

ORGANOMETALLICS

Organometallics, 1997, 16(21), 4527-4530, DOI:[10.1021/om970342m](https://doi.org/10.1021/om970342m)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1997 American Chemical Society

Table 1. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for $[\text{Fe}_3\text{Au}_2(\text{O})(\text{CO})_{12}(\text{PPh}_3)_2]$ (2). $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Au(1)	8248(1)	1680(1)	873(1)	46(1)
Au(2)	8802(1)	1169(1)	1551(1)	51(1)
Fe(3)	6506(2)	266(1)	1187(1)	53(1)
Fe(4)	9402(2)	-274(1)	1069(1)	50(1)
Fe(5)	7980(2)	-963(1)	1559(1)	58(1)
P(1)	8799(3)	3081(2)	532(1)	42(1)
P(2)	9653(3)	2575(2)	1869(1)	49(1)
C(11)	7910(12)	2940(10)	145(2)	52(3)
C(12)	7716(15)	1920(12)	25(3)	75(4)
C(13)	7052(22)	1750(17)	-262(4)	101(6)
C(14)	6554(17)	2648(16)	-435(3)	94(5)
C(15)	6731(18)	3672(15)	-315(3)	96(5)
C(16)	7420(14)	3830(11)	-28(3)	69(3)
C(21)	10817(12)	3105(9)	457(3)	53(3)
C(22)	11766(14)	3313(12)	706(3)	77(4)
C(23)	13289(17)	3251(15)	668(5)	106(6)
C(24)	13884(17)	2994(17)	389(5)	117(7)
C(25)	12999(19)	2849(20)	143(5)	136(8)
C(26)	11440(14)	2877(14)	180(3)	91(5)
C(31)	8327(11)	4447(8)	659(2)	45(2)
C(32)	7122(14)	4580(10)	864(3)	58(3)
C(33)	6661(19)	5612(13)	960(4)	82(5)
C(34)	7447(20)	6541(11)	847(3)	82(4)
C(35)	8621(19)	6409(10)	646(3)	78(4)
C(36)	9076(15)	5375(10)	557(3)	66(3)
C(41)	8138(13)	3309(10)	2062(2)	53(3)
C(42)	8104(18)	4442(12)	2106(3)	77(4)
C(43)	6907(22)	4945(15)	2257(4)	104(6)
C(44)	5755(19)	4343(18)	2372(4)	104(6)
C(45)	5746(17)	3243(18)	2325(4)	106(6)
C(46)	6938(16)	2723(13)	2178(3)	81(4)
C(51)	10766(13)	3655(9)	1690(2)	52(3)
C(52)	12305(15)	3794(12)	1751(3)	67(4)
C(53)	13119(16)	4647(11)	1615(3)	75(4)
C(54)	12382(20)	5365(14)	1415(3)	79(4)
C(55)	10909(17)	5222(12)	1349(3)	76(4)
C(56)	10102(17)	4367(12)	1474(3)	70(4)
C(61)	10831(13)	2069(9)	2185(2)	52(3)
C(62)	10763(14)	2502(12)	2489(3)	71(3)
C(63)	11708(17)	2071(15)	2725(3)	94(5)
C(64)	12723(16)	1283(15)	2653(4)	95(6)
C(65)	12806(17)	851(14)	2357(4)	95(5)
C(66)	11884(14)	1235(11)	2125(3)	68(3)
O(1)	7595(9)	-1048(6)	1127(2)	58(2)
O(37)	5368(11)	2398(10)	1409(2)	98(3)
C(37)	5875(14)	1570(12)	1321(3)	65(3)
O(38)	3873(12)	-762(12)	1473(3)	148(6)
C(38)	4921(16)	-398(13)	1367(4)	86(5)
O(39)	5149(16)	329(11)	558(3)	143(5)
C(39)	5717(16)	352(11)	797(4)	80(4)

O(47)	11414(12)	-2178(8)	1115(2)	94(3)
C(47)	10609(17)	-1441(10)	1110(3)	67(3)
O(48)	12080(11)	1138(9)	1152(3)	107(4)
C(48)	11003(15)	637(12)	1123(3)	69(4)
O(49)	9463(16)	-433(10)	384(2)	129(5)
C(49)	9407(16)	-300(11)	647(3)	80(4)
O(57)	6311(12)	-128(10)	2099(2)	109(4)
C(57)	7013(15)	-433(12)	1885(3)	77(4)
O(58)	6772(29)	-3134(12)	1684(3)	256(13)
C(58)	7256(31)	-2277(14)	1632(4)	153(10)
O(59)	10843(14)	-1354(14)	1877(3)	158(6)
C(59)	9691(19)	-1222(15)	1749(4)	104(6)

Table 2. Bond lengths [Å] and angles [°] for $[\text{Fe}_3\text{Au}_2(\text{O})(\text{CO})_{12}(\text{PPh}_3)_2] (2)$.

