787(9)	B(7)-F(7)	1.358(7)
B(7)-B(12)	1.783(9)	B(7)-B(11)	1.801(9)
B(7)-B(8)	1.820(9)	B(8)-F(8)	1.370(7)
B(8)-B(12)	1.777(9)	B(8)-B(9)	1.794(9)
B(9)-F(9)	1.390(7)	B(9)-B(12)	1.776(10)
B(9)-B(10)	1.798(8)	B(10)-F(10)	1.379(7)
B(10)-B(12)	1.802(9)	B(10)-B(11)	1.804(10)
B(11)-F(11)	1.379(6)	B(11)-B(12)	1.790(9)
B(12)-F(12)	1.389(7)		

C(1)-Rh(1)-C(2)	177.3(3)	C(1)-Rh(1)-C(4)	90.9(2)
C(2)-Rh(1)-C(4)	89.6(2)	C(1)-Rh(1)-C(3)	88.8(2)
C(2)-Rh(1)-C(3)	90.6(2)	C(4)-Rh(1)-C(3)	178.9(2)
O(1)-C(1)-Rh(1)	177.4(7)	O(2)-C(2)-Rh(1)	178.2(6)
O(3)-C(3)-Rh(1)	177.3(5)	O(4)-C(4)-Rh(1)	178.8(5)
C(6)-C(5)-B(5)	121.3(5)	C(6)-C(5)-B(4)	116.0(5)
B(5)-C(5)-B(4)	62.7(4)	C(6)-C(5)-B(3)	113.7(4)
B(5)-C(5)-B(3)	114.2(4)	B(4)-C(5)-B(3)	62.5(4)
C(6)-C(5)-B(6)	122.7(5)	B(5)-C(5)-B(6)	62.1(4)
B(4)-C(5)-B(6)	113.6(4)	B(3)-C(5)-B(6)	113.4(4)
C(6)-C(5)-B(2)	117.2(5)	B(5)-C(5)-B(2)	113.9(4)
B(4)-C(5)-B(2)	114.2(4)	B(3)-C(5)-B(2)	62.5(4)
B(6)-C(5)-B(2)	62.1(3)	C(7)-C(6)-C(5)	117.8(5)
F(2)-B(2)-C(5)	119.4(5)	F(2)-B(2)-B(8)	126.6(5)
C(5)-B(2)-B(8)	104.5(4)	F(2)-B(2)-B(6)	119.9(5)
C(5)-B(2)-B(6)	58.7(3)	B(8)-B(2)-B(6)	108.0(4)
F(2)-B(2)-B(7)	125.9(5)	C(5)-B(2)-B(7)	105.0(4)
B(8)-B(2)-B(7)	61.1(4)	B(6)-B(2)-B(7)	59.6(4)
F(2)-B(2)-B(3)	120.4(5)	C(5)-B(2)-B(3)	58.2(3)
B(8)-B(2)-B(3)	59.5(4)	B(6)-B(2)-B(3)	107.1(4)
B(7)-B(2)-B(3)	108.2(4)	F(3)-B(3)-C(5)	117.8(5)
F(3)-B(3)-B(9)	127.6(5)	C(5)-B(3)-B(9)	105.1(4)
F(3)-B(3)-B(8)	126.4(5)	C(5)-B(3)-B(8)	105.5(4)
B(9)-B(3)-B(8)	61.0(4)	F(3)-B(3)-B(4)	119.6(5)
C(5)-B(3)-B(4)	58.6(3)	B(9)-B(3)-B(4)	60.1(4)
B(8)-B(3)-B(4)	109.0(4)	F(3)-B(3)-B(2)	118.4(5)
C(5)-B(3)-B(2)	59.2(3)	B(9)-B(3)-B(2)	108.5(4)

