

Table 1. Crystal data and structure refinement for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (13).

Identification code	13	
Empirical formula	C ₆₆ H ₆₀ B N ₄ O ₂ P ₂ Rh	
Formula weight	1116.84	
Temperature	296(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	C2/c	
Unit cell dimensions	a = 22.4004(14) Å	α = 90°.
	b = 15.4434(10) Å	β = 95.021(2)°.
	c = 32.158(2) Å	γ = 90°.
Volume	11082.1(12) Å ³	
Z	8	
Density (calculated)	1.339 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.416 mm ⁻¹	
F(000)	4640	
Crystal size	0.11 x 0.11 x 0.09 mm ³	
Theta range for data collection	1.27 to 27.92°.	
Index ranges	-23 ≤ h ≤ 29, -20 ≤ k ≤ 17, -42 ≤ l ≤ 35	
Reflections collected	29241	
Independent reflections	12120 [R(int) = 0.0874]	
Completeness to theta = 27.92°	91.3 %	
Absorption correction	None	
Max. and min. transmission	0.9636 and 0.9557	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	12120 / 0 / 694	
Goodness-of-fit on F ²	0.749	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0471, wR2 = 0.1024	
R indices (all data)	R1 = 0.1689, wR2 = 0.1578	
Largest diff. peak and hole	0.472 and -0.341 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (13). U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Rh(1)	2059(1)	2739(1)	1517(1)	33(1)
B(1)	1024(3)	7838(4)	912(2)	39(2)
P(1)	2851(1)	3206(1)	1166(1)	37(1)
N(1)	968(2)	3573(3)	953(1)	47(1)
O(1)	2745(2)	1778(3)	2144(1)	60(1)
C(1)	1251(2)	2160(4)	775(2)	47(2)
O(2)	342(2)	4553(3)	1238(1)	60(1)
P(2)	1382(1)	2651(1)	2032(1)	33(1)
N(2)	1328(2)	2826(3)	1023(1)	41(1)
C(2)	1636(3)	1415(4)	887(2)	48(2)
N(3)	1971(2)	1484(3)	1232(2)	46(1)
C(3)	804(3)	2129(5)	404(2)	77(2)
N(4)	2341(2)	820(3)	1363(2)	64(2)
C(4)	1625(3)	630(4)	606(2)	78(2)
C(5)	3417(2)	3411(3)	1593(2)	38(1)
C(6)	3304(2)	2970(3)	1957(2)	38(1)
C(7)	3703(2)	2990(4)	2311(2)	54(2)
C(8)	4215(3)	3485(4)	2305(2)	62(2)
C(9)	4327(3)	3923(4)	1947(2)	63(2)
C(10)	3944(2)	3887(4)	1589(2)	51(2)
C(11)	2738(2)	2432(3)	1931(2)	40(1)
C(12)	2788(2)	4191(3)	863(2)	38(1)
C(13)	3245(3)	4451(4)	623(2)	53(2)
C(14)	3217(3)	5246(4)	419(2)	65(2)
C(15)	2741(3)	5782(4)	455(2)	70(2)
C(16)	2283(3)	5527(4)	680(2)	71(2)
C(17)	2299(3)	4738(4)	885(2)	52(2)
C(18)	3194(2)	2412(3)	843(2)	43(1)
C(19)	2871(3)	2116(4)	483(2)	56(2)
C(20)	3083(3)	1454(4)	248(2)	74(2)

C(21)	3611(4)	1069(6)	366(3)	100(3)
C(22)	3934(4)	1346(6)	717(3)	123(4)
C(23)	3725(3)	2012(5)	961(3)	85(2)
C(24)	600(2)	2529(3)	1823(2)	36(1)
C(25)	351(2)	3115(3)	1521(2)	40(1)
C(26)	-248(2)	3017(4)	1369(2)	51(2)
C(27)	-595(2)	2360(5)	1506(2)	59(2)
C(28)	-355(2)	1779(4)	1799(2)	51(2)
C(29)	235(2)	1877(3)	1962(2)	44(1)
C(30)	712(2)	3829(3)	1345(2)	43(1)
C(31)	1538(2)	1765(4)	2397(2)	42(1)
C(32)	1763(2)	1924(4)	2801(2)	54(2)
C(33)	1955(3)	1251(6)	3068(2)	80(2)
C(34)	1934(4)	422(7)	2927(3)	101(4)
C(35)	1707(3)	248(5)	2528(4)	94(3)
C(36)	1516(2)	912(4)	2249(2)	59(2)
C(37)	1340(2)	3593(3)	2373(2)	35(1)
C(38)	1793(2)	4197(3)	2431(2)	42(1)
C(39)	1751(3)	4907(4)	2689(2)	55(2)
C(40)	1256(3)	5004(4)	2906(2)	57(2)
C(41)	805(3)	4412(4)	2864(2)	57(2)
C(42)	839(3)	3712(4)	2600(2)	49(2)
C(111)	872(2)	7260(4)	492(2)	39(1)
C(112)	672(3)	6410(4)	499(2)	64(2)
C(113)	546(3)	5911(5)	141(3)	85(2)
C(114)	621(3)	6222(5)	-232(2)	75(2)
C(115)	813(3)	7067(5)	-266(2)	79(2)
C(116)	927(3)	7576(4)	93(2)	62(2)
C(121)	621(2)	8740(3)	895(2)	41(1)
C(122)	203(3)	8965(4)	569(2)	58(2)
C(123)	-120(3)	9733(5)	560(3)	77(2)
C(124)	-64(3)	10301(5)	875(3)	78(2)
C(125)	339(3)	10105(5)	1206(3)	82(2)
C(126)	673(3)	9335(4)	1221(2)	66(2)
C(131)	1744(2)	8123(3)	965(2)	43(1)
C(132)	2113(3)	8166(5)	646(2)	77(2)

C(133)	2705(3)	8456(6)	699(3)	104(3)
C(134)	2947(3)	8717(5)	1079(3)	91(3)
C(135)	2615(3)	8652(4)	1402(3)	75(2)
C(136)	2020(3)	8362(4)	1346(2)	68(2)
C(141)	865(2)	7255(3)	1318(2)	42(1)
C(142)	320(3)	7297(4)	1492(2)	58(2)
C(143)	171(3)	6762(5)	1808(2)	78(2)
C(144)	569(4)	6159(5)	1971(2)	81(2)
C(145)	1117(4)	6092(4)	1816(2)	73(2)
C(146)	1264(3)	6632(4)	1491(2)	59(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (13).

Rh(1)-C(11)	1.990(5)
Rh(1)-N(3)	2.145(5)
Rh(1)-N(2)	2.181(4)
Rh(1)-P(1)	2.2993(14)
Rh(1)-P(2)	2.3476(14)
Rh(1)-H	1.41(5)
B(1)-C(111)	1.629(8)
B(1)-C(141)	1.650(8)
B(1)-C(121)	1.658(8)
B(1)-C(131)	1.666(8)
P(1)-C(12)	1.806(5)
P(1)-C(18)	1.820(5)
P(1)-C(5)	1.815(5)
N(1)-N(2)	1.414(6)
N(1)-C(30)	1.485(7)
N(1)-H(1)	1.0927
O(1)-C(11)	1.219(6)
C(1)-N(2)	1.304(7)
C(1)-C(2)	1.464(8)
C(1)-C(3)	1.490(7)
O(2)-C(30)	1.417(6)
O(2)-H(2)	1.1217
P(2)-C(31)	1.816(6)
P(2)-C(24)	1.830(5)
P(2)-C(37)	1.830(5)
C(2)-N(3)	1.288(7)
C(2)-C(4)	1.511(8)
N(3)-N(4)	1.363(6)
C(3)-H(3A)	0.9600
C(3)-H(3B)	0.9600
C(3)-H(3C)	0.9600
N(4)-H(4A)	0.8253
N(4)-H(4B)	0.8801
C(4)-H(4C)	0.9600

C(4)-H(4D)	0.9600
C(4)-H(4E)	0.9600
C(5)-C(6)	1.394(7)
C(5)-C(10)	1.391(7)
C(6)-C(7)	1.384(7)
C(6)-C(11)	1.512(7)
C(7)-C(8)	1.380(8)
C(7)-H(7A)	0.9300
C(8)-C(9)	1.378(9)
C(8)-H(8A)	0.9300
C(9)-C(10)	1.375(8)
C(9)-H(9A)	0.9300
C(10)-H(10A)	0.9300
C(12)-C(17)	1.390(7)
C(12)-C(13)	1.393(7)
C(13)-C(14)	1.392(8)
C(13)-H(13A)	0.9300
C(14)-C(15)	1.362(8)
C(14)-H(14A)	0.9300
C(15)-C(16)	1.365(8)
C(15)-H(15A)	0.9300
C(16)-C(17)	1.384(8)
C(16)-H(16A)	0.9300
C(17)-H(17A)	0.9300
C(18)-C(23)	1.364(8)
C(18)-C(19)	1.387(8)
C(19)-C(20)	1.381(8)
C(19)-H(19A)	0.9300
C(20)-C(21)	1.349(10)
C(20)-H(20A)	0.9300
C(21)-C(22)	1.357(11)
C(21)-H(21A)	0.9300
C(22)-C(23)	1.399(10)
C(22)-H(22A)	0.9300
C(23)-H(23A)	0.9300
C(24)-C(25)	1.406(7)

