

**Table S2.3** Atomic coordinates ( x 104) and equivalent isotropic displacement parameters (Å2x 103) . U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

x y z U(eq)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Rh(1C) 4550(1) 7950(1) 1334(1) 25(1)

Cl(2C) 5059(2) 8914(4) 1837(1) 36(1)

Cl(1C) 4043(2) 6945(4) 831(1) 36(1)

C(20C) 3812(7) 5849(17) 2372(6) 39(3)

C(1C) 4320(6) 10164(15) 1003(5) 28(3)

C(12C) 6161(6) 10856(15) 427(5) 30(3)

C(4C) 3918(6) 10089(15) 1291(5) 32(3)

C(19C) 4125(6) 5168(16) 2161(5) 30(3)

C(10C) 6564(7) 9908(17) -98(5) 38(3)

C(17C) 4518(7) 3331(18) 2011(6) 44(4)

C(15C) 4647(6) 5012(16) 1608(5) 31(3)

C(9C) 6314(7) 8902(17) -11(5) 38(3)

C(23C) 5987(7) 6077(18) 907(6) 44(5)

C(11C) 6495(8) 10942(18) 116(6) 42(4)

N(3C) 4248(5) 6876(13) 1741(4) 30(2)

O(2C) 3457(5) 9321(11) 1948(4) 40(3)

N(1C) 4645(5) 9333(12) 969(4) 25(2)

N(2C) 3959(5) 8921(12) 1457(4) 31(1)

C(22C) 5538(6) 6616(15) 1060(5) 31(4)

C(13C) 3906(6) 7476(14) 1933(5) 30(3)

O(1C) 4337(4) 11076(11) 773(4) 35(3)

C(3C) 4746(6) 10803(16) 510(5) 33(3)

C(18C) 4236(7) 3985(17) 2231(6) 38(3)

C(14C) 4352(6) 5717(15) 1832(5) 27(2)

C(21C) 3677(7) 6976(17) 2255(5) 37(3)

C(2C) 4980(6) 9647(14) 661(4) 24(3)

N(4C) 5187(5) 7050(13) 1175(4) 31(3)

C(6C) 5563(6) 9745(14) 833(5) 26(3)

C(5C) 3753(7) 8674(16) 1786(5) 32(3)

C(16C) 4731(6) 3851(17) 1689(5) 35(3)

C(8C) 5987(7) 8839(17) 273(5) 40(4)

C(7C) 5923(6) 9836(14) 506(4) 24(2)

Rh(1) 1622(1) 7714(1) 1686(1) 19(1)

Cl(2) 2302(1) 7408(3) 2181(1) 22(1)

Cl(1) 921(1) 7996(3) 1191(1) 26(1)

C(14) 856(5) 8021(14) 2352(4) 23(2)

N(1) 2143(5) 7534(11) 1284(4) 24(2)

C(4) 2248(6) 9618(14) 1389(5) 30(3)

C(8) 2368(8) 3910(16) 938(6) 45(4)

C(12) 3307(8) 4237(15) 1107(5) 38(3)

C(17) 253(6) 7050(15) 2908(5) 32(3)

C(21) 917(6) 10442(13) 2280(5) 27(3)

C(3) 2658(7) 7265(14) 767(5) 32(3)

C(13) 1190(6) 9677(12) 2054(5) 23(3)

C(15) 822(6) 6809(13) 2387(5) 26(3)

C(10) 3001(9) 2457(18) 776(7) 57(5)

C(16) 516(7) 6318(15) 2657(5) 30(3)

N(4) 1445(5) 5955(10) 1698(4) 19(1)

C(5) 1566(6) 10163(13) 1785(5) 22(3)

C(22) 1433(6) 4953(13) 1721(4) 19(2)

N(3) 1165(5) 8499(10) 2086(3) 18(2)

C(23) 1415(6) 3670(13) 1769(5) 24(3)

C(11) 3394(9) 3125(19) 935(6) 54(4)

N(2) 1829(5) 9367(12) 1641(4) 31(1)

C(1) 2348(6) 8486(14) 1193(5) 26(3)

C(2) 2342(6) 6558(13) 1051(5) 27(3)

C(20) 618(6) 10001(14) 2545(5) 27(3)

C(7) 2791(7) 4601(14) 1121(5) 31(3)

C(18) 295(6) 8255(13) 2875(5) 26(3)

C(9) 2489(9) 2809(19) 770(7) 57(5)

O(2) 1602(5) 11249(10) 1735(4) 37(3)

C(6) 2680(7) 5717(15) 1320(5) 35(4)

O(1) 2691(5) 8453(10) 920(4) 33(2)

C(19) 599(6) 8754(14) 2599(5) 25(3)

Rh(1D) 3614(1) 6969(1) 3760(1) 29(1)

Cl(2D) 4089(2) 7905(4) 4290(1) 35(1)

Cl(1D) 3142(2) 6035(5) 3232(1) 41(1)

C(11D) 2215(7) 5803(15) 5513(5) 34(3)

N(2D) 4229(5) 6084(12) 3642(4) 31(1)

C(9D) 1886(6) 4332(14) 5058(5) 29(3)

C(19D) 4036(7) 9899(18) 2987(5) 40(3)

C(2D) 3118(7) 5057(14) 4333(5) 31(3)

C(23D) 2069(6) 8301(15) 4174(5) 31(4)

C(7D) 2644(6) 5478(13) 4935(5) 28(3)

C(3D) 3321(6) 3820(15) 4422(5) 35(3)

C(15D) 3442(7) 9917(17) 3496(5) 37(4)

N(3D) 3919(5) 8137(14) 3380(4) 34(3)

C(20D) 4411(6) 9287(17) 2788(5) 37(3)

C(18D) 3906(8) 11082(19) 2911(6) 47(4)

C(17D) 3567(8) 11646(19) 3114(6) 46(4)