B(8)-B(3)-B(2)	59.8(4)	B(4)-B(3)-B(2)	108.3(4)
F(4)-B(4)-C(5)	118.7(5)	F(4)-B(4)-B(10)	126.5(5)
C(5)-B(4)-B(10)	105.0(4)	F(4)-B(4)-B(9)	126.8(5)
C(5)-B(4)-B(9)	104.7(4)	B(10)-B(4)-B(9)	61.2(4)
F(4)-B(4)-B(3)	119.6(5)	C(5)-B(4)-B(3)	59.0(3)
B(10)-B(4)-B(3)	108.4(4)	B(9)-B(4)-B(3)	59.2(4)
F(4)-B(4)-B(5)	119.6(5)	C(5)-B(4)-B(5)	58.5(4)
B(10)-B(4)-B(5)	59.9(4)	B(9)-B(4)-B(5)	108.5(4)
B(3)-B(4)-B(5)	107.8(5)	F(5)-B(5)-C(5)	120.1(5)
F(5)-B(5)-B(10)	125.2(5)	C(5)-B(5)-B(10)	104.7(4)
F(5)-B(5)-B(6)	120.7(5)	C(5)-B(5)-B(6)	59.6(3)
B(10)-B(5)-B(6)	108.2(5)	F(5)-B(5)-B(11)	125.9(5)
C(5)-B(5)-B(11)	105.2(4)	B(10)-B(5)-B(11)	61.1(4)
B(6)-B(5)-B(11)	59.2(4)	F(5)-B(5)-B(4)	119.5(5)
C(5)-B(5)-B(4)	58.8(3)	B(10)-B(5)-B(4)	59.1(4)
B(6)-B(5)-B(4)	108.4(4)	B(11)-B(5)-B(4)	108.2(4)
F(6)-B(6)-C(5)	122.2(5)	F(6)-B(6)-B(11)	123.7(5)
C(5)-B(6)-B(11)	105.3(5)	F(6)-B(6)-B(5)	120.7(5)
C(5)-B(6)-B(5)	58.4(3)	B(11)-B(6)-B(5)	60.5(4)
F(6)-B(6)-B(7)	122.8(5)	C(5)-B(6)-B(7)	105.9(5)
B(11)-B(6)-B(7)	61.0(4)	B(5)-B(6)-B(7)	109.6(5)
F(6)-B(6)-B(2)	120.1(5)	C(5)-B(6)-B(2)	59.2(3)
B(11)-B(6)-B(2)	108.9(5)	B(5)-B(6)-B(2)	108.4(5)
B(7)-B(6)-B(2)	60.2(4)	F(7)-B(7)-B(12)	123.2(5)
F(7)-B(7)-B(6)	122.3(5)	B(12)-B(7)-B(6)	105.8(4)
F(7)-B(7)-B(2)	122.8(5)	B(12)-B(7)-B(2)	105.8(5)
B(6)-B(7)-B(2)	60.1(4)	F(7)-B(7)-B(11)	121.7(5)
B(12)-B(7)-B(11)	59.9(4)	B(6)-B(7)-B(11)	58.7(4)
B(2)-B(7)-B(11)	106.9(5)	F(7)-B(7)-B(8)	122.9(5)
B(12)-B(7)-B(8)	59.1(4)	B(6)-B(7)-B(8)	106.8(5)
B(2)-B(7)-B(8)	59.1(4)	B(11)-B(7)-B(8)	107.3(4)
F(8)-B(8)-B(12)	123.1(5)	F(8)-B(8)-B(3)	121.7(5)
B(12)-B(8)-B(3)	106.3(4)	F(8)-B(8)-B(2)	122.1(5)
B(12)-B(8)-B(2)	106.6(4)	B(3)-B(8)-B(2)	60.7(4)
F(8)-B(8)-B(9)	121.5(5)	B(12)-B(8)-B(9)	59.6(4)
B(3)-B(8)-B(9)	59.0(4)	B(2)-B(8)-B(9)	107.7(4)
F(8)-B(8)-B(7)	122.2(5)	B(12)-B(8)-B(7)	59.4(4)
B(3)-B(8)-B(7)	108.2(4)	B(2)-B(8)-B(7)	59.8(4)
B(9)-B(8)-B(7)	107.8(4)	F(9)-B(9)-B(3)	122.1(5)
F(9)-B(9)-B(4)	121.7(5)	B(3)-B(9)-B(4)	60.7(4)
F(9)-B(9)-B(12)	122.1(5)	B(3)-B(9)-B(12)	107.2(5)
B(4)-B(9)-B(12)	107.2(5)	F(9)-B(9)-B(8)	121.4(5)
B(3)-B(9)-B(8)	60.1(4)	B(4)-B(9)-B(8)	108.8(5)
B(12)-B(9)-B(8)	59.7(4)	F(9)-B(9)-B(10)	121.4(5)
B(3)-B(9)-B(10)	107.6(4)	B(4)-B(9)-B(10)	58.8(3)
B(12)-B(9)-B(10)	60.6(4)	B(8)-B(9)-B(10)	108.7(5)
F(10)-B(10)-B(4)	122.6(5)	F(10)-B(10)-B(5)	123.4(5)
B(4)-B(10)-B(5)	60.9(4)	F(10)-B(10)-B(9)	120.8(5)
B(4)-B(10)-B(9)	60.0(4)	B(5)-B(10)-B(9)	108.3(4)
F(10)-B(10)-B(12)	121.0(5)	B(4)-B(10)-B(12)	107.0(4)
B(5)-B(10)-B(12)	107.0(5)	B(9)-B(10)-B(12)	59.1(4)
F(10)-B(10)-B(11)	121.6(5)	B(4)-B(10)-B(11)	108.6(5)
B(5)-B(10)-B(11)	59.8(4)	B(9)-B(10)-B(11)	107.6(4)
B(12)-B(10)-B(11)	59.5(4)	F(11)-B(11)-B(6)	122.8(5)
F(11)-B(11)-B(5)	121.0(5)	B(6)-B(11)-B(5)	60.2(4)
F(11)-B(11)-B(12)	122.8(5)	B(6)-B(11)-B(12)	106.7(4)
B(5)-B(11)-B(12)	106.9(4)	F(11)-B(11)-B(7)	122.3(5)
B(6)-B(11)-B(7)	60.2(4)	B(5)-B(11)-B(7)	108.7(4)