Au(1)-P(1)	2.289(3)	Au(1)-Fe(3)	2.669(2)
Au(1)-Fe(4)	2.714(2)	Au(1)-Au(2)	2.9915(9)
Au(2)-P(2)	2.304(3)	Au(2)-Fe(5)	2.688(2)
Au(2)-Fe(4)	2.749(2)	Au(2)-Fe(3)	2.782(2)
Fe(3)-C(37)	1.77(2)	Fe(3)-C(38)	1.795(14)
Fe(3)-C(39)	1.80(2)	Fe(3)-O(1)	1.881(7)
Fe(3)-Fe(5)	2.537(2)	Fe(3)-Fe(4)	2.700(2)
Fe(4)-C(47)	1.783(13)	Fe(4)-C(49)	1.80(2)
Fe(4)-C(48)	1.81(2)	Fe(4)-O(1)	1.875(7)
Fe(4)-Fe(5)	2.578(2)	Fe(5)-C(59)	1.75(2)
Fe(5)-C(58)	1.75(2)	Fe(5)-C(57)	1.757(14)
Fe(5)-O(1)	1.871(7)	P(1)-C(31)	1.794(10)
P(1)-C(21)	1.819(10)	P(1)-C(11)	1.831(11)
P(2)-C(61)	1.809(11)	P(2)-C(51)	1.811(11)
P(2)-C(41)	1.811(11)	C(11)-C(12)	1.35(2)
C(11)-C(16)	1.38(2)	C(12)-C(13)	1.37(2)
C(13)-C(14)	1.39(2)	C(14)-C(15)	1.35(2)
C(15)-C(16)	1.38(2)	C(21)-C(26)	1.33(2)
C(21)-C(22)	1.37(2)	C(22)-C(23)	1.36(2)
C(23)-C(24)	1.34(2)	C(24)-C(25)	1.32(2)
C(25)-C(26)	1.39(2)	C(31)-C(36)	1.38(2)
C(31)-C(32)	1.39(2)	C(32)-C(33)	1.38(2)
C(33)-C(34)	1.41(2)	C(34)-C(35)	1.36(2)
C(35)-C(36)	1.37(2)	C(41)-C(46)	1.37(2)
C(41)-C(42)	1.39(2)	C(42)-C(43)	1.38(2)
C(43)-C(44)	1.35(2)	C(44)-C(45)	1.35(2)
C(45)-C(46)	1.38(2)	C(51)-C(56)	1.39(2)
C(51)-C(52)	1.40(2)	C(52)-C(53)	1.39(2)
C(53)-C(54)	1.38(2)	C(54)-C(55)	1.35(2)
C(55)-C(56)	1.37(2)	C(61)-C(62)	1.40(2)
C(61)-C(66)	1.40(2)	C(62)-C(63)	1.41(2)
C(63)-C(64)	1.35(2)	C(64)-C(65)	1.37(2)
C(65)-C(66)	1.36(2)	O(37)-C(37)	1.16(2)
O(38)-C(38)	1.125(14)	O(39)-C(39)	1.13(2)
O(47)-C(47)	1.144(14)	O(48)-C(48)	1.14(2)
O(49)-C(49)	1.130(14)	O(57)-C(57)	1.165(14)
O(58)-C(58)	1.15(2)	O(59)-C(59)	1.17(2)
P(1)-Au(1)-Fe(3)	156.84(8)	P(1)-Au(1)-Fe(4)	139.75(8)
Fe(3)-Au(1)-Fe(4)	60.18(5)	P(1)-Au(1)-Au(2)	136.96(7)
Fe(3)-Au(1)-Au(2)	58.53(4)	Fe(4)-Au(1)-Au(2)	57.37(3)
P(2)-Au(2)-Fe(5)	142.55(8)	P(2)-Au(2)-Fe(4)	147.77(8)
Fe(5)-Au(2)-Fe(4)	56.60(5)	P(2)-Au(2)-Fe(3)	149.05(8)
Fe(5)-Au(2)-Fe(3)	55.24(5)	Fe(4)-Au(2)-Fe(3)	58.43(5)
P(2)-Au(2)-Au(1)	117.77(7)	Fe(5)-Au(2)-Au(1)	99.66(4)
Fe(4)-Au(2)-Au(1)	56.24(3)	Fe(3)-Au(2)-Au(1)	54.93(4)
C(37)-Fe(3)-C(38)	90.8(7)	C(37)-Fe(3)-C(39)	97.1(6)
C(38)-Fe(3)-C(39)	96.7(6)	C(37)-Fe(3)-O(1)	164.1(5)
C(38)-Fe(3)-O(1)	94.6(5)	C(39)-Fe(3)-O(1)	97.1(5)
C(37)-Fe(3)-Fe(5)	119.0(4)	C(38)-Fe(3)-Fe(5)	82.6(4)
C(39)-Fe(3)-Fe(5)	143.9(5)	O(1)-Fe(3)-Fe(5)	47.3(2)
C(37)-Fe(3)-Au(1)	76.8(4)	C(38)-Fe(3)-Au(1)	163.3(4)
C(39)-Fe(3)-Au(1)	74.1(4)	O(1)-Fe(3)-Au(1)	100.3(2)
Fe(5)-Fe(3)-Au(1)	113.09(7)	C(37)-Fe(3)-Fe(4)	125.3(4)
C(38)-Fe(3)-Fe(4)	135.8(5)	C(39)-Fe(3)-Fe(4)	102.2(5)
O(1)-Fe(3)-Fe(4)	44.0(2)	Fe(5)-Fe(3)-Fe(4)	58.89(6)
Au(1)-Fe(3)-Fe(4)	60.73(5)	C(37)-Fe(3)-Au(2)	72.5(4)
C(38)-Fe(3)-Au(2)	120.8(5)	C(39)-Fe(3)-Au(2)	140.6(4)
O(1)-Fe(3)-Au(2)	91.9(2)	Fe(5)-Fe(3)-Au(2)	60.51(5)

Au(1)-Fe(3)-Au(2)	66.53(4)	Fe(4)-Fe(3)-Au(2)	60.19(5)
C(47)-Fe(4)-C(49)	94.6(6)	C(47)-Fe(4)-C(48)	90.1(6)
C(49)-Fe(4)-C(48)	97.7(6)	C(47)-Fe(4)-O(1)	95.9(5)
C(49)-Fe(4)-O(1)	97.3(5)	C(48)-Fe(4)-O(1)	163.3(5)
C(47)-Fe(4)-Fe(5)	87.7(4)	C(49)-Fe(4)-Fe(5)	143.6(5)
C(48)-Fe(4)-Fe(5)	118.7(4)	O(1)-Fe(4)-Fe(5)	46.4(2)
C(47)-Fe(4)-Fe(3)	138.3(4)	C(49)-Fe(4)-Fe(3)	101.2(4)
C(48)-Fe(4)-Fe(3)	125.0(4)	O(1)-Fe(4)-Fe(3)	44.2(2)
Fe(5)-Fe(4)-Fe(3)	57.40(6)	C(47)-Fe(4)-Au(1)	161.7(4)
C(49)-Fe(4)-Au(1)	73.1(4)	C(48)-Fe(4)-Au(1)	78.5(4)
O(1)-Fe(4)-Au(1)	99.0(2)	Fe(5)-Fe(4)-Au(1)	110.31(7)
Fe(3)-Fe(4)-Au(1)	59.08(5)	C(47)-Fe(4)-Au(2)	123.5(4)
C(49)-Fe(4)-Au(2)	139.2(4)	C(48)-Fe(4)-Au(2)	70.8(4)
O(1)-Fe(4)-Au(2)	93.1(2)	Fe(5)-Fe(4)-Au(2)	60.50(5)
Fe(3)-Fe(4)-Au(2)	61.38(5)	Au(1)-Fe(4)-Au(2)	66.39(4)
C(59)-Fe(5)-C(58)	94.2(10)	C(59)-Fe(5)-C(57)	97.2(7)
C(58)-Fe(5)-C(57)	90.7(8)	C(59)-Fe(5)-O(1)	126.9(5)
C(58)-Fe(5)-O(1)	93.3(6)	C(57)-Fe(5)-O(1)	135.1(5)
C(59)-Fe(5)-Fe(3)	147.2(6)	C(58)-Fe(5)-Fe(3)	117.3(8)
C(57)-Fe(5)-Fe(3)	91.6(5)	O(1)-Fe(5)-Fe(3)	47.6(2)
C(59)-Fe(5)-Fe(4)	90.3(5)	C(58)-Fe(5)-Fe(4)	128.3(6)
C(57)-Fe(5)-Fe(4)	139.6(5)	O(1)-Fe(5)-Fe(4)	46.6(2)
Fe(3)-Fe(5)-Fe(4)	63.70(6)	C(59)-Fe(5)-Au(2)	86.8(6)
C(58)-Fe(5)-Au(2)	168.7(6)	C(57)-Fe(5)-Au(2)	77.9(5)
O(1)-Fe(5)-Au(2)	95.1(2)	Fe(3)-Fe(5)-Au(2)	64.26(5)
Fe(4)-Fe(5)-Au(2)	62.90(5)	C(31)-P(1)-C(21)	105.5(5)
C(31)-P(1)-C(11)	104.9(5)	C(21)-P(1)-C(11)	105.4(5)
C(31)-P(1)-Au(1)	116.4(3)	C(21)-P(1)-Au(1)	109.6(4)
C(11)-P(1)-Au(1)	114.1(4)	C(61)-P(2)-C(51)	104.1(5)
C(61)-P(2)-C(41)	104.9(5)	C(51)-P(2)-C(41)	103.9(5)
C(61)-P(2)-Au(2)	111.9(4)	C(51)-P(2)-Au(2)	117.9(3)
C(41)-P(2)-Au(2)	112.8(4)	C(12)-C(11)-C(16)	118.4(11)
C(12)-C(11)-P(1)	118.7(9)	C(16)-C(11)-P(1)	122.9(9)
C(11)-C(12)-C(13)	122(2)	C(12)-C(13)-C(14)	119(2)
C(15)-C(14)-C(13)	119.0(14)	C(14)-C(15)-C(16)	121(2)
C(15)-C(16)-C(11)	120.3(14)	C(26)-C(21)-C(22)	117.6(11)
C(26)-C(21)-P(1)	124.2(10)	C(22)-C(21)-P(1)	118.1(9)
C(23)-C(22)-C(21)	120.4(14)	C(24)-C(23)-C(22)	121(2)
C(25)-C(24)-C(23)	120(2)	C(24)-C(25)-C(26)	120(2)
C(21)-C(26)-C(25)	121(2)	C(36)-C(31)-C(32)	118.3(10)
C(36)-C(31)-P(1)	123.2(9)	C(32)-C(31)-P(1)	118.5(8)
C(33)-C(32)-C(31)	121.3(14)	C(32)-C(33)-C(34)	119(2)
C(35)-C(34)-C(33)	120.0(13)	C(34)-C(35)-C(36)	120.6(13)
C(35)-C(36)-C(31)	121.1(13)	C(46)-C(41)-C(42)	116.5(12)
C(46)-C(41)-P(2)	119.0(10)	C(42)-C(41)-P(2)	124.4(10)
C(43)-C(42)-C(41)	121(2)	C(44)-C(43)-C(42)	121(2)
C(43)-C(44)-C(45)	119(2)	C(44)-C(45)-C(46)	121(2)
C(41)-C(46)-C(45)	122(2)	C(56)-C(51)-C(52)	117.3(12)
C(56)-C(51)-P(2)	119.8(10)	C(52)-C(51)-P(2)	122.9(9)
C(53)-C(52)-C(51)	121.4(13)	C(54)-C(53)-C(52)	118.7(14)
C(55)-C(54)-C(53)	120.2(14)	C(54)-C(55)-C(56)	121.7(14)
C(55)-C(56)-C(51)	120.4(13)	C(62)-C(61)-C(66)	118.0(11)
C(62)-C(61)-P(2)	122.3(10)	C(66)-C(61)-P(2)	119.6(9)
C(61)-C(62)-C(63)	119.6(14)	C(64)-C(63)-C(62)	119.9(14)
C(63)-C(64)-C(65)	121.2(14)	C(64)-C(65)-C(66)	120(2)
C(65)-C(66)-C(61)	121.0(13)	Fe(5)-O(1)-Fe(4)	87.0(3)
Fe(5)-O(1)-Fe(3)	85.1(3)	Fe(4)-O(1)-Fe(3)	91.9(3)
O(37)-C(37)-Fe(3)	175.6(12)	O(38)-C(38)-Fe(3)	175.7(13)
O(39)-C(39)-Fe(3)	174.1(13)	O(47)-C(47)-Fe(4)	175.3(12)
O(48)-C(48)-Fe(4)	174.5(12)	O(49)-C(49)-Fe(4)	172.4(12)
O(57)-C(57)-Fe(5)	176.1(13)	O(58)-C(58)-Fe(5)	179(2)
O(59)-C(59)-Fe(5)	178(2)		