C(8D) 2301(6) 4605(14) 4832(5) 29(3)

O(2D) 4820(5) 5854(12) 3193(4) 48(3)

C(22D) 2554(6) 7980(15) 4021(4) 26(3)

C(10D) 1862(7) 4950(14) 5413(5) 28(3)

O(1D) 3798(6) 3697(12) 4231(5) 55(4)

C(14D) 3798(6) 9301(16) 3284(5) 34(3)

C(6D) 3090(7) 5791(16) 4706(5) 38(4)

C(13D) 4306(6) 7620(16) 3204(5) 34(3)

C(1D) 3858(8) 4743(17) 4046(6) 44(4)

N(4D) 2929(4) 7717(12) 3902(4) 25(3)

C(16D) 3331(8) 11046(18) 3409(6) 42(4)

C(21D) 4562(6) 8185(18) 2911(5) 39(3)

C(5D) 4475(6) 6411(16) 3341(5) 33(3)

N(1D) 3508(6) 5525(13) 4089(4) 33(3)

C(12D) 2614(7) 6073(15) 5296(5) 36(3)

Rh(1B) 1539(1) 3041(1) 3269(1) 18(1)

N(1B) 992(5) 3399(10) 3630(3) 20(2)

C(9B) 652(6) 8247(17) 3985(6) 45(3)

C(4B) 968(7) 1287(14) 3672(6) 36(4)

C(7B) 945(7) 6271(16) 4189(5) 36(3)

C(21B) 2234(6) 98(13) 2778(5) 27(3)

C(22B) 1761(6) 5763(12) 3165(4) 19(2)

C(8B) 806(7) 7098(17) 3903(6) 40(3)

Cl(1B) 901(1) 3170(3) 2734(1) 24(1)

N(2B) 1335(4) 1436(10) 3384(3) 19(1)

N(3B) 2027(5) 2091(10) 2926(4) 22(2)

C(10B) 619(9) 8490(20) 4358(7) 62(5)

C(17B) 2958(6) 3228(14) 2070(5) 29(3)

C(2B) 746(6) 4458(13) 3782(4) 23(3)

C(1B) 795(6) 2473(13) 3765(4) 22(3)

C(13B) 1977(6) 943(12) 2988(5) 22(3)

O(2B) 1577(5) -501(9) 3375(4) 33(3)

O(1B) 413(5) 2638(10) 3999(4) 37(3)

C(5B) 1612(7) 541(13) 3275(5) 29(3)

C(15B) 2396(6) 3672(13) 2579(5) 22(3)

N(4B) 1700(5) 4784(10) 3194(3) 19(1)

C(19B) 2593(5) 1653(12) 2422(4) 20(2)

C(12B) 896(8) 6528(19) 4579(6) 49(4)

Cl(2B) 2172(1) 2961(3) 3811(1) 24(1)

C(14B) 2326(6) 2477(12) 2647(4) 21(2)

C(16B) 2702(6) 4050(14) 2292(5) 28(3)

C(23B) 1844(6) 7025(14) 3112(5) 29(3)

C(6B) 1150(6) 5103(14) 4072(5) 28(3)

C(18B) 2895(6) 2069(14) 2133(5) 29(3)

C(20B) 2541(6) 436(13) 2499(5) 24(3)

C(3B) 289(7) 3888(15) 3988(6) 37(4)

C(11B) 724(8) 7660(20) 4685(7) 58(5)

C(4D) 4312(9) 4916(19) 3812(7) 55(5)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ **Table S2.4.** Bond lengths [Å] and angles [°].

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Rh(1C)-Cl(2C) 2.327(4)

Rh(1C)-Cl(1C) 2.345(4)

Rh(1C)-N(3C) 2.070(14)

Rh(1C)-N(1C) 2.045(14)

Rh(1C)-N(2C) 1.960(13)

Rh(1C)-N(4C) 2.053(13)

C(20C)-H(20C) 0.9500

C(20C)-C(19C) 1.38(3)

C(20C)-C(21C) 1.38(3)

C(1C)-C(4C) 1.51(2)

C(1C)-N(1C) 1.27(2)

C(1C)-O(1C) 1.31(2)

C(12C)-H(12C) 0.9500

C(12C)-C(11C) 1.44(2)

C(12C)-C(7C) 1.35(2)

C(4C)-H(4CA) 0.9900

C(4C)-H(4CB) 0.9900

C(4C)-N(2C) 1.45(2)

C(19C)-C(18C) 1.39(3)

C(19C)-C(14C) 1.46(2)

C(10C)-H(10C) 0.9500

C(10C)-C(9C) 1.36(3)

C(10C)-C(11C) 1.41(3)

C(17C)-H(17C) 0.9500

C(17C)-C(18C) 1.33(3)

C(17C)-C(16C) 1.41(2)

C(15C)-H(15C) 0.9500

C(15C)-C(14C) 1.39(2)

C(15C)-C(16C) 1.36(2)

C(9C)-H(9C) 0.9500

C(9C)-C(8C) 1.36(3)

C(23C)-H(23A) 0.9800

C(23C)-H(23B) 0.9800

C(23C)-H(23C) 0.9800

C(23C)-C(22C) 1.45(2)

C(11C)-H(11C) 0.9500

N(3C)-C(13C) 1.34(2)

N(3C)-C(14C) 1.38(2)

O(2C)-C(5C) 1.23(2)

N(1C)-C(2C) 1.48(2)

N(2C)-C(5C) 1.33(2)

C(22C)-N(4C) 1.14(2)

C(13C)-C(21C) 1.42(2)

C(13C)-C(5C) 1.49(2)

O(1C)-C(3C) 1.490(19)

C(3C)-H(3CA) 0.9900

C(3C)-H(3CB) 0.9900

C(3C)-C(2C) 1.52(2)