C(24)-C(29)	1.394(7)
C(25)-C(26)	1.396(7)
C(25)-C(30)	1.507(7)
C(26)-C(27)	1.374(8)
C(26)-H(26A)	0.9300
C(27)-C(28)	1.375(8)
C(27)-H(27A)	0.9300
C(28)-C(29)	1.388(7)
C(28)-H(28A)	0.9300
C(29)-H(29A)	0.9300
C(30)-H(30)	1.0190
C(31)-C(32)	1.375(8)
C(31)-C(36)	1.399(8)
C(32)-C(33)	1.391(8)
C(32)-H(32A)	0.9300
C(33)-C(34)	1.357(11)
C(33)-H(33D)	0.9300
C(34)-C(35)	1.366(12)
C(34)-H(34A)	0.9300
C(35)-C(36)	1.404(10)
C(35)-H(35A)	0.9300
C(36)-H(36)	0.9300
C(37)-C(38)	1.380(7)
C(37)-C(42)	1.402(7)
C(38)-C(39)	1.382(7)
C(38)-H(38A)	0.9300
C(39)-C(40)	1.368(8)
C(39)-H(39A)	0.9300
C(40)-C(41)	1.360(8)
C(40)-H(40A)	0.9300
C(41)-C(42)	1.379(8)
C(41)-H(41A)	0.9300
C(42)-H(42A)	0.9300
C(111)-C(112)	1.386(7)
C(111)-C(116)	1.390(8)
C(112)-C(113)	1.394(9)

C(112)-H(11A)	0.9300
C(113)-C(114)	1.315(9)
C(113)-H(11B)	0.9300
C(114)-C(115)	1.382(9)
C(114)-H(11C)	0.9300
C(115)-C(116)	1.402(9)
C(115)-H(11D)	0.9300
C(116)-H(11E)	0.9300
C(121)-C(126)	1.392(8)
C(121)-C(122)	1.387(7)
C(122)-C(123)	1.389(8)
C(122)-H(12A)	0.9300
C(123)-C(124)	1.339(10)
C(123)-H(12B)	0.9300
C(124)-C(125)	1.369(10)
C(124)-H(12C)	0.9300
C(125)-C(126)	1.404(8)
C(125)-H(12D)	0.9300
C(126)-H(12E)	0.9300
C(131)-C(132)	1.375(8)
C(131)-C(136)	1.376(8)
C(132)-C(133)	1.396(9)
C(132)-H(13B)	0.9300
C(133)-C(134)	1.357(11)
C(133)-H(13C)	0.9300
C(134)-C(135)	1.332(10)
C(134)-H(13D)	0.9300
C(135)-C(136)	1.404(9)
C(135)-H(13E)	0.9300
C(136)-H(13F)	0.9300
C(141)-C(146)	1.396(7)
C(141)-C(142)	1.388(8)
C(142)-C(143)	1.374(9)
C(142)-H(14B)	0.9300
C(143)-C(144)	1.361(9)
C(143)-H(14C)	0.9300

C(144)-C(145)	1.369(9)
C(144)-H(14D)	0.9300
C(145)-C(146)	1.398(9)
C(145)-H(14E)	0.9300
C(146)-H(14F)	0.9300
C(11)-Rh(1)-N(3)	96.1(2)
C(11)-Rh(1)-N(2)	169.3(2)
N(3)-Rh(1)-N(2)	73.14(18)
C(11)-Rh(1)-P(1)	79.99(16)
N(3)-Rh(1)-P(1)	96.85(12)
N(2)-Rh(1)-P(1)	100.72(11)
C(11)-Rh(1)-P(2)	90.97(16)
N(3)-Rh(1)-P(2)	102.02(12)
N(2)-Rh(1)-P(2)	91.52(11)
P(1)-Rh(1)-P(2)	159.86(5)
C(11)-Rh(1)-H	92.4(18)
N(3)-Rh(1)-H	167.9(19)
N(2)-Rh(1)-H	98.2(18)
P(1)-Rh(1)-H	76.1(18)
P(2)-Rh(1)-H	86.4(18)
C(111)-B(1)-C(141)	108.2(4)
C(111)-B(1)-C(121)	111.1(4)
C(141)-B(1)-C(121)	109.3(5)
C(111)-B(1)-C(131)	111.1(5)
C(141)-B(1)-C(131)	109.6(4)
C(121)-B(1)-C(131)	107.5(4)
C(12)-P(1)-C(18)	106.0(3)
C(12)-P(1)-C(5)	106.1(2)
C(18)-P(1)-C(5)	104.4(2)
C(12)-P(1)-Rh(1)	120.12(17)
C(18)-P(1)-Rh(1)	116.84(18)
C(5)-P(1)-Rh(1)	101.58(18)
N(2)-N(1)-C(30)	109.7(4)
N(2)-N(1)-H(1)	100.7
C(30)-N(1)-H(1)	108.1

N(2)-C(1)-C(2)	115.2(5)
N(2)-C(1)-C(3)	124.0(6)
C(2)-C(1)-C(3)	120.7(6)
C(30)-O(2)-H(2)	118.4
C(31)-P(2)-C(24)	106.5(2)
C(31)-P(2)-C(37)	103.3(3)
C(24)-P(2)-C(37)	101.8(2)
C(31)-P(2)-Rh(1)	113.59(18)
C(24)-P(2)-Rh(1)	113.80(18)
C(37)-P(2)-Rh(1)	116.57(17)
C(1)-N(2)-N(1)	120.1(5)
C(1)-N(2)-Rh(1)	116.6(4)
N(1)-N(2)-Rh(1)	123.3(3)
N(3)-C(2)-C(1)	115.6(5)
N(3)-C(2)-C(4)	124.0(6)
C(1)-C(2)-C(4)	120.4(6)
C(2)-N(3)-N(4)	119.8(5)
C(2)-N(3)-Rh(1)	117.9(4)
N(4)-N(3)-Rh(1)	121.1(4)
C(1)-C(3)-H(3A)	109.5
C(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
C(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
N(3)-N(4)-H(4A)	118.1
N(3)-N(4)-H(4B)	109.1
H(4A)-N(4)-H(4B)	132.8
C(2)-C(4)-H(4C)	109.5
C(2)-C(4)-H(4D)	109.5
H(4C)-C(4)-H(4D)	109.5
C(2)-C(4)-H(4E)	109.5
H(4C)-C(4)-H(4E)	109.5
H(4D)-C(4)-H(4E)	109.5
C(6)-C(5)-C(10)	118.8(5)
C(6)-C(5)-P(1)	112.6(4)

C(10)-C(5)-P(1)	128.4(5)
C(5)-C(6)-C(7)	121.8(5)
C(5)-C(6)-C(11)	115.8(5)
C(7)-C(6)-C(11)	122.3(5)
C(6)-C(7)-C(8)	118.6(6)
C(6)-C(7)-H(7A)	120.7
C(8)-C(7)-H(7A)	120.7
C(9)-C(8)-C(7)	119.7(6)
C(9)-C(8)-H(8A)	120.2
C(7)-C(8)-H(8A)	120.2
C(10)-C(9)-C(8)	122.3(6)
C(10)-C(9)-H(9A)	118.9
C(8)-C(9)-H(9A)	118.9
C(9)-C(10)-C(5)	118.8(6)
C(9)-C(10)-H(10A)	120.6
C(5)-C(10)-H(10A)	120.6
O(1)-C(11)-C(6)	117.2(5)
O(1)-C(11)-Rh(1)	123.0(4)
C(6)-C(11)-Rh(1)	119.6(4)
C(17)-C(12)-C(13)	118.3(5)
C(17)-C(12)-P(1)	120.6(4)
C(13)-C(12)-P(1)	121.0(4)
C(12)-C(13)-C(14)	120.7(5)
C(12)-C(13)-H(13A)	119.7
C(14)-C(13)-H(13A)	119.7
C(15)-C(14)-C(13)	119.9(6)
C(15)-C(14)-H(14A)	120.0
C(13)-C(14)-H(14A)	120.0
C(16)-C(15)-C(14)	120.0(6)
C(16)-C(15)-H(15A)	120.0
C(14)-C(15)-H(15A)	120.0
C(15)-C(16)-C(17)	121.1(6)
C(15)-C(16)-H(16A)	119.4
C(17)-C(16)-H(16A)	119.4
C(12)-C(17)-C(16)	119.9(5)
C(12)-C(17)-H(17A)	120.1