Table 3. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for $[\text{Fe}_3\text{Au}_2(\text{O}(\text{CO})_{12}(\text{PPh}_3)_2)_2]$.

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(h a^*)^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Au(1)	57(1)	32(1)	49(1)	3(1)	1(1)	-2(1)
Au(2)	63(1)	40(1)	50(1)	-6(1)	-4(1)	-4(1)
Fe(3)	49(1)	42(1)	69(1)	12(1)	-6(1)	-8(1)
Fe(4)	66(1)	35(1)	50(1)	1(1)	3(1)	8(1)
Fe(5)	84(1)	36(1)	53(1)	7(1)	1(1)	-3(1)
P(1)	46(2)	37(2)	44(1)	6(1)	2(1)	-2(1)
P(2)	54(2)	43(2)	48(2)	-4(1)	-5(1)	0(1)
C(11)	51(6)	58(7)	48(6)	-1(6)	1(5)	0(6)
C(12)	88(10)	75(10)	62(8)	-8(7)	-15(7)	20(8)
C(13)	129(15)	97(14)	78(12)	-32(11)	-37(10)	13(12)
C(14)	101(11)	118(15)	61(9)	-20(10)	-21(8)	8(11)
C(15)	111(12)	114(14)	64(9)	27(9)	-28(8)	-1(10)
C(16)	72(8)	72(9)	64(7)	12(7)	-6(6)	-2(7)
C(21)	45(6)	59(8)	54(7)	14(6)	9(5)	-5(5)
C(22)	57(8)	93(11)	81(9)	6(8)	2(7)	-4(7)
C(23)	59(9)	124(15)	135(15)	22(12)	-20(9)	-5(9)
C(24)	46(9)	158(19)	147(17)	51(15)	16(11)	20(10)
C(25)	62(10)	241(26)	104(14)	3(15)	29(10)	9(13)
C(26)	53(8)	143(15)	76(9)	2(9)	12(7)	14(9)
C(31)	53(6)	27(6)	54(6)	0(5)	-2(5)	4(5)
C(32)	59(8)	41(7)	75(8)	-11(6)	-8(6)	11(6)
C(33)	83(11)	70(11)	93(12)	-17(9)	0(9)	19(9)
C(34)	139(14)	42(8)	64(9)	0(6)	-19(9)	13(8)
C(35)	134(14)	44(8)	55(8)	19(6)	-21(9)	-10(8)
C(36)	88(9)	38(7)	70(8)	12(6)	-8(6)	-7(6)
C(41)	63(7)	49(7)	46(6)	-8(5)	-1(5)	7(6)
C(42)	88(11)	63(10)	79(9)	-1(7)	-1(8)	9(8)
C(43)	135(15)	87(12)	90(11)	-2(9)	20(11)	56(12)
C(44)	82(12)	155(18)	74(11)	-28(11)	2(9)	43(12)
C(45)	69(10)	149(19)	100(11)	-36(12)	23(8)	-8(11)
C(46)	95(10)	77(10)	72(9)	-16(7)	24(8)	-6(9)
C(51)	73(8)	45(7)	36(6)	-4(5)	-9(5)	0(6)
C(52)	64(9)	61(9)	76(8)	17(7)	1(7)	8(7)
C(53)	64(9)	63(9)	99(11)	16(8)	-11(8)	-9(7)
C(54)	88(12)	72(11)	77(9)	12(8)	14(8)	-15(9)
C(55)	91(11)	73(10)	63(8)	16(7)	-10(7)	-7(8)
C(56)	63(9)	73(10)	75(9)	15(7)	-19(7)	-2(8)
C(61)	71(7)	41(6)	44(6)	6(5)	-5(5)	-9(6)
C(62)	69(8)	81(10)	63(8)	-3(7)	-6(6)	-16(7)
C(63)	89(11)	135(15)	59(8)	11(9)	-28(8)	-30(11)
C(64)	63(9)	119(14)	104(13)	64(11)	-21(9)	-1(9)
C(65)	81(11)	90(12)	114(13)	29(10)	-13(9)	14(9)
C(66)	70(8)	68(9)	67(8)	5(7)	3(6)	12(7)
O(1)	79(5)	41(5)	54(4)	0(3)	-8(4)	-9(4)
O(37)	93(7)	90(8)	112(8)	0(6)	3(6)	29(7)
C(37)	57(8)	62(9)	77(9)	14(7)	-3(6)	6(7)
O(38)	74(7)	170(13)	201(13)	103(11)	-3(8)	-38(8)
C(38)	61(9)	84(11)	113(12)	44(9)	-10(8)	-14(8)
O(39)	169(12)	118(10)	143(11)	29(8)	-97(9)	-48(9)
C(39)	81(9)	60(9)	100(11)	18(8)	-28(8)	-17(7)