C(18C)-H(18C) 0.9500

C(21C)-H(21C) 0.9500

C(2C)-H(2C) 1.0000

C(2C)-C(6C) 1.55(2)

C(6C)-H(6CA) 0.9900

C(6C)-H(6CB) 0.9900

C(6C)-C(7C) 1.53(2)

C(16C)-H(16C) 0.9500

C(8C)-H(8C) 0.9500

C(8C)-C(7C) 1.41(2)

Rh(1)-Cl(2) 2.329(3)

Rh(1)-Cl(1) 2.361(3)

Rh(1)-N(1) 2.034(13)

Rh(1)-N(4) 2.056(12)

Rh(1)-N(3) 2.098(12)

Rh(1)-N(2) 1.968(14)

C(14)-C(15) 1.39(2)

C(14)-N(3) 1.384(19)

C(14)-C(19) 1.40(2)

N(1)-C(1) 1.260(19)

N(1)-C(2) 1.490(19)

C(4)-H(4A) 0.9900

C(4)-H(4B) 0.9900

C(4)-N(2) 1.48(2)

C(4)-C(1) 1.49(2)

C(8)-H(8) 0.9500

C(8)-C(7) 1.43(3)

C(8)-C(9) 1.43(3)

C(12)-H(12) 0.9500

C(12)-C(11) 1.43(3)

C(12)-C(7) 1.40(2)

C(17)-H(17) 0.9500

C(17)-C(16) 1.42(2)

C(17)-C(18) 1.38(2)

C(21)-H(21) 0.9500

C(21)-C(13) 1.40(2)

C(21)-C(20) 1.35(2)

C(3)-H(3A) 0.9900

C(3)-H(3B) 0.9900

C(3)-C(2) 1.56(2)

C(3)-O(1) 1.452(19)

C(13)-C(5) 1.51(2)

C(13)-N(3) 1.348(18)

C(15)-H(15) 0.9500

C(15)-C(16) 1.39(2)

C(10)-H(10) 0.9500

C(10)-C(11) 1.33(3)

C(10)-C(9) 1.37(3)

C(16)-H(16) 0.9500

N(4)-C(22) 1.145(19)

C(5)-N(2) 1.26(2)

C(5)-O(2) 1.254(18)

C(22)-C(23) 1.47(2)

C(23)-H(23D) 0.9800

C(23)-H(23E) 0.9800

C(23)-H(23F) 0.9800

C(11)-H(11) 0.9500

C(1)-O(1) 1.35(2)

C(2)-H(2) 1.0000

C(2)-C(6) 1.53(2)

C(20)-H(20) 0.9500

C(20)-C(19) 1.43(2)

C(7)-C(6) 1.48(2)

C(18)-H(18) 0.9500

C(18)-C(19) 1.41(2)

C(9)-H(9) 0.9500

C(6)-H(6A) 0.9900

C(6)-H(6B) 0.9900

Rh(1D)-Cl(2D) 2.338(4)

Rh(1D)-Cl(1D) 2.327(4)

Rh(1D)-N(2D) 1.952(13)

Rh(1D)-N(3D) 2.075(14)

Rh(1D)-N(4D) 2.060(12)

Rh(1D)-N(1D) 2.032(15)

C(11D)-H(11D) 0.9500

C(11D)-C(10D) 1.35(2)

C(11D)-C(12D) 1.37(2)

N(2D)-C(5D) 1.32(2)

N(2D)-C(4D) 1.46(2)

C(9D)-H(9D) 0.9500

C(9D)-C(8D) 1.42(2)

C(9D)-C(10D) 1.41(2)

C(19D)-C(20D) 1.42(3)

C(19D)-C(18D) 1.41(3)

C(19D)-C(14D) 1.42(2)

C(2D)-H(2D) 1.0000

C(2D)-C(3D) 1.52(2)

C(2D)-C(6D) 1.54(2)

C(2D)-N(1D) 1.47(2)

C(23D)-H(23G) 0.9800

C(23D)-H(23H) 0.9800

C(23D)-H(23I) 0.9800

C(23D)-C(22D) 1.45(2)

C(7D)-C(8D) 1.35(2)

C(7D)-C(6D) 1.50(2)

C(7D)-C(12D) 1.42(2)

C(3D)-H(3DA) 0.9900

C(3D)-H(3DB) 0.9900

C(3D)-O(1D) 1.46(2)

C(15D)-H(15D) 0.9500

C(15D)-C(14D) 1.41(2)

C(15D)-C(16D) 1.34(3)

N(3D)-C(14D) 1.39(2)

N(3D)-C(13D) 1.35(2)

C(20D)-H(20D) 0.9500

C(20D)-C(21D) 1.37(3)

C(18D)-H(18D) 0.9500

C(18D)-C(17D) 1.34(3)

C(17D)-H(17D) 0.9500

C(17D)-C(16D) 1.41(3)

C(8D)-H(8D) 0.9500

O(2D)-C(5D) 1.24(2)

C(22D)-N(4D) 1.125(18)

C(10D)-H(10D) 0.9500

O(1D)-C(1D) 1.37(2)

C(6D)-H(6DA) 0.9900

C(6D)-H(6DB) 0.9900

C(13D)-C(21D) 1.41(2)

C(13D)-C(5D) 1.50(3)

C(1D)-N(1D) 1.29(2)

C(1D)-C(4D) 1.50(3)

C(16D)-H(16D) 0.9500

C(21D)-H(21D) 0.9500

C(12D)-H(12D) 0.9500

Rh(1B)-N(1B) 2.014(12)

Rh(1B)-Cl(1B) 2.330(4)

Rh(1B)-N(2B) 1.954(12)

Rh(1B)-N(3B) 2.107(12)

Rh(1B)-N(4B) 2.050(12)

Rh(1B)-Cl(2B) 2.339(3)

N(1B)-C(2B) 1.482(18)

N(1B)-C(1B) 1.278(18)