C(16)-C(17)-H(17A)	120.1
C(23)-C(18)-C(19)	117.6(6)
C(23)-C(18)-P(1)	123.1(5)
C(19)-C(18)-P(1)	118.9(4)
C(20)-C(19)-C(18)	121.5(6)
C(20)-C(19)-H(19A)	119.3
C(18)-C(19)-H(19A)	119.3
C(21)-C(20)-C(19)	120.5(7)
C(21)-C(20)-H(20A)	119.7
C(19)-C(20)-H(20A)	119.7
C(20)-C(21)-C(22)	119.0(7)
C(20)-C(21)-H(21A)	120.5
C(22)-C(21)-H(21A)	120.5
C(21)-C(22)-C(23)	121.3(7)
C(21)-C(22)-H(22A)	119.3
C(23)-C(22)-H(22A)	119.3
C(18)-C(23)-C(22)	120.1(7)
C(18)-C(23)-H(23A)	119.9
C(22)-C(23)-H(23A)	119.9
C(25)-C(24)-C(29)	118.6(5)
C(25)-C(24)-P(2)	119.8(4)
C(29)-C(24)-P(2)	121.6(4)
C(24)-C(25)-C(26)	118.9(5)
C(24)-C(25)-C(30)	122.5(5)
C(26)-C(25)-C(30)	118.6(5)
C(27)-C(26)-C(25)	121.3(6)
C(27)-C(26)-H(26A)	119.3
C(25)-C(26)-H(26A)	119.3
C(26)-C(27)-C(28)	120.3(5)
C(26)-C(27)-H(27A)	119.8
C(28)-C(27)-H(27A)	119.8
C(27)-C(28)-C(29)	119.3(5)
C(27)-C(28)-H(28A)	120.4
C(29)-C(28)-H(28A)	120.4
C(28)-C(29)-C(24)	121.6(6)
C(28)-C(29)-H(29A)	119.2

C(24)-C(29)-H(29A)	119.2
O(2)-C(30)-N(1)	105.4(4)
O(2)-C(30)-C(25)	110.3(4)
N(1)-C(30)-C(25)	112.6(4)
O(2)-C(30)-H(30)	108.8
N(1)-C(30)-H(30)	101.4
C(25)-C(30)-H(30)	117.4
C(32)-C(31)-C(36)	119.2(6)
C(32)-C(31)-P(2)	120.7(5)
C(36)-C(31)-P(2)	119.4(5)
C(31)-C(32)-C(33)	121.2(7)
C(31)-C(32)-H(32A)	119.4
C(33)-C(32)-H(32A)	119.4
C(34)-C(33)-C(32)	120.0(8)
C(34)-C(33)-H(33D)	120.0
C(32)-C(33)-H(33D)	120.0
C(35)-C(34)-C(33)	119.9(8)
C(35)-C(34)-H(34A)	120.0
C(33)-C(34)-H(34A)	120.0
C(34)-C(35)-C(36)	121.5(8)
C(34)-C(35)-H(35A)	119.2
C(36)-C(35)-H(35A)	119.2
C(31)-C(36)-C(35)	118.2(7)
C(31)-C(36)-H(36)	120.9
C(35)-C(36)-H(36)	120.9
C(38)-C(37)-C(42)	117.0(5)
C(38)-C(37)-P(2)	122.9(4)
C(42)-C(37)-P(2)	120.1(4)
C(37)-C(38)-C(39)	121.9(5)
C(37)-C(38)-H(38A)	119.0
C(39)-C(38)-H(38A)	119.0
C(40)-C(39)-C(38)	119.6(5)
C(40)-C(39)-H(39A)	120.2
C(38)-C(39)-H(39A)	120.2
C(41)-C(40)-C(39)	120.2(6)
C(41)-C(40)-H(40A)	119.9

C(39)-C(40)-H(40A)	119.9
C(40)-C(41)-C(42)	120.5(6)
C(40)-C(41)-H(41A)	119.7
C(42)-C(41)-H(41A)	119.7
C(41)-C(42)-C(37)	120.8(5)
C(41)-C(42)-H(42A)	119.6
C(37)-C(42)-H(42A)	119.6
C(112)-C(111)-C(116)	113.6(5)
C(112)-C(111)-B(1)	123.4(5)
C(116)-C(111)-B(1)	122.9(5)
C(111)-C(112)-C(113)	123.6(7)
C(111)-C(112)-H(11A)	118.2
C(113)-C(112)-H(11A)	118.2
C(114)-C(113)-C(112)	121.2(7)
C(114)-C(113)-H(11B)	119.4
C(112)-C(113)-H(11B)	119.4
C(113)-C(114)-C(115)	118.9(7)
C(113)-C(114)-H(11C)	120.6
C(115)-C(114)-H(11C)	120.6
C(114)-C(115)-C(116)	120.0(7)
C(114)-C(115)-H(11D)	120.0
C(116)-C(115)-H(11D)	120.0
C(111)-C(116)-C(115)	122.7(6)
C(111)-C(116)-H(11E)	118.7
C(115)-C(116)-H(11E)	118.7
C(126)-C(121)-C(122)	114.2(5)
C(126)-C(121)-B(1)	121.4(5)
C(122)-C(121)-B(1)	124.4(5)
C(121)-C(122)-C(123)	123.2(6)
C(121)-C(122)-H(12A)	118.4
C(123)-C(122)-H(12A)	118.4
C(124)-C(123)-C(122)	121.9(7)
C(124)-C(123)-H(12B)	119.0
C(122)-C(123)-H(12B)	119.1
C(123)-C(124)-C(125)	117.2(7)
C(123)-C(124)-H(12C)	121.4

C(125)-C(124)-H(12C)	121.4
C(124)-C(125)-C(126)	121.8(7)
C(124)-C(125)-H(12D)	119.1
C(126)-C(125)-H(12D)	119.1
C(121)-C(126)-C(125)	121.7(7)
C(121)-C(126)-H(12E)	119.2
C(125)-C(126)-H(12E)	119.2
C(132)-C(131)-C(136)	113.6(6)
C(132)-C(131)-B(1)	125.2(5)
C(136)-C(131)-B(1)	121.2(5)
C(131)-C(132)-C(133)	123.5(7)
C(131)-C(132)-H(13B)	118.2
C(133)-C(132)-H(13B)	118.2
C(134)-C(133)-C(132)	120.3(8)
C(134)-C(133)-H(13C)	119.8
C(132)-C(133)-H(13C)	119.8
C(135)-C(134)-C(133)	118.4(8)
C(135)-C(134)-H(13D)	120.8
C(133)-C(134)-H(13D)	120.8
C(134)-C(135)-C(136)	120.8(7)
C(134)-C(135)-H(13E)	119.6
C(136)-C(135)-H(13E)	119.6
C(131)-C(136)-C(135)	123.2(7)
C(131)-C(136)-H(13F)	118.4
C(135)-C(136)-H(13F)	118.4
C(146)-C(141)-C(142)	115.3(6)
C(146)-C(141)-B(1)	121.2(5)
C(142)-C(141)-B(1)	123.4(5)
C(141)-C(142)-C(143)	123.3(6)
C(141)-C(142)-H(14B)	118.4
C(143)-C(142)-H(14B)	118.4
C(144)-C(143)-C(142)	120.3(7)
C(144)-C(143)-H(14C)	119.9
C(142)-C(143)-H(14C)	119.9
C(143)-C(144)-C(145)	119.3(7)
C(143)-C(144)-H(14D)	120.4

C(145)-C(144)-H(14D)	120.4
C(146)-C(145)-C(144)	120.3(7)
C(146)-C(145)-H(14E)	119.9
C(144)-C(145)-H(14E)	119.9
C(145)-C(146)-C(141)	121.6(6)
C(145)-C(146)-H(14F)	119.2
C(141)-C(146)-H(14F)	119.2