B(12)-B(11)-B(7)	59.5(4)	F(11)-B(11)-B(10)	120.6(5)
B(6)-B(11)-B(10)	107.4(4)	B(5)-B(11)-B(10)	59.1(4)
B(12)-B(11)-B(10)	60.2(4)	B(7)-B(11)-B(10)	108.6(4)
F(12)-B(12)-B(9)	119.8(5)	F(12)-B(12)-B(8)	121.8(5)
B(9)-B(12)-B(8)	60.7(4)	F(12)-B(12)-B(7)	122.0(5)
B(9)-B(12)-B(7)	110.3(5)	B(8)-B(12)-B(7)	61.5(4)
F(12)-B(12)-B(11)	120.9(5)	B(9)-B(12)-B(11)	109.2(4)
B(8)-B(12)-B(11)	109.8(4)	B(7)-B(12)-B(11)	60.5(4)
F(12)-B(12)-B(10)	119.4(5)	B(9)-B(12)-B(10)	60.3(4)
B(8)-B(12)-B(10)	109.3(4)	B(7)-B(12)-B(10)	109.5(4)
B(11)-B(12)-B(10)	60.3(4)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters [$Å^2$ x 10^3] for [Rh(CO)4][1-Et-CB11F11].

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + ... + 2hka^* b^* U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Rh(1)	34(1)	21(1)	29(1)	-1(1)	2(1)	-1(1)
C(1)	47(4)	17(3)	73(5)	-4(3)	7(4)	-4(3)
C(2)	48(4)	19(3)	56(4)	-3(3)	-3(3)	1(3)
C(3)	23(3)	42(4)	40(4)	7(3)	8(3)	4(3)
C(4)	37(3)	33(4)	29(3)	0(3)	7(3)	3(3)
O(1)	31(2)	26(3)	213(8)	-10(3)	18(3)	-1(2)
O(2)	35(2)	28(3)	111(5)	-8(3)	-3(3)	1(2)
O(3)	35(2)	36(3)	105(5)	21(3)	12(3)	3(2)
O(4)	63(3)	30(3)	60(3)	15(2)	2(3)	-5(2)
C(5)	29(3)	20(3)	35(3)	5(2)	5(3)	6(2)
C(6)	54(4)	27(4)	47(4)	15(3)	10(3)	8(3)
C(7)	82(5)	44(4)	60(5)	23(4)	30(4)	5(4)
B(2)	30(3)	30(4)	28(4)	5(3)	0(3)	-1(3)
B(3)	24(3)	21(3)	34(4)	6(3)	4(3)	1(3)
B(4)	33(3)	21(3)	35(4)	-1(3)	-1(3)	4(3)
B(5)	27(3)	26(4)	32(4)	3(3)	4(3)	3(3)
B(6)	33(3)	30(4)	29(4)	2(3)	5(3)	0(3)
B(7)	42(4)	31(4)	19(3)	-2(3)	2(3)	-6(3)
B(8)	32(3)	22(3)	32(4)	3(3)	1(3)	-2(3)
B(9)	36(3)	25(4)	32(4)	0(3)	7(3)	-2(3)
B(10)	25(3)	25(3)	31(4)	5(3)	-2(3)	-3(3)
B(11)	30(3)	24(3)	31(4)	8(3)	7(3)	8(3)
B(12)	36(3)	21(3)	33(4)	17(3)	5(3)	-1(3)
F(2)	51(2)	51(2)	31(2)	6(2)	-11(2)	-8(2)
F(3)	30(2)	37(2)	51(2)	10(2)	8(2)	12(2)
F(4)	55(2)	23(2)	46(2)	-8(2)	7(2)	1(2)
F(5)	28(2)	41(2)	43(2)	8(2)	-2(2)	-10(2)
F(6)	48(2)	44(2)	31(2)	4(2)	14(2)	10(2)
F(7)	79(3)	26(2)	50(2)	-10(2)	3(2)	1(2)
F(8)	41(2)	39(2)	54(3)	9(2)	-1(2)	-17(2)
F(9)	40(2)	44(2)	33(2)	6(2)	15(2)	5(2)
F(10)	43(2)	43(2)	28(2)	6(2)	-5(2)	-11(2)
F(11)	37(2)	35(2)	54(2)	11(2)	7(2)	15(2)
F(12)	54(2)	24(2)	36(2)	13(1)	3(2)	2(2)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for [Rh(CO)4][1-Et-CB11F11].