C(9B)-H(9B) 0.9500

C(9B)-C(8B) 1.40(3)

C(9B)-C(10B) 1.32(3)

C(4B)-H(4BA) 0.9900

C(4B)-H(4BB) 0.9900

C(4B)-N(2B) 1.45(2)

C(4B)-C(1B) 1.47(2)

C(7B)-C(8B) 1.38(3)

C(7B)-C(12B) 1.39(3)

C(7B)-C(6B) 1.50(2)

C(21B)-H(21B) 0.9500

C(21B)-C(13B) 1.41(2)

C(21B)-C(20B) 1.36(2)

C(22B)-N(4B) 1.132(18)

C(22B)-C(23B) 1.47(2)

C(8B)-H(8B) 0.9500

N(2B)-C(5B) 1.320(19)

N(3B)-C(13B) 1.334(18)

N(3B)-C(14B) 1.364(19)

C(10B)-H(10B) 0.9500

C(10B)-C(11B) 1.47(3)

C(17B)-H(17B) 0.9500

C(17B)-C(16B) 1.41(2)

C(17B)-C(18B) 1.35(2)

C(2B)-H(2B) 1.0000

C(2B)-C(6B) 1.54(2)

C(2B)-C(3B) 1.57(2)

C(1B)-O(1B) 1.346(18)

C(13B)-C(5B) 1.50(2)

O(2B)-C(5B) 1.242(19)

O(1B)-C(3B) 1.46(2)

C(15B)-H(15B) 0.9500

C(15B)-C(14B) 1.396(19)

C(15B)-C(16B) 1.39(2)

C(19B)-C(14B) 1.43(2)

C(19B)-C(18B) 1.41(2)

C(19B)-C(20B) 1.42(2)

C(12B)-H(12B) 0.9500

C(12B)-C(11B) 1.42(3)

C(16B)-H(16B) 0.9500

C(23B)-H(23J) 0.9800

C(23B)-H(23K) 0.9800

C(23B)-H(23L) 0.9800

C(6B)-H(6BA) 0.9900

C(6B)-H(6BB) 0.9900

C(18B)-H(18B) 0.9500

C(20B)-H(20B) 0.9500

C(3B)-H(3BA) 0.9900

C(3B)-H(3BB) 0.9900

C(11B)-H(11B) 0.9500

C(4D)-H(4DA) 0.9900

C(4D)-H(4DB) 0.9900

Cl(2C)-Rh(1C)-Cl(1C) 178.96(18)

N(3C)-Rh(1C)-Cl(2C) 89.9(4)

N(3C)-Rh(1C)-Cl(1C) 89.4(4)

N(1C)-Rh(1C)-Cl(2C) 89.8(4)

N(1C)-Rh(1C)-Cl(1C) 91.1(4)

N(1C)-Rh(1C)-N(3C) 161.4(5)

N(1C)-Rh(1C)-N(4C) 94.0(5)

N(2C)-Rh(1C)-Cl(2C) 87.7(4)

N(2C)-Rh(1C)-Cl(1C) 93.0(4)

N(2C)-Rh(1C)-N(3C) 80.4(6)

N(2C)-Rh(1C)-N(1C) 81.0(6)

N(2C)-Rh(1C)-N(4C) 175.0(6)

N(4C)-Rh(1C)-Cl(2C) 91.9(4)

N(4C)-Rh(1C)-Cl(1C) 87.4(4)

N(4C)-Rh(1C)-N(3C) 104.6(5)

C(19C)-C(20C)-H(20C) 119.6

C(19C)-C(20C)-C(21C) 120.9(18)

C(21C)-C(20C)-H(20C) 119.6

N(1C)-C(1C)-C(4C) 121.2(15)

N(1C)-C(1C)-O(1C) 118.0(15)

O(1C)-C(1C)-C(4C) 120.7(14)

C(11C)-C(12C)-H(12C) 119.2

C(7C)-C(12C)-H(12C) 119.2

C(7C)-C(12C)-C(11C) 121.6(16)

C(1C)-C(4C)-H(4CA) 110.4

C(1C)-C(4C)-H(4CB) 110.4

H(4CA)-C(4C)-H(4CB) 108.6

N(2C)-C(4C)-C(1C) 106.6(13)

N(2C)-C(4C)-H(4CA) 110.4

N(2C)-C(4C)-H(4CB) 110.4

C(20C)-C(19C)-C(18C) 125.1(17)

C(20C)-C(19C)-C(14C) 117.8(17)

C(18C)-C(19C)-C(14C) 117.0(16)

C(9C)-C(10C)-H(10C) 120.0

C(9C)-C(10C)-C(11C) 120.1(18)

C(11C)-C(10C)-H(10C) 120.0

C(18C)-C(17C)-H(17C) 120.4

C(18C)-C(17C)-C(16C) 119.3(19)

C(16C)-C(17C)-H(17C) 120.4

C(14C)-C(15C)-H(15C) 119.0

C(16C)-C(15C)-H(15C) 119.0

C(16C)-C(15C)-C(14C) 121.9(17)

C(10C)-C(9C)-H(9C) 118.5

C(8C)-C(9C)-C(10C) 123.0(18)

C(8C)-C(9C)-H(9C) 118.5

H(23A)-C(23C)-H(23B) 109.5

H(23A)-C(23C)-H(23C) 109.5

H(23B)-C(23C)-H(23C) 109.5

C(22C)-C(23C)-H(23A) 109.5

C(22C)-C(23C)-H(23B) 109.5

C(22C)-C(23C)-H(23C) 109.5

C(12C)-C(11C)-H(11C) 121.7

C(10C)-C(11C)-C(12C) 116.6(17)

C(10C)-C(11C)-H(11C) 121.7

C(13C)-N(3C)-Rh(1C) 110.1(11)

C(13C)-N(3C)-C(14C) 119.9(14)