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (13). The Anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Rh(1)	29(1)	33(1)	37(1)	2(1)	3(1)	1(1)
B(1)	44(4)	35(4)	37(4)	-4(3)	-2(3)	-3(3)
P(1)	32(1)	39(1)	41(1)	2(1)	6(1)	2(1)
N(1)	44(3)	57(3)	39(3)	10(2)	-1(2)	4(2)
O(1)	39(2)	65(3)	75(3)	30(2)	1(2)	5(2)
C(1)	42(3)	64(4)	35(3)	-4(3)	3(3)	-12(3)
O(2)	57(3)	53(3)	70(3)	8(2)	-7(2)	17(2)
P(2)	30(1)	30(1)	38(1)	2(1)	3(1)	-3(1)
N(2)	39(3)	49(3)	35(3)	7(2)	7(2)	-3(2)
C(2)	56(4)	44(4)	45(4)	-10(3)	15(3)	-15(3)
N(3)	49(3)	35(3)	54(4)	5(2)	18(3)	1(2)
C(3)	76(5)	97(6)	56(5)	-6(4)	-10(4)	-14(4)
N(4)	74(4)	46(4)	74(5)	-5(3)	10(4)	7(3)
C(4)	99(5)	59(4)	78(6)	-26(4)	23(4)	-19(4)
C(5)	28(3)	41(3)	46(4)	-5(3)	4(3)	2(2)
C(6)	32(3)	37(3)	43(4)	0(3)	3(3)	10(2)
C(7)	33(3)	68(4)	59(4)	6(3)	-6(3)	7(3)
C(8)	39(4)	81(5)	62(5)	-9(4)	-13(3)	2(3)
C(9)	34(3)	80(5)	73(5)	-3(4)	-2(3)	-11(3)
C(10)	34(3)	61(4)	59(4)	4(3)	5(3)	-1(3)
C(11)	34(3)	42(4)	44(4)	7(3)	6(3)	6(2)
C(12)	38(3)	36(3)	40(4)	3(2)	9(3)	3(2)
C(13)	52(4)	48(4)	61(4)	5(3)	22(3)	7(3)
C(14)	77(5)	52(4)	69(5)	17(4)	32(4)	-2(4)
C(15)	92(5)	52(4)	70(5)	24(4)	24(4)	7(4)
C(16)	72(5)	58(4)	85(6)	27(4)	25(4)	29(4)
C(17)	48(4)	53(4)	56(4)	13(3)	18(3)	4(3)
C(18)	34(3)	42(3)	53(4)	-3(3)	12(3)	3(2)
C(19)	55(4)	56(4)	60(4)	-5(3)	18(3)	7(3)
C(20)	93(6)	70(5)	61(5)	-18(4)	17(4)	10(4)
C(21)	109(7)	93(6)	101(8)	-33(6)	20(6)	29(6)

C(22)	86(6)	131(8)	149(10)	-60(7)	-12(6)	68(6)
C(23)	55(4)	95(6)	101(6)	-40(5)	-12(4)	25(4)
C(24)	31(3)	40(3)	37(3)	-10(2)	6(2)	1(2)
C(25)	39(3)	48(3)	33(3)	-9(3)	5(3)	0(3)
C(26)	36(3)	74(4)	43(4)	1(3)	-3(3)	6(3)
C(27)	28(3)	91(5)	57(4)	-14(4)	5(3)	-10(3)
C(28)	35(3)	60(4)	60(4)	-15(3)	16(3)	-18(3)
C(29)	38(3)	45(3)	51(4)	-12(3)	10(3)	-3(3)
C(30)	37(3)	44(3)	46(4)	5(3)	-4(3)	1(3)
C(31)	33(3)	40(3)	53(4)	13(3)	8(3)	4(3)
C(32)	37(3)	61(4)	65(5)	27(3)	13(3)	11(3)
C(33)	60(4)	109(7)	74(6)	45(5)	22(4)	33(5)
C(34)	68(6)	103(8)	138(9)	79(7)	50(6)	35(5)
C(35)	63(5)	43(4)	184(10)	38(6)	49(6)	13(4)
C(36)	41(3)	45(4)	94(6)	12(4)	14(3)	-4(3)
C(37)	40(3)	37(3)	26(3)	6(2)	-1(2)	2(2)
C(38)	35(3)	50(4)	42(4)	4(3)	3(3)	-8(3)
C(39)	75(5)	37(4)	51(4)	-8(3)	-4(4)	-16(3)
C(40)	83(5)	45(4)	44(4)	-10(3)	0(4)	6(4)
C(41)	57(4)	56(4)	60(5)	-9(3)	12(3)	9(3)
C(42)	49(4)	44(4)	55(4)	-7(3)	6(3)	-5(3)
C(111)	36(3)	40(3)	40(3)	4(3)	0(2)	-5(3)
C(112)	78(5)	62(4)	51(4)	-8(3)	2(4)	-18(4)
C(113)	112(6)	64(5)	78(6)	-23(4)	-9(5)	-30(4)
C(114)	102(6)	66(5)	55(5)	-29(4)	-4(4)	7(4)
C(115)	81(5)	110(7)	46(5)	-5(4)	9(4)	-7(5)
C(116)	66(4)	67(5)	52(4)	-11(3)	6(3)	-7(3)
C(121)	44(3)	39(3)	39(4)	5(3)	7(3)	-2(3)
C(122)	54(4)	63(4)	56(5)	-8(3)	7(3)	14(3)
C(123)	83(5)	73(5)	77(6)	11(4)	11(4)	33(4)
C(124)	67(5)	61(5)	109(7)	17(5)	29(5)	17(4)
C(125)	86(6)	56(5)	109(7)	-30(5)	25(5)	3(4)
C(126)	75(5)	60(4)	62(5)	-19(4)	2(4)	12(4)
C(131)	51(4)	34(3)	41(4)	-2(3)	-7(3)	-3(3)
C(132)	51(4)	117(6)	63(5)	1(4)	0(4)	-18(4)
C(133)	53(5)	159(9)	100(8)	-3(6)	13(5)	-18(5)

C(134)	51(5)	87(6)	130(9)	6(6)	-17(6)	-6(4)
C(135)	78(6)	63(5)	75(6)	2(4)	-37(5)	-7(4)
C(136)	62(4)	68(5)	70(5)	-1(4)	-6(4)	-12(4)
C(141)	54(3)	32(3)	38(3)	-5(3)	0(3)	-3(3)
C(142)	62(4)	57(4)	56(4)	9(4)	9(3)	-5(4)
C(143)	87(5)	85(6)	65(5)	15(4)	19(4)	-14(5)
C(144)	119(7)	67(5)	57(5)	19(4)	3(5)	-32(5)
C(145)	107(6)	52(4)	58(5)	16(4)	-9(4)	9(4)
C(146)	68(4)	54(4)	55(5)	1(3)	2(3)	12(3)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$) for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (13).

	x	y	z	U(eq)
H	2107(19)	3630(30)	1616(14)	50
H(1)	606	3314	739	74(19)
H(2)	504	5212	1343	270(60)
H(3A)	594	2671	377	116
H(3B)	524	1670	438	116
H(3C)	1007	2026	158	116
H(4A)	2550	878	1586	70(30)
H(4B)	2288	387	1186	70(20)
H(4C)	1902	204	726	116
H(4D)	1738	796	336	116
H(4E)	1228	390	578	116
H(7A)	3627	2677	2547	65
H(8A)	4483	3522	2542	74
H(9A)	4673	4255	1947	75
H(10A)	4035	4175	1349	62
H(13A)	3573	4090	600	63
H(14A)	3522	5411	257	78
H(15A)	2729	6323	327	84
H(16A)	1954	5889	696	85
H(17A)	1984	4574	1038	62
H(19A)	2504	2370	398	68
H(20A)	2860	1272	6	88
H(21A)	3753	620	208	120
H(22A)	4301	1088	798	148
H(23A)	3948	2183	1205	102
H(26A)	-416	3404	1170	61
H(27A)	-993	2309	1401	70
H(28A)	-587	1326	1887	61
H(29A)	392	1498	2168	53
H(30)	1085	4035	1522	19(11)

H(32A)	1787	2491	2898	65
H(33D)	2098	1369	3342	96
H(34A)	2074	-26	3102	121
H(35A)	1679	-325	2438	113
H(36)	1378	789	1975	71
H(38A)	2137	4125	2293	51
H(39A)	2057	5315	2716	66
H(40A)	1227	5477	3082	69
H(41A)	472	4479	3014	69
H(42A)	526	3315	2573	59
H(11A)	620	6159	756	76
H(11B)	406	5348	166	102
H(11C)	546	5878	-468	90
H(11D)	866	7298	-528	95
H(11E)	1045	8148	63	74
H(12A)	136	8584	346	69
H(12B)	-384	9856	327	93
H(12C)	-289	10808	869	93
H(12D)	393	10493	1428	99
H(12E)	935	9220	1455	79
H(13B)	1960	7992	381	93
H(13C)	2935	8470	471	124
H(13D)	3335	8936	1114	109
H(13E)	2781	8800	1668	90
H(13F)	1801	8331	1579	81
H(14B)	42	7708	1389	69
H(14C)	-202	6811	1911	94
H(14D)	469	5796	2185	98
H(14E)	1393	5686	1927	87
H(14F)	1637	6574	1388	71

Table 6. Torsion angles [°] for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (13).