	x	y	z	U(eq)
H(6A)	12795(6)	-2411(6)	1798(3)	51
H(6B)	13657(6)	-1592(6)	2347(3)	51
H(7A)	12070(7)	-2917(8)	2784(4)	91
H(7B)	11027(7)	-1974(8)	2364(4)	91
H(7C)	11893(7)	-1151(8)	2916(4)	91

Synthesis of $[Rh(CO)_4][1\text{-Et-}CB_{11}F_{11}]$

Approximate stoichiometric amounts of $Ag(1\text{-Et-}CB_{11}F_{11})$ (0.0568 mmol) and $[Rh(CO)_2Cl]_2$ (Aldrich, 97%) (0.0283 mmol) were dissolved separately in dry CH_2Cl_2 under N_2 atmosphere conditions ($[Rh(CO)_2Cl]_2$ was only moderately soluble). The $Ag(1\text{-Et-}CB_{11}F_{11})/CH_2Cl_2$ solution was added dropwise to the $[Rh(CO)_2Cl]_2/CH_2Cl_2$ suspension. An almost immediate color change from yellow to orange-gold was seen, along with the precipitation of a white solid. This mixture was then allowed to react overnight (~16 hrs) to ensure completion. A ^{19}F NMR spectrum was performed on the resulting orange-gold CH_2Cl_2 solution, with the expected 1:5 5 ratio of resonances at –247.9 ppm (q), –251.2 ppm (d), and –254.4 ppm (d) ($CFCl_3$) seen. The reaction mixture was then filtered to remove the side product AgCl, and the volume was then reduced by ~50% via high vacuum (~10^{-6} Torr). To this solution ~640 Torr CO (Matheson, 99.5%) was added, and immediately a pale yellow solid formed at the surface of the solution. This was allowed to react for ~1 hr. An IR spectrum (Flourolube®) was taken of this solid, giving a single absorbance band in the ν(CO) region at 2138 cm^{-1}. The solution and remaining solid were then warmed in an oil bath to ~50 °C, resulting in the dissolution of the pale yellow solid. The solution was allowed to slowly cool to room temperature overnight, resulting in the orange crystals used for X ray diffraction.

Synthesis of $[(\eta^6\text{-}C_6H_6)Rh(CO)_2][1\text{-Et-}CB_{11}F_{11}]$

Approximate stoichiometric amounts of $Ag(C_6H_6)(1\text{-Et-}CB_{11}F_{11})$ and $[Rh(CO)_2Cl]_2$ (Aldrich, 97%) were dissolved separately in dry CH_2Cl_2 under N_2 atmosphere conditions ($[Rh(CO)_2Cl]_2$ was only moderately soluble). The $Ag(C_6H_6)(1\text{-Et-}CB_{11}F_{11})/CH_2Cl_2$ solution was added dropwise to the $[Rh(CO)_2Cl]_2/CH_2Cl_2$ suspension. An almost immediate color change from yellow to orange was seen, along with the precipitation of a white solid. The reaction mixture was then filtered to remove the side product AgCl, and the CH_2Cl_2 was removed. An IR spectrum (Fluorolube®) was taken of this solid, giving two equal intensity absorbance bands in the ν(CO) region at 2115 and 2065 cm^{-1}. A small amount of this solid was dissolved in a minimal amount of dry CH_2Cl_2 (~2 mL) and this solution was placed in an NMR tube and stored at –18 °C for crystallization. The resulting orange crystals formed were used for X ray diffraction.