C(14C)-N(3C)-Rh(1C) 130.0(11)

C(1C)-N(1C)-Rh(1C) 113.2(11)

C(1C)-N(1C)-C(2C) 108.8(13)

C(2C)-N(1C)-Rh(1C) 138.0(10)

C(4C)-N(2C)-Rh(1C) 117.4(10)

C(5C)-N(2C)-Rh(1C) 116.8(12)

C(5C)-N(2C)-C(4C) 120.7(14)

N(4C)-C(22C)-C(23C) 179.0(19)

N(3C)-C(13C)-C(21C) 121.6(16)

N(3C)-C(13C)-C(5C) 117.5(15)

C(21C)-C(13C)-C(5C) 120.8(16)

C(1C)-O(1C)-C(3C) 105.8(12)

O(1C)-C(3C)-H(3CA) 110.8

O(1C)-C(3C)-H(3CB) 110.8

O(1C)-C(3C)-C(2C) 104.6(13)

H(3CA)-C(3C)-H(3CB) 108.9

C(2C)-C(3C)-H(3CA) 110.8

C(2C)-C(3C)-H(3CB) 110.8

C(19C)-C(18C)-H(18C) 118.0

C(17C)-C(18C)-C(19C) 124.0(18)

C(17C)-C(18C)-H(18C) 118.0

C(15C)-C(14C)-C(19C) 117.7(16)

N(3C)-C(14C)-C(19C) 120.1(15)

N(3C)-C(14C)-C(15C) 122.1(15)

C(20C)-C(21C)-C(13C) 119.1(17)

C(20C)-C(21C)-H(21C) 120.4

C(13C)-C(21C)-H(21C) 120.4

N(1C)-C(2C)-C(3C) 102.5(12)

N(1C)-C(2C)-H(2C) 109.9

N(1C)-C(2C)-C(6C) 110.9(12)

C(3C)-C(2C)-H(2C) 109.9

C(3C)-C(2C)-C(6C) 113.5(13)

C(6C)-C(2C)-H(2C) 109.9

C(22C)-N(4C)-Rh(1C) 174.1(14)

C(2C)-C(6C)-H(6CA) 109.4

C(2C)-C(6C)-H(6CB) 109.4

H(6CA)-C(6C)-H(6CB) 108.0

C(7C)-C(6C)-C(2C) 111.0(12)

C(7C)-C(6C)-H(6CA) 109.4

C(7C)-C(6C)-H(6CB) 109.4

O(2C)-C(5C)-N(2C) 125.3(17)

O(2C)-C(5C)-C(13C) 123.1(16)

N(2C)-C(5C)-C(13C) 111.5(15)

C(17C)-C(16C)-H(16C) 120.0

C(15C)-C(16C)-C(17C) 120.0(18)

C(15C)-C(16C)-H(16C) 120.0

C(9C)-C(8C)-H(8C) 120.5

C(9C)-C(8C)-C(7C) 119.1(18)

C(7C)-C(8C)-H(8C) 120.5

C(12C)-C(7C)-C(6C) 121.7(14)

C(12C)-C(7C)-C(8C) 119.6(15)

C(8C)-C(7C)-C(6C) 118.6(14)

Cl(2)-Rh(1)-Cl(1) 178.77(14)

N(1)-Rh(1)-Cl(2) 89.1(4)

N(1)-Rh(1)-Cl(1) 91.7(4)

N(1)-Rh(1)-N(4) 94.5(5)

N(1)-Rh(1)-N(3) 160.3(5)

N(4)-Rh(1)-Cl(2) 89.4(3)

N(4)-Rh(1)-Cl(1) 89.7(3)

N(4)-Rh(1)-N(3) 105.2(5)

N(3)-Rh(1)-Cl(2) 90.8(3)

N(3)-Rh(1)-Cl(1) 88.7(3)

N(2)-Rh(1)-Cl(2) 90.7(4)

N(2)-Rh(1)-Cl(1) 90.3(4)

N(2)-Rh(1)-N(1) 80.8(5)

N(2)-Rh(1)-N(4) 175.3(6)

N(2)-Rh(1)-N(3) 79.5(5)

C(15)-C(14)-C(19) 120.0(14)

N(3)-C(14)-C(15) 119.6(13)

N(3)-C(14)-C(19) 120.3(14)

C(1)-N(1)-Rh(1) 113.8(10)

C(1)-N(1)-C(2) 109.5(12)

C(2)-N(1)-Rh(1) 136.7(10)

H(4A)-C(4)-H(4B) 108.8

N(2)-C(4)-H(4A) 110.6

N(2)-C(4)-H(4B) 110.6

N(2)-C(4)-C(1) 105.6(13)

C(1)-C(4)-H(4A) 110.6

C(1)-C(4)-H(4B) 110.6

C(7)-C(8)-H(8) 120.9

C(9)-C(8)-H(8) 120.9

C(9)-C(8)-C(7) 118.2(18)

C(11)-C(12)-H(12) 121.0

C(7)-C(12)-H(12) 121.0

C(7)-C(12)-C(11) 118.1(19)

C(16)-C(17)-H(17) 120.5

C(18)-C(17)-H(17) 120.5

C(18)-C(17)-C(16) 119.1(16)

C(13)-C(21)-H(21) 120.2

C(20)-C(21)-H(21) 120.1

C(20)-C(21)-C(13) 119.7(15)

H(3A)-C(3)-H(3B) 108.7

C(2)-C(3)-H(3A) 110.6

C(2)-C(3)-H(3B) 110.6

O(1)-C(3)-H(3A) 110.6

O(1)-C(3)-H(3B) 110.6

O(1)-C(3)-C(2) 105.6(13)

C(21)-C(13)-C(5) 120.0(13)

N(3)-C(13)-C(21) 122.8(14)

N(3)-C(13)-C(5) 117.0(13)