C(11)-Rh(1)-P(1)-C(12)	-141.7(3)
N(3)-Rh(1)-P(1)-C(12)	123.3(2)
N(2)-Rh(1)-P(1)-C(12)	49.2(2)
P(2)-Rh(1)-P(1)-C(12)	-77.3(3)
C(11)-Rh(1)-P(1)-C(18)	87.7(3)
N(3)-Rh(1)-P(1)-C(18)	-7.4(3)
N(2)-Rh(1)-P(1)-C(18)	-81.5(2)
P(2)-Rh(1)-P(1)-C(18)	152.1(2)
C(11)-Rh(1)-P(1)-C(5)	-25.1(2)
N(3)-Rh(1)-P(1)-C(5)	-120.2(2)
N(2)-Rh(1)-P(1)-C(5)	165.7(2)
P(2)-Rh(1)-P(1)-C(5)	39.3(2)
C(11)-Rh(1)-P(2)-C(31)	-39.1(3)
N(3)-Rh(1)-P(2)-C(31)	57.4(3)
N(2)-Rh(1)-P(2)-C(31)	130.5(2)
P(1)-Rh(1)-P(2)-C(31)	-101.7(3)
C(11)-Rh(1)-P(2)-C(24)	-161.1(2)
N(3)-Rh(1)-P(2)-C(24)	-64.7(2)
N(2)-Rh(1)-P(2)-C(24)	8.4(2)
P(1)-Rh(1)-P(2)-C(24)	136.2(2)
C(11)-Rh(1)-P(2)-C(37)	80.8(2)
N(3)-Rh(1)-P(2)-C(37)	177.3(2)
N(2)-Rh(1)-P(2)-C(37)	-109.6(2)
P(1)-Rh(1)-P(2)-C(37)	18.2(3)
C(2)-C(1)-N(2)-N(1)	-178.1(4)
C(3)-C(1)-N(2)-N(1)	1.2(8)
C(2)-C(1)-N(2)-Rh(1)	5.1(6)
C(3)-C(1)-N(2)-Rh(1)	-175.5(4)
C(30)-N(1)-N(2)-C(1)	129.8(5)
C(30)-N(1)-N(2)-Rh(1)	-53.7(5)
C(11)-Rh(1)-N(2)-C(1)	-7.3(12)
N(3)-Rh(1)-N(2)-C(1)	-8.5(4)
P(1)-Rh(1)-N(2)-C(1)	85.4(4)
P(2)-Rh(1)-N(2)-C(1)	-110.6(4)

C(11)-Rh(1)-N(2)-N(1)	176.0(9)
N(3)-Rh(1)-N(2)-N(1)	174.8(4)
P(1)-Rh(1)-N(2)-N(1)	-91.2(3)
P(2)-Rh(1)-N(2)-N(1)	72.7(3)
N(2)-C(1)-C(2)-N(3)	4.9(7)
C(3)-C(1)-C(2)-N(3)	-174.5(5)
N(2)-C(1)-C(2)-C(4)	-175.2(5)
C(3)-C(1)-C(2)-C(4)	5.4(8)
C(1)-C(2)-N(3)-N(4)	179.4(5)
C(4)-C(2)-N(3)-N(4)	-0.5(8)
C(1)-C(2)-N(3)-Rh(1)	-12.7(6)
C(4)-C(2)-N(3)-Rh(1)	167.3(4)
C(11)-Rh(1)-N(3)-C(2)	-168.3(4)
N(2)-Rh(1)-N(3)-C(2)	11.5(4)
P(1)-Rh(1)-N(3)-C(2)	-87.7(4)
P(2)-Rh(1)-N(3)-C(2)	99.4(4)
C(11)-Rh(1)-N(3)-N(4)	-0.6(4)
N(2)-Rh(1)-N(3)-N(4)	179.2(4)
P(1)-Rh(1)-N(3)-N(4)	80.0(4)
P(2)-Rh(1)-N(3)-N(4)	-92.9(4)
C(12)-P(1)-C(5)-C(6)	147.2(4)
C(18)-P(1)-C(5)-C(6)	-101.0(4)
Rh(1)-P(1)-C(5)-C(6)	20.9(4)
C(12)-P(1)-C(5)-C(10)	-37.4(5)
C(18)-P(1)-C(5)-C(10)	74.4(5)
Rh(1)-P(1)-C(5)-C(10)	-163.8(5)
C(10)-C(5)-C(6)-C(7)	-0.3(8)
P(1)-C(5)-C(6)-C(7)	175.5(4)
C(10)-C(5)-C(6)-C(11)	-177.1(5)
P(1)-C(5)-C(6)-C(11)	-1.3(6)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	2.1(8)
C(11)-C(6)-C(7)-C(8)	178.7(5)
C(6)-C(7)-C(8)-C(9)	-1.9(9)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-0.1(10)
C(8)-C(9)-C(10)-C(5)	1.9(9)
C(6)-C(5)-C(10)-C(9)	-1.7(8)

P(1)-C(5)-C(10)-C(9)	-176.8(5)
C(5)-C(6)-C(11)-O(1)	148.4(5)
C(7)-C(6)-C(11)-O(1)	-28.4(8)
C(5)-C(6)-C(11)-Rh(1)	-25.2(6)
C(7)-C(6)-C(11)-Rh(1)	158.0(4)
N(3)-Rh(1)-C(11)-O(1)	-46.9(5)
N(2)-Rh(1)-C(11)-O(1)	-48.0(13)
P(1)-Rh(1)-C(11)-O(1)	-142.8(5)
P(2)-Rh(1)-C(11)-O(1)	55.3(5)
N(3)-Rh(1)-C(11)-C(6)	126.3(4)
N(2)-Rh(1)-C(11)-C(6)	125.1(9)
P(1)-Rh(1)-C(11)-C(6)	30.4(4)
P(2)-Rh(1)-C(11)-C(6)	-131.5(4)
C(18)-P(1)-C(12)-C(17)	144.3(5)
C(5)-P(1)-C(12)-C(17)	-105.1(5)
Rh(1)-P(1)-C(12)-C(17)	9.1(5)
C(18)-P(1)-C(12)-C(13)	-40.0(5)
C(5)-P(1)-C(12)-C(13)	70.6(5)
Rh(1)-P(1)-C(12)-C(13)	-175.2(4)
C(17)-C(12)-C(13)-C(14)	1.2(9)
P(1)-C(12)-C(13)-C(14)	-174.6(5)
C(12)-C(13)-C(14)-C(15)	0.8(10)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	-2.4(11)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	2.1(11)
C(13)-C(12)-C(17)-C(16)	-1.5(9)
P(1)-C(12)-C(17)-C(16)	174.3(5)
C(15)-C(16)-C(17)-C(12)	-0.1(10)
C(12)-P(1)-C(18)-C(23)	120.3(6)
C(5)-P(1)-C(18)-C(23)	8.4(6)
Rh(1)-P(1)-C(18)-C(23)	-102.8(6)
C(12)-P(1)-C(18)-C(19)	-67.9(5)
C(5)-P(1)-C(18)-C(19)	-179.8(5)
Rh(1)-P(1)-C(18)-C(19)	69.0(5)
C(23)-C(18)-C(19)-C(20)	-1.3(9)
P(1)-C(18)-C(19)-C(20)	-173.5(5)
C(18)-C(19)-C(20)-C(21)	0.7(11)