O(47)	119(8)	52(6)	112(8)	2(5)	-14(6)	35(6)
C(47)	97(10)	44(8)	60(8)	6(6)	-3(7)	12(7)
O(48)	57(6)	88(8)	177(11)	41(7)	3(6)	-4(6)
C(48)	52(8)	66(9)	89(9)	22(7)	25(7)	14(7)
O(49)	222(13)	113(9)	52(6)	-6(6)	18(7)	85(9)
C(49)	108(11)	53(8)	79(10)	-6(7)	10(8)	34(8)
O(57)	113(8)	137(10)	76(7)	9(7)	34(6)	17(7)
C(57)	72(9)	88(11)	70(8)	13(8)	9(7)	-5(8)
O(58)	553(38)	90(11)	126(12)	21(9)	43(16)	-144(17)
C(58)	332(31)	56(11)	71(11)	13(8)	16(14)	-55(15)
O(59)	103(9)	248(18)	122(10)	85(10)	7(7)	80(10)
C(59)	91(12)	131(15)	91(11)	42(10)	29(9)	58(11)

Table 4. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[\text{Fe}_3\text{Au}_2(\text{O})(\text{CO})_{12}(\text{PPh}_3)_2]$ (2).

	x	y	z	U(eq)
H(12)	8042(15)	1314(12)	140(3)	99(10)
H(14)	6105(17)	2548(16)	-630(3)	99(10)
H(15)	6383(18)	4278(15)	-427(3)	99(10)
H(16)	7554(14)	4541(11)	49(3)	99(10)
H(22)	11367(14)	3497(12)	901(3)	99(10)
H(23)	13921(17)	3388(15)	839(5)	99(10)
H(24)	14922(17)	2917(17)	368(5)	99(10)
H(25)	13413(19)	2729(20)	-55(5)	99(10)
H(26)	10821(14)	2732(14)	9(3)	99(10)
H(34)	7162(20)	7245(11)	911(3)	99(10)
H(35)	9119(19)	7025(10)	568(3)	99(10)
H(36)	9905(15)	5299(10)	425(3)	99(10)
H(43)	6895(22)	5708(15)	2278(4)	99(10)
H(44)	4980(19)	4682(18)	2483(4)	99(10)
H(45)	4927(17)	2829(18)	2393(4)	99(10)
H(46)	6926(16)	1961(13)	2156(3)	99(10)
H(55)	10428(17)	5717(12)	1216(3)	99(10)
H(62)	10097(14)	3071(12)	2535(3)	99(10)
H(63)	11632(17)	2329(15)	2930(3)	99(10)
H(64)	13378(16)	1029(15)	2808(4)	99(10)
H(65)	13495(17)	294(14)	2313(4)	99(10)
H(66)	11953(14)	938(11)	1924(3)	99(10)
H(53)	14239(132)	4690(94)	1687(25)	73(35)
H(42)	9027(150)	4852(118)	2053(30)	76(49)
H(13)	6625(128)	1111(95)	-321(26)	57(36)
H(54)	12886(150)	5895(112)	1347(30)	83(48)
H(33)	5917(144)	5701(115)	1089(30)	96(48)
H(32)	6652(123)	3962(93)	925(25)	68(36)
H(52)	9168(117)	4297(91)	1467(23)	60(34)
H(56)	12696(165)	3483(127)	1888(34)	132(57)

Table 1. Atomic coordinates [$\times 10^4$] and equivalent isotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for (PPN)[Fe₃Rh₃(O)(CO)₁₅] (3b). U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Fe(1)	254(2)	3444(2)	1937(2)	49(1)
Fe(2)	495(2)	1645(2)	1433(2)	48(1)
Fe(3)	1726(2)	2641(2)	3051(2)	61(1)
Rh(4)	-1192(1)	2012(1)	1844(1)	50(1)
Rh(5)	131(1)	3027(1)	3579(1)	52(1)
Rh(6)	393(1)	1141(1)	3042(1)	58(1)
N	4423(10)	3431(9)	-1758(9)	50(3)
P(1)	3803(3)	2430(3)	-1824(3)	43(1)
P(2)	5201(3)	4011(3)	-2130(3)	43(1)
O(11)	-785(14)	3852(11)	-30(11)	102(5)
C(11)	-389(19)	3684(14)	729(17)	83(7)
O(21)	2017(12)	366(12)	1256(11)	100(5)
C(21)	1405(17)	894(15)	1322(14)	77(6)
C(22)	-76(14)	1667(12)	161(13)	58(4)
O(22)	-428(14)	1652(11)	-644(10)	100(5)
C(31)	2491(15)	3748(15)	3647(16)	82(6)
O(31)	2976(13)	4468(15)	4085(15)	148(9)
C(32)	2824(16)	2025(15)	3170(15)	84(7)
O(32)	3559(11)	1675(14)	3287(12)	125(7)
O(41)	-2724(14)	2031(15)	-138(12)	133(7)
C(41)	-2141(16)	2027(16)	601(15)	82(6)
O(42)	-2885(12)	1237(13)	2484(13)	113(6)
C(42)	-2235(15)	1530(14)	2257(14)	68(5)
O(51)	1073(14)	4972(13)	4828(14)	125(7)
C(51)	715(17)	4258(18)	4364(16)	84(6)
O(52)	-1321(12)	2541(11)	4599(10)	89(4)
C(52)	-771(14)	2712(14)	4220(14)	64(5)
O(61)	1842(15)	-379(13)	3353(14)	136(7)
C(61)	1264(16)	197(15)	3190(15)	84(6)
O(62)	-901(16)	225(14)	4073(13)	122(7)
C(62)	-452(17)	578(16)	3688(15)	80(6)
C(111)	4079(11)	2095(11)	-665(10)	45(4)
C(113)	4167(18)	875(15)	354(15)	87(7)
C(115)	4462(16)	2511(13)	1014(11)	69(5)
C(116)	4321(14)	2788(12)	143(11)	56(4)
C(121)	4060(12)	1425(10)	-2549(11)	45(4)
C(122)	3336(13)	965(12)	-3385(11)	55(4)
C(123)	3582(16)	236(14)	-3925(12)	76(6)
C(124)	4577(19)	-36(14)	-3610(15)	88(7)
C(125)	5319(16)	431(12)	-2773(14)	69(5)
C(126)	5060(12)	1157(11)	-2216(12)	53(4)
C(131)	2408(13)	2495(11)	-2302(11)	48(4)
C(132)	1735(14)	1946(13)	-2021(13)	65(5)
C(133)	689(15)	2008(15)	-2364(13)	70(5)
C(134)	316(15)	2671(13)	-2985(13)	66(5)
C(135)	964(15)	3223(14)	-3274(12)	68(5)
C(136)	2032(13)	3144(12)	-2926(12)	59(4)
C(211)	6264(12)	4679(12)	-1130(11)	50(4)
C(212)	6426(15)	4486(13)	-227(12)	63(5)
C(213)	7264(17)	5011(16)	546(13)	76(6)