C(14)-C(15)-H(15) 119.9

C(14)-C(15)-C(16) 120.1(14)

C(16)-C(15)-H(15) 119.9

C(11)-C(10)-H(10) 119.3

C(11)-C(10)-C(9) 121(2)

C(9)-C(10)-H(10) 119.3

C(17)-C(16)-H(16) 119.8

C(15)-C(16)-C(17) 120.4(15)

C(15)-C(16)-H(16) 119.8

C(22)-N(4)-Rh(1) 168.7(12)

N(2)-C(5)-C(13) 112.3(13)

O(2)-C(5)-C(13) 120.4(14)

O(2)-C(5)-N(2) 127.2(15)

N(4)-C(22)-C(23) 177.6(16)

C(14)-N(3)-Rh(1) 131.6(10)

C(13)-N(3)-Rh(1) 109.6(10)

C(13)-N(3)-C(14) 118.8(13)

C(22)-C(23)-H(23D) 109.5

C(22)-C(23)-H(23E) 109.5

C(22)-C(23)-H(23F) 109.5

H(23D)-C(23)-H(23E) 109.5

H(23D)-C(23)-H(23F) 109.5

H(23E)-C(23)-H(23F) 109.5

C(12)-C(11)-H(11) 119.0

C(10)-C(11)-C(12) 122(2)

C(10)-C(11)-H(11) 119.0

C(4)-N(2)-Rh(1) 116.8(10)

C(5)-N(2)-Rh(1) 119.7(11)

C(5)-N(2)-C(4) 123.0(14)

N(1)-C(1)-C(4) 122.5(14)

N(1)-C(1)-O(1) 117.8(14)

O(1)-C(1)-C(4) 119.5(14)

N(1)-C(2)-C(3) 100.5(12)

N(1)-C(2)-H(2) 110.7

N(1)-C(2)-C(6) 110.4(13)

C(3)-C(2)-H(2) 110.7

C(6)-C(2)-C(3) 113.6(13)

C(6)-C(2)-H(2) 110.7

C(21)-C(20)-H(20) 120.5

C(21)-C(20)-C(19) 119.1(14)

C(19)-C(20)-H(20) 120.5

C(8)-C(7)-C(6) 120.0(16)

C(12)-C(7)-C(8) 120.0(16)

C(12)-C(7)-C(6) 119.9(17)

C(17)-C(18)-H(18) 119.7

C(17)-C(18)-C(19) 120.6(15)

C(19)-C(18)-H(18) 119.7

C(8)-C(9)-H(9) 119.9

C(10)-C(9)-C(8) 120(2)

C(10)-C(9)-H(9) 119.9

C(2)-C(6)-H(6A) 109.1

C(2)-C(6)-H(6B) 109.1

C(7)-C(6)-C(2) 112.5(14)

C(7)-C(6)-H(6A) 109.1

C(7)-C(6)-H(6B) 109.1

H(6A)-C(6)-H(6B) 107.8

C(1)-O(1)-C(3) 105.0(12)

C(14)-C(19)-C(20) 119.0(15)

C(14)-C(19)-C(18) 119.8(14)

C(18)-C(19)-C(20) 121.0(14)

Cl(1D)-Rh(1D)-Cl(2D) 179.87(19)

N(2D)-Rh(1D)-Cl(2D) 91.7(4)

N(2D)-Rh(1D)-Cl(1D) 88.1(4)

N(2D)-Rh(1D)-N(3D) 80.4(6)

N(2D)-Rh(1D)-N(4D) 173.2(6)

N(2D)-Rh(1D)-N(1D) 81.7(6)

N(3D)-Rh(1D)-Cl(2D) 89.9(4)

N(3D)-Rh(1D)-Cl(1D) 90.2(4)

N(4D)-Rh(1D)-Cl(2D) 90.8(4)

N(4D)-Rh(1D)-Cl(1D) 89.3(4)

N(4D)-Rh(1D)-N(3D) 105.9(6)

N(1D)-Rh(1D)-Cl(2D) 91.4(4)

N(1D)-Rh(1D)-Cl(1D) 88.5(4)

N(1D)-Rh(1D)-N(3D) 162.1(6)

N(1D)-Rh(1D)-N(4D) 91.9(5)

C(10D)-C(11D)-H(11D) 118.4

C(10D)-C(11D)-C(12D) 123.2(17)

C(12D)-C(11D)-H(11D) 118.4

C(5D)-N(2D)-Rh(1D) 118.7(12)

C(5D)-N(2D)-C(4D) 120.5(15)

C(4D)-N(2D)-Rh(1D) 118.4(12)

C(8D)-C(9D)-H(9D) 121.1

C(10D)-C(9D)-H(9D) 121.1

C(10D)-C(9D)-C(8D) 117.8(16)

C(18D)-C(19D)-C(20D) 122.7(18)

C(18D)-C(19D)-C(14D) 118.8(18)

C(14D)-C(19D)-C(20D) 118.5(18)

C(3D)-C(2D)-H(2D) 110.1

C(3D)-C(2D)-C(6D) 112.4(15)

C(6D)-C(2D)-H(2D) 110.0

N(1D)-C(2D)-H(2D) 110.1

N(1D)-C(2D)-C(3D) 102.2(13)

N(1D)-C(2D)-C(6D) 111.9(14)

H(23G)-C(23D)-H(23H) 109.5

H(23G)-C(23D)-H(23I) 109.5

H(23H)-C(23D)-H(23I) 109.5

C(22D)-C(23D)-H(23G) 109.5

C(22D)-C(23D)-H(23H) 109.5

C(22D)-C(23D)-H(23I) 109.5

C(8D)-C(7D)-C(6D) 123.4(16)

C(8D)-C(7D)-C(12D) 118.9(15)

C(12D)-C(7D)-C(6D) 117.4(15)