C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	-0.4(13)
C(20)-C(21)-C(22)-C(23)	0.9(16)
C(19)-C(18)-C(23)-C(22)	1.7(11)
P(1)-C(18)-C(23)-C(22)	173.6(7)
C(21)-C(22)-C(23)-C(18)	-1.5(15)
C(31)-P(2)-C(24)-C(25)	-178.4(4)
C(37)-P(2)-C(24)-C(25)	73.8(5)
Rh(1)-P(2)-C(24)-C(25)	-52.4(4)
C(31)-P(2)-C(24)-C(29)	3.0(5)
C(37)-P(2)-C(24)-C(29)	-104.9(4)
Rh(1)-P(2)-C(24)-C(29)	128.9(4)
C(29)-C(24)-C(25)-C(26)	-0.6(8)
P(2)-C(24)-C(25)-C(26)	-179.3(4)
C(29)-C(24)-C(25)-C(30)	-178.6(5)
P(2)-C(24)-C(25)-C(30)	2.7(7)
C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	-0.4(8)
C(30)-C(25)-C(26)-C(27)	177.8(5)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	-0.1(9)
C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	1.6(9)
C(27)-C(28)-C(29)-C(24)	-2.6(8)
C(25)-C(24)-C(29)-C(28)	2.1(8)
P(2)-C(24)-C(29)-C(28)	-179.2(4)
N(2)-N(1)-C(30)-O(2)	-177.6(4)
N(2)-N(1)-C(30)-C(25)	-57.3(6)
C(24)-C(25)-C(30)-O(2)	-148.9(5)
C(26)-C(25)-C(30)-O(2)	33.0(7)
C(24)-C(25)-C(30)-N(1)	93.7(6)
C(26)-C(25)-C(30)-N(1)	-84.3(6)
C(24)-P(2)-C(31)-C(32)	-125.7(4)
C(37)-P(2)-C(31)-C(32)	-19.0(5)
Rh(1)-P(2)-C(31)-C(32)	108.2(4)
C(24)-P(2)-C(31)-C(36)	64.1(5)
C(37)-P(2)-C(31)-C(36)	170.9(4)
Rh(1)-P(2)-C(31)-C(36)	-61.9(4)
C(36)-C(31)-C(32)-C(33)	-1.6(8)
P(2)-C(31)-C(32)-C(33)	-171.7(4)

C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	1.4(9)
C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	-2.0(11)
C(33)-C(34)-C(35)-C(36)	2.7(12)
C(32)-C(31)-C(36)-C(35)	2.2(8)
P(2)-C(31)-C(36)-C(35)	172.5(5)
C(34)-C(35)-C(36)-C(31)	-2.8(10)
C(31)-P(2)-C(37)-C(38)	104.1(5)
C(24)-P(2)-C(37)-C(38)	-145.6(4)
Rh(1)-P(2)-C(37)-C(38)	-21.1(5)
C(31)-P(2)-C(37)-C(42)	-73.8(5)
C(24)-P(2)-C(37)-C(42)	36.5(5)
Rh(1)-P(2)-C(37)-C(42)	161.0(4)
C(42)-C(37)-C(38)-C(39)	-2.3(8)
P(2)-C(37)-C(38)-C(39)	179.8(4)
C(37)-C(38)-C(39)-C(40)	2.2(9)
C(38)-C(39)-C(40)-C(41)	-0.7(9)
C(39)-C(40)-C(41)-C(42)	-0.7(10)
C(40)-C(41)-C(42)-C(37)	0.5(9)
C(38)-C(37)-C(42)-C(41)	0.9(8)
P(2)-C(37)-C(42)-C(41)	178.9(5)
C(141)-B(1)-C(111)-C(112)	-2.9(7)
C(121)-B(1)-C(111)-C(112)	-122.8(6)
C(131)-B(1)-C(111)-C(112)	117.5(6)
C(141)-B(1)-C(111)-C(116)	176.8(5)
C(121)-B(1)-C(111)-C(116)	56.8(7)
C(131)-B(1)-C(111)-C(116)	-62.8(7)
C(116)-C(111)-C(112)-C(113)	0.8(9)
B(1)-C(111)-C(112)-C(113)	-179.5(6)
C(111)-C(112)-C(113)-C(114)	1.3(12)
C(112)-C(113)-C(114)-C(115)	-1.8(12)
C(113)-C(114)-C(115)-C(116)	0.3(11)
C(112)-C(111)-C(116)-C(115)	-2.2(9)
B(1)-C(111)-C(116)-C(115)	178.1(6)
C(114)-C(115)-C(116)-C(111)	1.8(11)
C(111)-B(1)-C(121)-C(126)	179.7(5)
C(141)-B(1)-C(121)-C(126)	60.3(7)

C(131)-B(1)-C(121)-C(126)	-58.6(7)
C(111)-B(1)-C(121)-C(122)	0.9(7)
C(141)-B(1)-C(121)-C(122)	-118.5(6)
C(131)-B(1)-C(121)-C(122)	122.6(6)
C(126)-C(121)-C(122)-C(123)	2.4(9)
B(1)-C(121)-C(122)-C(123)	-178.8(6)
C(121)-C(122)-C(123)-C(124)	-2.3(11)
C(122)-C(123)-C(124)-C(125)	1.5(11)
C(123)-C(124)-C(125)-C(126)	-1.2(11)
C(122)-C(121)-C(126)-C(125)	-2.0(9)
B(1)-C(121)-C(126)-C(125)	179.1(6)
C(124)-C(125)-C(126)-C(121)	1.5(11)
C(111)-B(1)-C(131)-C(132)	22.6(8)
C(141)-B(1)-C(131)-C(132)	142.2(6)
C(121)-B(1)-C(131)-C(132)	-99.1(7)
C(111)-B(1)-C(131)-C(136)	-159.0(5)
C(141)-B(1)-C(131)-C(136)	-39.4(7)
C(121)-B(1)-C(131)-C(136)	79.3(6)
C(136)-C(131)-C(132)-C(133)	-2.4(10)
B(1)-C(131)-C(132)-C(133)	176.1(7)
C(131)-C(132)-C(133)-C(134)	-0.1(13)
C(132)-C(133)-C(134)-C(135)	3.0(13)
C(133)-C(134)-C(135)-C(136)	-3.2(12)
C(132)-C(131)-C(136)-C(135)	2.1(9)
B(1)-C(131)-C(136)-C(135)	-176.4(6)
C(134)-C(135)-C(136)-C(131)	0.6(11)
C(111)-B(1)-C(141)-C(146)	80.8(6)
C(121)-B(1)-C(141)-C(146)	-158.1(5)
C(131)-B(1)-C(141)-C(146)	-40.5(7)
C(111)-B(1)-C(141)-C(142)	-94.3(6)
C(121)-B(1)-C(141)-C(142)	26.9(7)
C(131)-B(1)-C(141)-C(142)	144.4(5)
C(146)-C(141)-C(142)-C(143)	-0.8(9)
B(1)-C(141)-C(142)-C(143)	174.5(6)
C(141)-C(142)-C(143)-C(144)	0.8(11)
C(142)-C(143)-C(144)-C(145)	0.0(11)

C(143)-C(144)-C(145)-C(146)	-0.7(11)
C(144)-C(145)-C(146)-C(141)	0.6(10)
C(142)-C(141)-C(146)-C(145)	0.1(9)
B(1)-C(141)-C(146)-C(145)	-175.3(6)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 1. Crystal data and structure refinement for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (24).

Identification code	24	
Empirical formula	C ₆₆ H ₆₀ B N ₄ O ₂ P ₂ Rh	
Formula weight	1116.84	
Temperature	296(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2 ₁ /c	
Unit cell dimensions	a = 11.0040(2) Å	α = 90°.
	b = 23.7755(2) Å	β = 99.7130(10)°.
	c = 21.5596(4) Å	γ = 90°.
Volume	5559.69(15) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.334 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.414 mm ⁻¹	
F(000)	2320	
Crystal size	0.45 x 0.40 x 0.20 mm ³	
Theta range for data collection	1.29 to 28.30°.	
Index ranges	-9 ≤ h ≤ 14, -31 ≤ k ≤ 31, -28 ≤ l ≤ 27	
Reflections collected	37302	
Independent reflections	13670 [R(int) = 0.0589]	
Completeness to theta = 28.30°	98.9 %	
Absortion correction	SADABS	
Max. and min. transmission	0.9217 and 0.8355	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	13670 / 0 / 691	
Goodness-of-fit on F ²	0.724	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0501, wR2 = 0.1273	
R indices (all data)	R1 = 0.0959, wR2 = 0.1705	
Largest diff. peak and hole	0.433 and -0.499 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (24). U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uⁱ tensor.