C(214)	7908(17)	5722(16)	412(15)	81(6)
C(215)	7753(16)	5914(14)	-490(14)	74(5)
C(216)	6939(14)	5425(12)	-1259(12)	56(4)
C(221)	4604(12)	4893(10)	-2854(10)	45(4)
C(222)	4971(13)	5226(12)	-3535(11)	54(4)
C(223)	4522(16)	5942(14)	-4028(14)	74(6)
C(224)	3746(16)	6362(14)	-3841(16)	80(6)
C(225)	3380(18)	6081(15)	-3191(18)	94(7)
C(226)	3816(14)	5341(12)	-2676(14)	64(5)
C(231)	5735(12)	3270(11)	-2835(11)	48(4)
C(232)	6770(14)	3095(14)	-2466(13)	68(5)
C(233)	7149(15)	2502(15)	-3028(18)	83(6)
C(235)	5521(21)	2219(13)	-4292(14)	85(7)
C(236)	5093(14)	2838(12)	-3750(12)	60(5)
C(114)	4401(18)	1560(15)	1132(15)	84(6)
C(112)	4026(16)	1106(12)	-550(12)	65(5)
O(1)	1365(10)	2857(8)	1765(9)	70(3)
O(20)	-1501(11)	4179(10)	2414(9)	80(4)
O(10)	-1028(11)	-103(9)	1063(10)	80(4)
O(30)	2025(12)	2184(12)	4986(10)	100(5)
C(12)	843(20)	4671(20)	2305(18)	98(7)
C(30)	1659(15)	2286(14)	4144(18)	85(7)
C(20)	-867(16)	3701(14)	2329(13)	68(5)
O(12)	1162(18)	5504(13)	2536(17)	149(9)
C(10)	-497(16)	644(14)	1358(13)	74(6)
C(234)	6523(19)	2059(15)	-3935(17)	84(6)

Table 2. Bond lengths [Å] and angles [°] for (PPN)[Fe₃Rh₃(O)(CO)₁₅] (3b).

Fe(1)-C(12)	1.77(3)	Fe(1)-C(11)	1.81(2)
Fe(1)-O(1)	1.881(12)	Fe(1)-C(20)	1.89(2)
Fe(1)-Fe(3)	2.573(4)	Fe(1)-Fe(2)	2.624(3)
Fe(1)-Rh(4)	2.667(3)	Fe(1)-Rh(5)	2.672(3)
Fe(2)-C(21)	1.74(2)	Fe(2)-C(22)	1.81(2)
Fe(2)-C(10)	1.84(2)	Fe(2)-O(1)	1.903(12)
Fe(2)-Fe(3)	2.599(3)	Fe(2)-Rh(6)	2.654(3)
Fe(2)-Rh(4)	2.691(3)	Fe(3)-C(31)	1.75(2)
Fe(3)-C(32)	1.77(2)	Fe(3)-C(30)	1.81(3)
Fe(3)-O(1)	1.897(13)	Fe(3)-Rh(5)	2.670(3)
Fe(3)-Rh(6)	2.670(3)	Rh(4)-C(42)	1.87(2)
Rh(4)-C(41)	1.88(2)	Rh(4)-C(20)	2.35(2)
Rh(4)-C(10)	2.36(2)	Rh(4)-Rh(5)	2.760(2)
Rh(4)-Rh(6)	2.774(2)	Rh(5)-C(52)	1.88(2)
Rh(5)-C(51)	1.91(2)	Rh(5)-C(20)	2.27(2)
Rh(5)-C(30)	2.36(2)	Rh(5)-Rh(6)	2.757(2)
Rh(6)-C(61)	1.84(2)	Rh(6)-C(62)	1.94(3)
Rh(6)-C(30)	2.30(2)	Rh(6)-C(10)	2.40(2)
N-P(1)	1.553(13)	N-P(2)	1.587(13)
P(1)-C(111)	1.78(2)	P(1)-C(121)	1.819(14)
P(1)-C(131)	1.82(2)	P(2)-C(231)	1.78(2)
P(2)-C(211)	1.79(2)	P(2)-C(221)	1.80(2)
O(11)-C(11)	1.15(2)	O(21)-C(21)	1.19(2)
C(22)-O(22)	1.14(2)	C(31)-O(31)	1.15(2)
C(32)-O(32)	1.13(2)	O(41)-C(41)	1.13(2)
O(42)-C(42)	1.13(2)	O(51)-C(51)	1.12(2)
O(52)-C(52)	1.13(2)	O(61)-C(61)	1.16(2)
O(62)-C(62)	1.11(3)	C(111)-C(116)	1.39(2)
C(111)-C(112)	1.41(2)	C(113)-C(114)	1.35(3)
C(113)-C(112)	1.39(3)	C(115)-C(114)	1.36(2)
C(115)-C(116)	1.37(2)	C(121)-C(122)	1.36(2)
C(121)-C(126)	1.39(2)	C(122)-C(123)	1.37(2)
C(123)-C(124)	1.39(3)	C(124)-C(125)	1.37(3)
C(125)-C(126)	1.39(2)	C(131)-C(132)	1.37(2)
C(131)-C(136)	1.38(2)	C(132)-C(133)	1.37(2)
C(133)-C(134)	1.39(3)	C(134)-C(135)	1.35(3)
C(135)-C(136)	1.40(2)	C(211)-C(212)	1.37(2)
C(211)-C(216)	1.42(2)	C(212)-C(213)	1.40(3)
C(213)-C(214)	1.36(3)	C(214)-C(215)	1.37(3)
C(215)-C(216)	1.37(2)	C(221)-C(226)	1.39(2)
C(221)-C(222)	1.40(2)	C(222)-C(223)	1.37(2)
C(223)-C(224)	1.36(3)	C(224)-C(225)	1.34(3)
C(225)-C(226)	1.41(2)	C(231)-C(236)	1.39(2)
C(231)-C(232)	1.40(2)	C(232)-C(233)	1.38(3)
C(233)-C(234)	1.38(3)	C(235)-C(234)	1.35(3)
C(235)-C(236)	1.43(2)	O(20)-C(20)	1.18(2)
O(10)-C(10)	1.17(2)	O(30)-C(30)	1.22(3)
C(12)-O(12)	1.18(3)		
C(12)-Fe(1)-C(11)	90.8(11)	C(12)-Fe(1)-O(1)	100.0(8)
C(11)-Fe(1)-O(1)	98.8(7)	C(12)-Fe(1)-C(20)	92.2(9)
C(11)-Fe(1)-C(20)	94.6(9)	O(1)-Fe(1)-C(20)	161.7(7)
C(12)-Fe(1)-Fe(3)	98.3(9)	C(11)-Fe(1)-Fe(3)	145.9(6)
O(1)-Fe(1)-Fe(3)	47.3(4)	C(20)-Fe(1)-Fe(3)	117.6(6)
C(12)-Fe(1)-Fe(2)	146.4(7)	C(11)-Fe(1)-Fe(2)	95.3(6)
O(1)-Fe(1)-Fe(2)	46.4(4)	C(20)-Fe(1)-Fe(2)	120.0(6)
Fe(3)-Fe(1)-Fe(2)	59.99(9)	C(12)-Fe(1)-Rh(4)	151.0(7)
C(11)-Fe(1)-Rh(4)	95.3(7)	O(1)-Fe(1)-Rh(4)	106.9(4)
C(20)-Fe(1)-Rh(4)	59.1(6)	Fe(3)-Fe(1)-Rh(4)	92.33(9)