C(2D)-C(3D)-H(3DA) 110.4

C(2D)-C(3D)-H(3DB) 110.4

H(3DA)-C(3D)-H(3DB) 108.6

O(1D)-C(3D)-C(2D) 106.5(14)

O(1D)-C(3D)-H(3DA) 110.4

O(1D)-C(3D)-H(3DB) 110.4

C(14D)-C(15D)-H(15D) 120.2

C(16D)-C(15D)-H(15D) 120.2

C(16D)-C(15D)-C(14D) 119.6(17)

C(14D)-N(3D)-Rh(1D) 131.9(11)

C(13D)-N(3D)-Rh(1D) 110.3(12)

C(13D)-N(3D)-C(14D) 117.8(14)

C(19D)-C(20D)-H(20D) 120.5

C(21D)-C(20D)-C(19D) 119.1(17)

C(21D)-C(20D)-H(20D) 120.5

C(19D)-C(18D)-H(18D) 119.4

C(17D)-C(18D)-C(19D) 121.2(19)

C(17D)-C(18D)-H(18D) 119.4

C(18D)-C(17D)-H(17D) 120.1

C(18D)-C(17D)-C(16D) 120(2)

C(16D)-C(17D)-H(17D) 120.1

C(9D)-C(8D)-H(8D) 119.1

C(7D)-C(8D)-C(9D) 121.7(16)

C(7D)-C(8D)-H(8D) 119.1

N(4D)-C(22D)-C(23D) 179.1(19)

C(11D)-C(10D)-C(9D) 119.2(16)

C(11D)-C(10D)-H(10D) 120.4

C(9D)-C(10D)-H(10D) 120.4

C(1D)-O(1D)-C(3D) 105.6(14)

C(15D)-C(14D)-C(19D) 118.9(17)

N(3D)-C(14D)-C(19D) 121.6(16)

N(3D)-C(14D)-C(15D) 119.5(15)

C(2D)-C(6D)-H(6DA) 108.6

C(2D)-C(6D)-H(6DB) 108.6

C(7D)-C(6D)-C(2D) 114.6(14)

C(7D)-C(6D)-H(6DA) 108.6

C(7D)-C(6D)-H(6DB) 108.6

H(6DA)-C(6D)-H(6DB) 107.6

N(3D)-C(13D)-C(21D) 122.6(18)

N(3D)-C(13D)-C(5D) 117.3(15)

C(21D)-C(13D)-C(5D) 120.1(16)

O(1D)-C(1D)-C(4D) 119.9(16)

N(1D)-C(1D)-O(1D) 115.7(17)

N(1D)-C(1D)-C(4D) 124.4(18)

C(22D)-N(4D)-Rh(1D) 168.8(13)

C(15D)-C(16D)-C(17D) 121.7(19)

C(15D)-C(16D)-H(16D) 119.1

C(17D)-C(16D)-H(16D) 119.1

C(20D)-C(21D)-C(13D) 120.0(17)

C(20D)-C(21D)-H(21D) 120.0

C(13D)-C(21D)-H(21D) 120.0

N(2D)-C(5D)-C(13D) 111.0(15)

O(2D)-C(5D)-N(2D) 126.7(18)

O(2D)-C(5D)-C(13D) 122.2(17)

C(2D)-N(1D)-Rh(1D) 138.6(11)

C(1D)-N(1D)-Rh(1D) 111.1(13)

C(1D)-N(1D)-C(2D) 110.0(15)

C(11D)-C(12D)-C(7D) 118.9(16)

C(11D)-C(12D)-H(12D) 120.6

C(7D)-C(12D)-H(12D) 120.6

N(1B)-Rh(1B)-Cl(1B) 89.7(3)

N(1B)-Rh(1B)-N(3B) 160.7(5)

N(1B)-Rh(1B)-N(4B) 92.5(5)

N(1B)-Rh(1B)-Cl(2B) 89.3(3)

Cl(1B)-Rh(1B)-Cl(2B) 178.44(14)

N(2B)-Rh(1B)-N(1B) 81.0(5)

N(2B)-Rh(1B)-Cl(1B) 92.2(3)

N(2B)-Rh(1B)-N(3B) 79.7(5)

N(2B)-Rh(1B)-N(4B) 173.5(5)

N(2B)-Rh(1B)-Cl(2B) 88.9(3)

N(3B)-Rh(1B)-Cl(1B) 90.1(3)

N(3B)-Rh(1B)-Cl(2B) 91.2(3)

N(4B)-Rh(1B)-Cl(1B) 88.5(3)

N(4B)-Rh(1B)-N(3B) 106.7(5)

N(4B)-Rh(1B)-Cl(2B) 90.3(3)

C(2B)-N(1B)-Rh(1B) 137.2(10)

C(1B)-N(1B)-Rh(1B) 112.7(9)

C(1B)-N(1B)-C(2B) 110.1(12)

C(8B)-C(9B)-H(9B) 122.0

C(10B)-C(9B)-H(9B) 122.0

C(10B)-C(9B)-C(8B) 116(2)

H(4BA)-C(4B)-H(4BB) 108.7

N(2B)-C(4B)-H(4BA) 110.5

N(2B)-C(4B)-H(4BB) 110.6

N(2B)-C(4B)-C(1B) 105.9(13)

C(1B)-C(4B)-H(4BA) 110.5

C(1B)-C(4B)-H(4BB) 110.6

C(8B)-C(7B)-C(12B) 119.8(17)

C(8B)-C(7B)-C(6B) 119.2(16)

C(12B)-C(7B)-C(6B) 121.0(17)

C(13B)-C(21B)-H(21B) 119.8

C(20B)-C(21B)-H(21B) 119.8

C(20B)-C(21B)-C(13B) 120.4(14)

N(4B)-C(22B)-C(23B) 177.9(16)

C(9B)-C(8B)-H(8B) 118.3

C(7B)-C(8B)-C(9B) 123.5(19)