	x	y	z	U(eq)
Rh(1)	6445(1)	7773(1)	5252(1)	28(1)
P(1)	7493(1)	7352(1)	4529(1)	29(1)
P(2)	5071(1)	8251(1)	5796(1)	32(1)
O(1)	4286(3)	7091(2)	5244(2)	62(1)
O(2)	6014(3)	8770(1)	4437(2)	50(1)
N(1)	8185(4)	8866(2)	5413(2)	45(1)
N(2)	8022(3)	8323(1)	5621(2)	35(1)
N(3)	7613(3)	7308(1)	5989(2)	32(1)
N(4)	7326(4)	6768(2)	6167(2)	45(1)
C(1)	8906(4)	8095(2)	6018(2)	36(1)
C(2)	8694(4)	7518(2)	6215(2)	35(1)
C(3)	10104(4)	8390(2)	6251(2)	56(1)
C(4)	9668(5)	7193(2)	6630(2)	51(1)
C(5)	6466(4)	6788(2)	4224(2)	33(1)
C(6)	5393(4)	6760(2)	4480(2)	32(1)
C(7)	4521(4)	6341(2)	4280(2)	44(1)
C(8)	4733(5)	5961(2)	3824(2)	53(1)
C(9)	5802(5)	5989(2)	3572(2)	53(1)
C(10)	6685(4)	6395(2)	3772(2)	43(1)
C(11)	5184(4)	7172(2)	4993(2)	35(1)
C(12)	8992(4)	7024(2)	4808(2)	37(1)
C(13)	9053(5)	6459(2)	4997(2)	52(1)
C(14)	10182(6)	6219(3)	5232(3)	70(2)
C(15)	11247(5)	6531(3)	5291(3)	71(2)
C(16)	11197(5)	7082(3)	5122(3)	62(2)
C(17)	10069(4)	7334(2)	4881(2)	49(1)
C(18)	7694(3)	7792(2)	3859(2)	31(1)
C(19)	8378(4)	8287(2)	3969(2)	42(1)
C(20)	8523(5)	8645(2)	3473(3)	53(1)

C(21)	7983(5)	8506(2)	2871(3)	57(1)
C(22)	7285(5)	8027(2)	2758(2)	57(1)
C(23)	7134(4)	7671(2)	3249(2)	42(1)
C(24)	3798(4)	8399(2)	5160(2)	37(1)
C(25)	2602(4)	8562(2)	5226(2)	45(1)
C(26)	1737(4)	8679(2)	4696(3)	54(1)
C(27)	2043(4)	8629(2)	4102(3)	56(1)
C(28)	3236(4)	8474(2)	4036(2)	48(1)
C(29)	4121(4)	8360(2)	4563(2)	38(1)
C(30)	5446(4)	8233(2)	4506(2)	37(1)
C(31)	4419(4)	7973(2)	6462(2)	40(1)
C(32)	4581(4)	7417(2)	6648(2)	49(1)
C(33)	4100(6)	7224(2)	7165(3)	68(2)
C(34)	3429(6)	7575(3)	7485(3)	68(2)
C(35)	3254(5)	8124(3)	7300(3)	65(2)
C(36)	3755(5)	8329(2)	6798(2)	52(1)
C(37)	5563(4)	8955(2)	6090(2)	37(1)
C(38)	6290(5)	9014(2)	6682(2)	52(1)
C(39)	6635(5)	9542(2)	6916(3)	64(1)
C(40)	6275(6)	10014(2)	6569(3)	67(2)
C(41)	5580(6)	9963(2)	5985(3)	75(2)
C(42)	5228(5)	9435(2)	5742(2)	55(1)
B(1)	9280(5)	4805(2)	7059(2)	41(1)
C(43)	9468(4)	4123(2)	6939(2)	43(1)
C(44)	8639(5)	3788(2)	6547(2)	55(1)
C(45)	8805(6)	3210(2)	6484(3)	69(2)
C(46)	9836(7)	2954(2)	6809(3)	69(2)
C(47)	10685(6)	3268(2)	7202(3)	62(1)
C(48)	10490(5)	3841(2)	7264(2)	54(1)
C(49)	9152(4)	4850(2)	7808(2)	41(1)
C(50)	8061(5)	4703(2)	8021(2)	54(1)
C(51)	7947(6)	4729(2)	8662(3)	70(2)
C(52)	8935(7)	4875(2)	9109(3)	71(2)
C(53)	10032(6)	4999(2)	8925(2)	59(1)
C(54)	10137(5)	4990(2)	8290(2)	48(1)

C(55)	10502(4)	5162(2)	6919(2)	41(1)
C(56)	11315(5)	4964(2)	6533(2)	52(1)
C(57)	12316(5)	5280(3)	6418(3)	62(1)
C(58)	12540(5)	5803(3)	6672(3)	66(2)
C(59)	11749(5)	6019(2)	7046(3)	62(1)
C(60)	10748(4)	5705(2)	7158(2)	50(1)
C(61)	8097(4)	5065(2)	6570(2)	47(1)
C(62)	8067(6)	5012(3)	5919(3)	73(2)
C(63)	7070(8)	5213(3)	5474(3)	95(3)
C(64)	6090(7)	5479(3)	5672(4)	95(3)
C(65)	6110(6)	5545(2)	6293(4)	81(2)
C(66)	7092(5)	5345(2)	6741(3)	57(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for C₆₆H₆₀BN₄O₂P₂Rh (24).

Rh(1)-C(11)	2.004(4)
Rh(1)-C(30)	2.097(4)
Rh(1)-N(3)	2.171(3)
Rh(1)-N(2)	2.211(3)
Rh(1)-P(1)	2.3159(10)
Rh(1)-P(2)	2.3563(10)
P(1)-C(5)	1.805(4)
P(1)-C(18)	1.827(4)
P(1)-C(12)	1.832(4)
P(2)-C(24)	1.821(4)
P(2)-C(31)	1.834(4)
P(2)-C(37)	1.838(4)
O(1)-C(11)	1.219(5)
O(2)-C(30)	1.440(5)
O(2)-H(2)	0.8142
N(1)-N(2)	1.389(5)
N(1)-H(1A)	1.0443
N(1)-H(1B)	1.0456
N(2)-C(1)	1.301(5)
N(3)-C(2)	1.305(5)
N(3)-N(4)	1.391(4)
N(4)-H(4A)	0.9961
N(4)-H(4B)	0.8535
C(1)-C(2)	1.466(6)
C(1)-C(3)	1.503(6)
C(2)-C(4)	1.490(6)
C(3)-H(3A)	0.9600
C(3)-H(3B)	0.9600
C(3)-H(3C)	0.9600
C(4)-H(4C)	0.9600
C(4)-H(4D)	0.9600
C(4)-H(4E)	0.9600
C(5)-C(6)	1.387(5)

C(5)-C(10)	1.400(6)
C(6)-C(7)	1.398(5)
C(6)-C(11)	1.525(5)
C(7)-C(8)	1.385(6)
C(7)-H(7A)	0.9300
C(8)-C(9)	1.378(7)
C(8)-H(8A)	0.9300
C(9)-C(10)	1.386(6)
C(9)-H(9A)	0.9300
C(10)-H(10A)	0.9300
C(12)-C(17)	1.382(6)
C(12)-C(13)	1.403(6)
C(13)-C(14)	1.383(7)
C(13)-H(13A)	0.9300
C(14)-C(15)	1.375(9)
C(14)-H(14A)	0.9300
C(15)-C(16)	1.359(8)
C(15)-H(15A)	0.9300
C(16)-C(17)	1.397(7)
C(16)-H(16A)	0.9300
C(17)-H(17A)	0.9300
C(18)-C(23)	1.386(6)
C(18)-C(19)	1.397(6)
C(19)-C(20)	1.395(6)
C(19)-H(19A)	0.9300
C(20)-C(21)	1.374(7)
C(20)-H(20A)	0.9300
C(21)-C(22)	1.373(7)
C(21)-H(21A)	0.9300
C(22)-C(23)	1.387(6)
C(22)-H(22A)	0.9300
C(23)-H(23A)	0.9300
C(24)-C(29)	1.395(6)
C(24)-C(25)	1.403(6)
C(25)-C(26)	1.387(7)

C(25)-H(25A)	0.9300
C(26)-C(27)	1.382(7)
C(26)-H(26A)	0.9300
C(27)-C(28)	1.394(7)
C(27)-H(27A)	0.9300
C(28)-C(29)	1.392(6)
C(28)-H(28A)	0.9300
C(29)-C(30)	1.514(6)
C(30)-H(30)	0.9639
C(31)-C(32)	1.383(6)
C(31)-C(36)	1.398(6)
C(32)-C(33)	1.389(7)
C(32)-H(32A)	0.9300
C(33)-C(34)	1.375(9)
C(33)-H(33A)	0.9300
C(34)-C(35)	1.369(8)
C(34)-H(34A)	0.9300
C(35)-C(36)	1.383(7)
C(35)-H(35A)	0.9300
C(36)-H(36A)	0.9300
C(37)-C(42)	1.380(6)
C(37)-C(38)	1.395(6)
C(38)-C(39)	1.383(7)
C(38)-H(38A)	0.9300
C(39)-C(40)	1.368(8)
C(39)-H(39A)	0.9300
C(40)-C(41)	1.364(8)
C(40)-H(40A)	0.9300
C(41)-C(42)	1.391(7)
C(41)-H(41A)	0.9300
C(42)-H(42A)	0.9300
B(1)-C(61)	1.650(7)
B(1)-C(43)	1.659(7)
B(1)-C(49)	1.648(7)
B(1)-C(55)	1.661(7)