Fe(2)-Fe(1)-Rh(4)	61.13(8)	C(12)-Fe(1)-Rh(5)	99.8(8)
C(11)-Fe(1)-Rh(5)	149.2(7)	O(1)-Fe(1)-Rh(5)	107.5(4)
C(20)-Fe(1)-Rh(5)	56.5(6)	Fe(3)-Fe(1)-Rh(5)	61.16(8)
Fe(2)-Fe(1)-Rh(5)	91.61(9)	Rh(4)-Fe(1)-Rh(5)	62.27(7)
C(21)-Fe(2)-C(22)	93.5(8)	C(21)-Fe(2)-C(10)	95.2(9)
C(22)-Fe(2)-C(10)	91.4(8)	C(21)-Fe(2)-O(1)	98.2(7)
C(22)-Fe(2)-O(1)	97.5(7)	C(10)-Fe(2)-O(1)	163.4(7)
C(21)-Fe(2)-Fe(3)	95.0(6)	C(22)-Fe(2)-Fe(3)	144.0(6)
C(10)-Fe(2)-Fe(3)	122.4(6)	O(1)-Fe(2)-Fe(3)	46.7(4)
C(21)-Fe(2)-Fe(1)	143.7(6)	C(22)-Fe(2)-Fe(1)	95.3(5)
C(10)-Fe(2)-Fe(1)	119.6(6)	O(1)-Fe(2)-Fe(1)	45.7(4)
Fe(3)-Fe(2)-Fe(1)	59.03(9)	C(21)-Fe(2)-Rh(6)	97.6(7)
C(22)-Fe(2)-Rh(6)	151.4(6)	C(10)-Fe(2)-Rh(6)	61.4(6)
O(1)-Fe(2)-Rh(6)	106.9(4)	Fe(3)-Fe(2)-Rh(6)	61.10(9)
Fe(1)-Fe(2)-Rh(6)	91.24(9)	C(21)-Fe(2)-Rh(4)	152.6(7)
C(22)-Fe(2)-Rh(4)	97.0(6)	C(10)-Fe(2)-Rh(4)	59.4(6)
O(1)-Fe(2)-Rh(4)	105.4(4)	Fe(3)-Fe(2)-Rh(4)	91.21(9)
Fe(1)-Fe(2)-Rh(4)	60.22(8)	Rh(6)-Fe(2)-Rh(4)	62.54(7)
C(31)-Fe(3)-C(32)	93.1(9)	C(31)-Fe(3)-C(30)	92.5(10)
C(32)-Fe(3)-C(30)	91.3(10)	C(31)-Fe(3)-O(1)	100.3(9)
C(32)-Fe(3)-O(1)	99.6(8)	C(30)-Fe(3)-O(1)	162.6(7)
C(31)-Fe(3)-Fe(1)	94.3(8)	C(32)-Fe(3)-Fe(1)	146.4(8)
C(30)-Fe(3)-Fe(1)	121.0(6)	O(1)-Fe(3)-Fe(1)	46.8(4)
C(31)-Fe(3)-Fe(2)	146.8(8)	C(32)-Fe(3)-Fe(2)	97.1(6)
C(30)-Fe(3)-Fe(2)	118.6(6)	O(1)-Fe(3)-Fe(2)	46.9(4)
Fe(1)-Fe(3)-Fe(2)	60.97(9)	C(31)-Fe(3)-Rh(5)	94.2(6)
C(32)-Fe(3)-Rh(5)	150.5(8)	C(30)-Fe(3)-Rh(5)	59.8(6)
O(1)-Fe(3)-Rh(5)	107.1(4)	Fe(1)-Fe(3)-Rh(5)	61.25(8)
Fe(2)-Fe(3)-Rh(5)	92.22(10)	C(31)-Fe(3)-Rh(6)	148.4(7)
C(32)-Fe(3)-Rh(6)	98.7(8)	C(30)-Fe(3)-Rh(6)	58.1(6)
O(1)-Fe(3)-Rh(6)	106.5(4)	Fe(1)-Fe(3)-Rh(6)	91.99(10)
Fe(2)-Fe(3)-Rh(6)	60.46(8)	Rh(5)-Fe(3)-Rh(6)	62.16(7)
C(42)-Rh(4)-C(41)	92.8(9)	C(42)-Rh(4)-C(20)	107.4(8)
C(41)-Rh(4)-C(20)	97.0(8)	C(42)-Rh(4)-C(10)	106.3(8)
C(41)-Rh(4)-C(10)	92.9(8)	C(20)-Rh(4)-C(10)	144.3(7)
C(42)-Rh(4)-Fe(1)	149.6(6)	C(41)-Rh(4)-Fe(1)	99.6(7)
C(20)-Rh(4)-Fe(1)	43.7(5)	C(10)-Rh(4)-Fe(1)	100.8(5)
C(42)-Rh(4)-Fe(2)	146.3(6)	C(41)-Rh(4)-Fe(2)	99.3(7)
C(20)-Rh(4)-Fe(2)	102.3(5)	C(10)-Rh(4)-Fe(2)	42.1(5)
Fe(1)-Rh(4)-Fe(2)	58.65(7)	C(42)-Rh(4)-Rh(5)	97.4(6)
C(41)-Rh(4)-Rh(5)	149.0(7)	C(20)-Rh(4)-Rh(5)	51.9(5)
C(10)-Rh(4)-Rh(5)	112.0(5)	Fe(1)-Rh(4)-Rh(5)	58.96(7)
Fe(2)-Rh(4)-Rh(5)	88.30(7)	C(42)-Rh(4)-Rh(6)	96.4(6)
C(41)-Rh(4)-Rh(6)	147.9(7)	C(20)-Rh(4)-Rh(6)	109.3(5)
C(10)-Rh(4)-Rh(6)	54.9(5)	Fe(1)-Rh(4)-Rh(6)	87.76(7)
Fe(2)-Rh(4)-Rh(6)	58.07(7)	Rh(5)-Rh(4)-Rh(6)	59.75(5)
C(52)-Rh(5)-C(51)	94.6(9)	C(52)-Rh(5)-C(20)	104.0(8)
C(51)-Rh(5)-C(20)	93.5(8)	C(52)-Rh(5)-C(30)	110.8(9)
C(51)-Rh(5)-C(30)	95.5(8)	C(20)-Rh(5)-C(30)	143.2(8)
C(52)-Rh(5)-Fe(3)	149.9(5)	C(51)-Rh(5)-Fe(3)	99.4(6)
C(20)-Rh(5)-Fe(3)	101.7(5)	C(30)-Rh(5)-Fe(3)	41.6(7)
C(52)-Rh(5)-Fe(1)	145.4(6)	C(51)-Rh(5)-Fe(1)	99.5(7)
C(20)-Rh(5)-Fe(1)	44.1(5)	C(30)-Rh(5)-Fe(1)	99.1(7)
Fe(3)-Rh(5)-Fe(1)	57.60(8)	C(52)-Rh(5)-Rh(6)	96.3(6)
C(51)-Rh(5)-Rh(6)	148.3(6)	C(20)-Rh(5)-Rh(6)	112.4(5)
C(30)-Rh(5)-Rh(6)	52.8(5)	Fe(3)-Rh(5)-Rh(6)	58.93(7)
Fe(1)-Rh(5)-Rh(6)	88.02(7)	C(52)-Rh(5)-Rh(4)	93.8(6)
C(51)-Rh(5)-Rh(4)	148.1(7)	C(20)-Rh(5)-Rh(4)	54.6(5)
C(30)-Rh(5)-Rh(4)	110.0(5)	Fe(3)-Rh(5)-Rh(4)	88.22(7)
Fe(1)-Rh(5)-Rh(4)	58.77(6)	Rh(6)-Rh(5)-Rh(4)	60.38(5)
C(61)-Rh(6)-C(62)	95.8(9)	C(61)-Rh(6)-C(30)	93.1(8)
C(62)-Rh(6)-C(30)	107.7(9)	C(61)-Rh(6)-C(10)	95.0(8)
C(62)-Rh(6)-C(10)	107.7(8)	C(30)-Rh(6)-C(10)	142.6(9)