C(43)-C(44)	1.386(7)
C(43)-C(48)	1.394(7)
C(44)-C(45)	1.397(7)
C(44)-H(44A)	0.9300
C(45)-C(46)	1.371(9)
C(45)-H(45A)	0.9300
C(46)-C(47)	1.372(8)
C(46)-H(46A)	0.9300
C(47)-C(48)	1.388(7)
C(47)-H(47A)	0.9300
C(48)-H(48A)	0.9300
C(49)-C(54)	1.409(6)
C(49)-C(50)	1.400(7)
C(50)-C(51)	1.412(8)
C(50)-H(50A)	0.9300
C(51)-C(52)	1.369(9)
C(51)-H(51A)	0.9300
C(52)-C(53)	1.365(9)
C(52)-H(52A)	0.9300
C(53)-C(54)	1.395(7)
C(53)-H(53A)	0.9300
C(54)-H(54A)	0.9300
C(55)-C(56)	1.402(6)
C(55)-C(60)	1.399(6)
C(56)-C(57)	1.389(7)
C(56)-H(56A)	0.9300
C(57)-C(58)	1.365(8)
C(57)-H(57A)	0.9300
C(58)-C(59)	1.382(8)
C(58)-H(58A)	0.9300
C(59)-C(60)	1.384(7)
C(59)-H(59A)	0.9300
C(60)-H(60A)	0.9300
C(61)-C(66)	1.393(7)
C(61)-C(62)	1.403(7)

C(62)-C(63)	1.413(9)
C(62)-H(62A)	0.9300
C(63)-C(64)	1.380(11)
C(63)-H(63A)	0.9300
C(64)-C(65)	1.345(11)
C(64)-H(64A)	0.9300
C(65)-C(66)	1.405(8)
C(65)-H(65A)	0.9300
C(66)-H(66A)	0.9300
C(11)-Rh(1)-C(30)	84.83(16)
C(11)-Rh(1)-N(3)	97.88(14)
C(30)-Rh(1)-N(3)	175.30(14)
C(11)-Rh(1)-N(2)	170.47(15)
C(30)-Rh(1)-N(2)	104.24(15)
N(3)-Rh(1)-N(2)	72.87(12)
C(11)-Rh(1)-P(1)	84.54(12)
C(30)-Rh(1)-P(1)	88.05(12)
N(3)-Rh(1)-P(1)	88.39(9)
N(2)-Rh(1)-P(1)	92.75(9)
C(11)-Rh(1)-P(2)	90.58(12)
C(30)-Rh(1)-P(2)	80.37(11)
N(3)-Rh(1)-P(2)	103.38(9)
N(2)-Rh(1)-P(2)	93.79(9)
P(1)-Rh(1)-P(2)	167.80(4)
C(5)-P(1)-C(18)	106.79(18)
C(5)-P(1)-C(12)	106.10(19)
C(18)-P(1)-C(12)	106.30(18)
C(5)-P(1)-Rh(1)	102.36(13)
C(18)-P(1)-Rh(1)	115.16(13)
C(12)-P(1)-Rh(1)	119.07(13)
C(24)-P(2)-C(31)	107.8(2)
C(24)-P(2)-C(37)	103.19(19)
C(31)-P(2)-C(37)	101.00(19)
C(24)-P(2)-Rh(1)	101.21(14)

C(31)-P(2)-Rh(1)	125.77(15)
C(37)-P(2)-Rh(1)	115.73(13)
C(30)-O(2)-H(2)	104.4
N(2)-N(1)-H(1A)	106.6
N(2)-N(1)-H(1B)	119.0
H(1A)-N(1)-H(1B)	118.3
C(1)-N(2)-N(1)	118.5(3)
C(1)-N(2)-Rh(1)	116.4(3)
N(1)-N(2)-Rh(1)	124.7(3)
C(2)-N(3)-N(4)	119.0(3)
C(2)-N(3)-Rh(1)	117.9(3)
N(4)-N(3)-Rh(1)	122.5(3)
N(3)-N(4)-H(4A)	109.4
N(3)-N(4)-H(4B)	114.8
H(4A)-N(4)-H(4B)	102.3
N(2)-C(1)-C(2)	116.2(3)
N(2)-C(1)-C(3)	122.7(4)
C(2)-C(1)-C(3)	121.0(4)
N(3)-C(2)-C(1)	115.4(3)
N(3)-C(2)-C(4)	123.0(4)
C(1)-C(2)-C(4)	121.6(4)
C(1)-C(3)-H(3A)	109.5
C(1)-C(3)-H(3B)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3B)	109.5
C(1)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3A)-C(3)-H(3C)	109.5
H(3B)-C(3)-H(3C)	109.5
C(2)-C(4)-H(4C)	109.5
C(2)-C(4)-H(4D)	109.5
H(4C)-C(4)-H(4D)	109.5
C(2)-C(4)-H(4E)	109.5
H(4C)-C(4)-H(4E)	109.5
H(4D)-C(4)-H(4E)	109.5
C(6)-C(5)-C(10)	120.2(4)
C(6)-C(5)-P(1)	114.5(3)

C(10)-C(5)-P(1)	125.3(3)
C(5)-C(6)-C(7)	119.9(4)
C(5)-C(6)-C(11)	120.0(3)
C(7)-C(6)-C(11)	120.1(4)
C(8)-C(7)-C(6)	119.6(4)
C(8)-C(7)-H(7A)	120.2
C(6)-C(7)-H(7A)	120.2
C(7)-C(8)-C(9)	120.3(4)
C(7)-C(8)-H(8A)	119.8
C(9)-C(8)-H(8A)	119.8
C(10)-C(9)-C(8)	120.8(4)
C(10)-C(9)-H(9A)	119.6
C(8)-C(9)-H(9A)	119.6
C(9)-C(10)-C(5)	119.1(4)
C(9)-C(10)-H(10A)	120.4
C(5)-C(10)-H(10A)	120.4
O(1)-C(11)-C(6)	116.9(4)
O(1)-C(11)-Rh(1)	124.4(3)
C(6)-C(11)-Rh(1)	118.6(3)
C(17)-C(12)-C(13)	118.7(4)
C(17)-C(12)-P(1)	121.2(3)
C(13)-C(12)-P(1)	120.0(3)
C(14)-C(13)-C(12)	119.8(5)
C(14)-C(13)-H(13A)	120.1
C(12)-C(13)-H(13A)	120.1
C(15)-C(14)-C(13)	120.7(5)
C(15)-C(14)-H(14A)	119.7
C(13)-C(14)-H(14A)	119.7
C(16)-C(15)-C(14)	120.1(5)
C(16)-C(15)-H(15A)	120.0
C(14)-C(15)-H(15A)	120.0
C(15)-C(16)-C(17)	120.4(5)
C(15)-C(16)-H(16A)	119.8
C(17)-C(16)-H(16A)	119.8
C(12)-C(17)-C(16)	120.4(5)

C(12)-C(17)-H(17A)	119.8
C(16)-C(17)-H(17A)	119.8
C(23)-C(18)-C(19)	118.5(4)
C(23)-C(18)-P(1)	122.6(3)
C(19)-C(18)-P(1)	118.8(3)
C(18)-C(19)-C(20)	120.8(4)
C(18)-C(19)-H(19A)	119.6
C(20)-C(19)-H(19A)	119.6
C(21)-C(20)-C(19)	119.4(5)
C(21)-C(20)-H(20A)	120.3
C(19)-C(20)-H(20A)	120.3
C(22)-C(21)-C(20)	120.4(4)
C(22)-C(21)-H(21A)	119.8
C(20)-C(21)-H(21A)	119.8
C(21)-C(22)-C(23)	120.5(5)
C(21)-C(22)-H(22A)	119.8
C(23)-C(22)-H(22A)	119.8
C(18)-C(23)-C(22)	120.4(4)
C(18)-C(23)-H(23A)	119.8
C(22)-C(23)-H(23A)	119.8
C(29)-C(24)-C(25)	120.1(4)
C(29)-C(24)-P(2)	113.5(3)
C(25)-C(24)-P(2)	126.4(3)
C(26)-C(25)-C(24)	119.9(4)
C(26)-C(25)-H(25A)	120.1
C(24)-C(25)-H(25A)	120.1
C(25)-C(26)-C(27)	120.3(4)
C(25)-C(26)-H(26A)	119.8
C(27)-C(26)-H(26A)	119.8
C(26)-C(27)-C(28)	119.9(4)
C(26)-C(27)-H(27A)	120.1
C(28)-C(27)-H(27A)	120.1
C(29)-C(28)-C(27)	120.7(4)
C(29)-C(28)-H(28A)	119.7
C(27)-C(28)-H(28A)	119.7