C(61)-Rh(6)-Fe(2)	98.4(7)	C(62)-Rh(6)-Fe(2)	147.8(6)
C(30)-Rh(6)-Fe(2)	100.3(7)	C(10)-Rh(6)-Fe(2)	42.4(5)
C(61)-Rh(6)-Fe(3)	98.7(7)	C(62)-Rh(6)-Fe(3)	146.6(6)
C(30)-Rh(6)-Fe(3)	41.8(7)	C(10)-Rh(6)-Fe(3)	100.8(5)
Fe(2)-Rh(6)-Fe(3)	58.44(8)	C(61)-Rh(6)-Rh(5)	147.7(7)
C(62)-Rh(6)-Rh(5)	94.1(6)	C(30)-Rh(6)-Rh(5)	54.6(5)
C(10)-Rh(6)-Rh(5)	111.0(5)	Fe(2)-Rh(6)-Rh(5)	89.13(7)
Fe(3)-Rh(6)-Rh(5)	58.91(7)	C(61)-Rh(6)-Rh(4)	148.8(7)
C(62)-Rh(6)-Rh(4)	95.0(6)	C(30)-Rh(6)-Rh(4)	111.2(5)
C(10)-Rh(6)-Rh(4)	53.8(5)	Fe(2)-Rh(6)-Rh(4)	59.38(6)
Fe(3)-Rh(6)-Rh(4)	87.92(8)	Rh(5)-Rh(6)-Rh(4)	59.87(5)
P(1)-N-P(2)	145.5(9)	N-P(1)-C(111)	110.5(7)
N-P(1)-C(121)	115.2(7)	C(111)-P(1)-C(121)	106.7(7)
N-P(1)-C(131)	110.5(7)	C(111)-P(1)-C(131)	106.0(7)
C(121)-P(1)-C(131)	107.5(7)	N-P(2)-C(231)	114.7(7)
N-P(2)-C(211)	109.5(7)	C(231)-P(2)-C(211)	107.8(7)
N-P(2)-C(221)	112.6(7)	C(231)-P(2)-C(221)	105.6(7)
C(211)-P(2)-C(221)	106.1(7)	O(11)-C(11)-Fe(1)	179(2)
O(21)-C(21)-Fe(2)	179(2)	O(22)-C(22)-Fe(2)	178(2)
O(31)-C(31)-Fe(3)	176(2)	O(32)-C(32)-Fe(3)	176(2)
O(41)-C(41)-Rh(4)	179(2)	O(42)-C(42)-Rh(4)	178(2)
O(51)-C(51)-Rh(5)	179(2)	O(52)-C(52)-Rh(5)	179(2)
O(61)-C(61)-Rh(6)	175(2)	O(62)-C(62)-Rh(6)	177(2)
C(116)-C(111)-C(112)	118.1(14)	C(116)-C(111)-P(1)	121.8(12)
C(112)-C(111)-P(1)	120.1(12)	C(114)-C(113)-C(112)	123(2)
C(114)-C(115)-C(116)	122(2)	C(115)-C(116)-C(111)	121(2)
C(122)-C(121)-C(126)	120.7(14)	C(122)-C(121)-P(1)	122.7(12)
C(126)-C(121)-P(1)	116.6(12)	C(121)-C(122)-C(123)	120(2)
C(122)-C(123)-C(124)	120(2)	C(125)-C(124)-C(123)	120(2)
C(124)-C(125)-C(126)	120(2)	C(121)-C(126)-C(125)	119(2)
C(132)-C(131)-C(136)	120(2)	C(132)-C(131)-P(1)	121.3(12)
C(136)-C(131)-P(1)	119.2(13)	C(131)-C(132)-C(133)	121(2)
C(132)-C(133)-C(134)	119(2)	C(135)-C(134)-C(133)	121(2)
C(134)-C(135)-C(136)	120(2)	C(131)-C(136)-C(135)	120(2)
C(212)-C(211)-C(216)	119(2)	C(212)-C(211)-P(2)	120.4(14)
C(216)-C(211)-P(2)	120.8(12)	C(211)-C(212)-C(213)	120(2)
C(214)-C(213)-C(212)	121(2)	C(213)-C(214)-C(215)	120(2)
C(216)-C(215)-C(214)	121(2)	C(215)-C(216)-C(211)	120(2)
C(226)-C(221)-C(222)	117.9(14)	C(226)-C(221)-P(2)	119.3(12)
C(222)-C(221)-P(2)	122.5(12)	C(223)-C(222)-C(221)	120(2)
C(224)-C(223)-C(222)	121(2)	C(225)-C(224)-C(223)	122(2)
C(224)-C(225)-C(226)	119(2)	C(221)-C(226)-C(225)	121(2)
C(236)-C(231)-C(232)	120(2)	C(236)-C(231)-P(2)	119.0(12)
C(232)-C(231)-P(2)	120.8(13)	C(233)-C(232)-C(231)	119(2)
C(234)-C(233)-C(232)	122(2)	C(234)-C(235)-C(236)	121(2)
C(231)-C(236)-C(235)	118(2)	C(113)-C(114)-C(115)	118(2)
C(113)-C(112)-C(111)	118(2)	Fe(1)-O(1)-Fe(3)	85.9(5)
Fe(1)-O(1)-Fe(2)	87.8(5)	Fe(3)-O(1)-Fe(2)	86.3(5)
O(12)-C(12)-Fe(1)	175(2)	O(30)-C(30)-Fe(3)	154(2)
O(30)-C(30)-Rh(6)	121(2)	Fe(3)-C(30)-Rh(6)	80.0(8)
O(30)-C(30)-Rh(5)	120(2)	Fe(3)-C(30)-Rh(5)	78.6(8)
Rh(6)-C(30)-Rh(5)	72.6(6)	O(20)-C(20)-Fe(1)	153(2)
O(20)-C(20)-Rh(5)	120.2(14)	Fe(1)-C(20)-Rh(5)	79.4(7)
O(20)-C(20)-Rh(4)	124(2)	Fe(1)-C(20)-Rh(4)	77.2(6)
Rh(5)-C(20)-Rh(4)	73.5(6)	O(10)-C(10)-Fe(2)	157(2)
O(10)-C(10)-Rh(4)	120(2)	Fe(2)-C(10)-Rh(4)	78.5(7)
O(10)-C(10)-Rh(6)	121(2)	Fe(2)-C(10)-Rh(6)	76.2(7)
Rh(4)-C(10)-Rh(6)	71.3(5)	C(235)-C(234)-C(233)	119(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 3. Anisotropic displacement parameters [$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for(PPN) $[\text{Fe}_3\text{Rh}_3(\text{O})(\text{CO})_{15}]$ (3b).

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(h a^*)^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Fe(1)	62(2)	35(1)	64(2)	8(1)	38(1)	10(1)
Fe(2)	49(1)	49(1)	44(1)	-5(1)	19(1)	8(1)
Fe(3)	43(1)	66(2)	67(2)	-17(1)	18(1)	8(1)
Rh(4)	44(1)	53(1)	49(1)	13(1)	11(1)	8(1)
Rh(5)	53(1)	54(1)	50(1)	3(1)	19(1)	16(1)
Rh(6)	67(1)	52(1)	51(1)	12(1)	14(1)	26(1)
N	62(9)	40(7)	64(8)	12(6)	39(7)	13(6)
P(1)	58(3)	34(2)	43(2)	9(2)	23(2)	11(2)
P(2)	51(3)	36(2)	45(2)	5(2)	21(2)	12(2)
O(11)	157(16)	98(11)	81(10)	40(9)	63(11)	59(11)
C(11)	126(20)	60(12)	102(17)	40(12)	74(16)	37(12)
O(21)	82(10)	104(11)	101(11)	-26(9)	28(9)	31(9)
C(21)	80(15)	76(14)	62(12)	-17(10)	22(11)	-11(12)
C(22)	63(12)	58(11)	50(11)	-1(8)	19(9)	9(9)
O(22)	149(15)	92(11)	53(9)	6(8)	29(9)	16(10)
C(31)	58(12)	76(14)	108(16)	-32(13)	43(12)	-8(11)
O(31)	90(12)	152(16)	181(18)	-94(15)	72(13)	-58(12)
C(32)	60(13)	77(14)	96(15)	-28(11)	15(11)	32(11)
O(32)	56(9)	168(16)	125(14)	-37(12)	9(9)	52(10)
O(41)	109(14)	175(19)	78(11)	44(11)	-17(11)	12(12)
C(41)	58(12)	103(16)	71(14)	25(12)	3(11)	14(11)
O(42)	60(10)	147(15)	145(15)	38(12)	48(10)	1(10)
C(42)	44(11)	77(13)	76(13)	11(10)	13(10)	8(10)
O(51)	114(14)	99(12)	159(17)	-57(12)	76(12)	-21(10)
C(51)	77(15)	91(16)	84(15)	-4(13)	34(12)	15(13)
O(52)	78(10)	110(12)	89(10)	23(9)	36(9)	26(9)
C(52)	39(10)	76(13)	78(13)	8(10)	20(10)	21(9)
O(61)	139(16)	108(13)	151(16)	21(12)	28(13)	81(13)
C(61)	72(14)	76(14)	96(16)	5(12)	18(12)	36(12)
O(62)	145(17)	121(15)	117(14)	58(12)	59(13)	11(12)
C(62)	71(14)	75(14)	70(14)	13(11)	-5(11)	15(11)
C(111)	43(9)	45(9)	48(9)	13(8)	13(7)	14(7)
C(113)	134(20)	57(12)	85(15)	23(11)	50(14)	29(12)
C(115)	112(16)	69(13)	34(9)	-1(8)	37(10)	14(11)
C(116)	76(12)	50(10)	46(10)	6(8)	29(9)	6(9)
C(121)	52(10)	38(8)	49(9)	7(7)	20(8)	14(8)
C(122)	56(11)	57(10)	46(10)	2(8)	13(9)	7(8)
C(123)	81(14)	74(13)	47(10)	-21(9)	-4(10)	36(11)
C(124)	119(20)	58(12)	80(15)	-6(11)	29(14)	32(13)
C(125)	81(14)	54(11)	83(14)	12(10)	39(12)	25(10)
C(126)	51(10)	50(10)	56(10)	7(8)	16(8)	21(8)
C(131)	58(11)	36(8)	51(9)	12(7)	16(8)	22(8)
C(132)	64(13)	71(12)	66(12)	8(10)	32(10)	10(10)
C(133)	58(13)	88(14)	62(12)	9(11)	22(10)	-1(10)
C(134)	59(12)	59(11)	71(12)	-4(10)	15(10)	8(10)
C(135)	74(14)	72(13)	53(11)	12(9)	14(10)	16(11)
C(136)	56(11)	62(11)	55(10)	5(9)	18(9)	7(9)
C(211)	52(10)	54(10)	45(9)	2(8)	20(8)	19(8)
C(212)	72(13)	76(12)	47(11)	22(9)	28(10)	10(10)
C(213)	90(16)	105(16)	47(11)	24(11)	35(11)	29(13)

C(214)	73(14)	92(16)	72(14)	-14(12)	26(12)	12(12)
C(215)	81(14)	60(12)	69(13)	2(10)	17(12)	4(10)
C(216)	72(12)	49(10)	49(10)	0(8)	28(10)	2(9)
C(221)	46(9)	37(8)	46(9)	-1(7)	10(8)	5(7)
C(222)	64(11)	58(10)	55(10)	15(8)	36(9)	16(9)
C(223)	90(15)	74(13)	79(13)	38(11)	46(12)	26(12)
C(224)	87(15)	64(12)	112(17)	55(12)	45(14)	37(11)
C(225)	108(18)	69(14)	146(21)	51(14)	78(17)	51(13)
C(226)	76(13)	50(10)	92(13)	24(10)	56(11)	23(9)
C(231)	44(10)	48(9)	54(10)	12(8)	16(8)	25(8)
C(232)	58(12)	84(13)	65(12)	-4(10)	31(10)	9(10)
C(233)	48(12)	86(15)	126(19)	3(14)	45(13)	21(11)
C(235)	145(23)	56(12)	68(13)	1(10)	56(14)	29(13)
C(236)	70(12)	59(11)	56(11)	16(9)	24(10)	24(9)
C(114)	119(19)	79(15)	81(15)	49(13)	50(14)	42(13)
C(112)	105(15)	49(10)	48(10)	9(8)	35(10)	10(10)
O(1)	85(9)	56(7)	86(9)	8(6)	52(8)	9(6)
O(20)	87(10)	94(10)	90(9)	36(8)	55(8)	53(8)
O(10)	93(10)	55(8)	78(9)	3(7)	19(8)	-10(7)
O(30)	102(12)	130(13)	59(9)	18(9)	7(8)	57(10)
C(12)	105(19)	100(19)	117(19)	7(15)	78(16)	8(15)
C(30)	49(12)	67(13)	110(18)	-12(12)	-1(12)	21(10)
C(20)	81(14)	60(11)	65(12)	6(9)	28(11)	21(11)
O(12)	186(20)	70(11)	217(23)	-19(13)	126(18)	-19(12)
C(10)	86(15)	57(13)	62(12)	2(10)	7(11)	9(11)
C(234)	97(17)	74(14)	107(18)	4(13)	68(15)	35(13)

Table 4. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (PPN) $[\text{Fe}_3\text{Rh}_3(\text{O})(\text{CO})_{15}]$ (3b).

	x	y	z	U(eq)
H(112)	3899(16)	621(12)	-1066(12)	81(11)
H(113)	4097(18)	224(15)	427(15)	81(11)
H(114)	4518(18)	1383(15)	1732(15)	81(11)
H(115)	4604(16)	2987(13)	1541(11)	81(11)
H(116)	4387(14)	3446(12)	90(11)	81(11)
H(122)	2669(13)	1145(12)	-3593(11)	81(11)
H(123)	3084(16)	-74(14)	-4500(12)	81(11)
H(124)	4741(19)	-539(14)	-3969(15)	81(11)
H(125)	5992(16)	265(12)	-2576(14)	81(11)
H(126)	5547(12)	1458(11)	-1632(12)	81(11)
H(132)	1993(14)	1521(13)	-1587(13)	81(11)
H(133)	235(15)	1615(15)	-2184(13)	81(11)
H(134)	-390(15)	2735(13)	-3206(13)	81(11)
H(135)	704(15)	3653(14)	-3701(12)	81(11)
H(136)	2484(13)	3527(12)	-3115(12)	81(11)
H(212)	5983(15)	4010(13)	-125(12)	81(11)
H(213)	7382(17)	4869(16)	1159(13)	81(11)
H(214)	8451(17)	6076(16)	932(15)	81(11)
H(215)	8209(16)	6385(14)	-583(14)	81(11)
H(216)	6827(14)	5582(12)	-1866(12)	81(11)
H(222)	5519(13)	4962(12)	-3651(11)	81(11)
H(223)	4750(16)	6143(14)	-4495(14)	81(11)
H(224)	3465(16)	6857(14)	-4174(16)	81(11)
H(225)	2843(18)	6370(15)	-3079(18)	81(11)
H(226)	3574(14)	5151(12)	-2212(14)	81(11)
H(232)	7199(14)	3375(14)	-1850(13)	81(11)
H(233)	7844(15)	2399(15)	-2789(18)	81(11)
H(234)	6791(19)	1652(15)	-4297(17)	81(11)
H(235)	5100(21)	1921(13)	-4904(14)	81(11)
H(236)	4402(14)	2950(12)	-4003(12)	81(11)