C(7B)-C(8B)-H(8B) 118.3

C(4B)-N(2B)-Rh(1B) 117.2(10)

C(5B)-N(2B)-Rh(1B) 120.0(10)

C(5B)-N(2B)-C(4B) 120.9(13)

C(13B)-N(3B)-Rh(1B) 110.0(10)

C(13B)-N(3B)-C(14B) 120.0(12)

C(14B)-N(3B)-Rh(1B) 129.8(9)

C(9B)-C(10B)-H(10B) 117.3

C(9B)-C(10B)-C(11B) 125(2)

C(11B)-C(10B)-H(10B) 117.4

C(16B)-C(17B)-H(17B) 120.3

C(18B)-C(17B)-H(17B) 120.3

C(18B)-C(17B)-C(16B) 119.4(16)

N(1B)-C(2B)-H(2B) 111.1

N(1B)-C(2B)-C(6B) 109.4(12)

N(1B)-C(2B)-C(3B) 100.9(12)

C(6B)-C(2B)-H(2B) 111.1

C(6B)-C(2B)-C(3B) 112.9(14)

C(3B)-C(2B)-H(2B) 111.1

N(1B)-C(1B)-C(4B) 122.7(13)

N(1B)-C(1B)-O(1B) 116.3(13)

O(1B)-C(1B)-C(4B) 121.0(13)

C(21B)-C(13B)-C(5B) 119.2(13)

N(3B)-C(13B)-C(21B) 122.0(14)

N(3B)-C(13B)-C(5B) 118.7(13)

C(1B)-O(1B)-C(3B) 106.9(12)

N(2B)-C(5B)-C(13B) 110.1(13)

O(2B)-C(5B)-N(2B) 127.1(15)

O(2B)-C(5B)-C(13B) 122.7(14)

C(14B)-C(15B)-H(15B) 119.6

C(16B)-C(15B)-H(15B) 119.6

C(16B)-C(15B)-C(14B) 120.8(15)

C(22B)-N(4B)-Rh(1B) 175.6(13)

C(18B)-C(19B)-C(14B) 119.3(13)

C(18B)-C(19B)-C(20B) 122.1(14)

C(20B)-C(19B)-C(14B) 118.6(13)

C(7B)-C(12B)-H(12B) 120.0

C(7B)-C(12B)-C(11B) 120(2)

C(11B)-C(12B)-H(12B) 120.0

N(3B)-C(14B)-C(15B) 121.6(13)

N(3B)-C(14B)-C(19B) 120.3(12)

C(15B)-C(14B)-C(19B) 118.1(14)

C(17B)-C(16B)-H(16B) 119.8

C(15B)-C(16B)-C(17B) 120.4(15)

C(15B)-C(16B)-H(16B) 119.8

C(22B)-C(23B)-H(23J) 109.5

C(22B)-C(23B)-H(23K) 109.5

C(22B)-C(23B)-H(23L) 109.5

H(23J)-C(23B)-H(23K) 109.5

H(23J)-C(23B)-H(23L) 109.5

H(23K)-C(23B)-H(23L) 109.5

C(7B)-C(6B)-C(2B) 111.4(13)

C(7B)-C(6B)-H(6BA) 109.4

C(7B)-C(6B)-H(6BB) 109.4

C(2B)-C(6B)-H(6BA) 109.4

C(2B)-C(6B)-H(6BB) 109.4

H(6BA)-C(6B)-H(6BB) 108.0

C(17B)-C(18B)-C(19B) 121.9(15)

C(17B)-C(18B)-H(18B) 119.1

C(19B)-C(18B)-H(18B) 119.1

C(21B)-C(20B)-C(19B) 118.7(14)

C(21B)-C(20B)-H(20B) 120.6

C(19B)-C(20B)-H(20B) 120.6

C(2B)-C(3B)-H(3BA) 110.9

C(2B)-C(3B)-H(3BB) 110.9

O(1B)-C(3B)-C(2B) 104.1(12)

O(1B)-C(3B)-H(3BA) 110.9

O(1B)-C(3B)-H(3BB) 110.9

H(3BA)-C(3B)-H(3BB) 108.9

C(10B)-C(11B)-H(11B) 122.4

C(12B)-C(11B)-C(10B) 115(2)

C(12B)-C(11B)-H(11B) 122.4

N(2D)-C(4D)-C(1D) 104.2(16)

N(2D)-C(4D)-H(4DA) 110.9

N(2D)-C(4D)-H(4DB) 110.9

C(1D)-C(4D)-H(4DA) 110.9

C(1D)-C(4D)-H(4DB) 110.9

H(4DA)-C(4D)-H(4DB) 10

**Table S2.4.** Anisotropic displacement parameters (Å2x 103) . The anisotropic

displacement factor exponent takes the form: -22[ h2 a\*2U11 + ... + 2 h k a\* b\* U12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

U11 U22 U33 U23 U13 U12

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Rh(1C) 16(1) 36(1) 26(1) 2(1) 10(1) 5(1)

Cl(2C) 24(2) 52(2) 33(2) -4(2) 6(2) -4(2)

Cl(1C) 32(2) 41(2) 33(2) 3(2) 2(2) -2(2)

C(20C) 31(7) 48(5) 40(6) 5(4) 11(5) -3(4)

C(1C) 18(5) 33(5) 33(5) -3(4) 6(4) 0(4)

C(12C) 28(4) 32(4) 30(4) -2(3) 4(3) -3(3)

C(4C) 24(6) 32(4) 41(6) -3(4) 14(5) 3(4)

C(19C) 16(5) 45(4) 30(5) 4(3) 1(4) -7(4)

C(10C) 37(7) 46(6) 32(6) -3(5) 7(6) -1(5)

C(17C) 38(8) 48(6) 49(7) 11(5) 14(6) -2(5)

C(15C) 22(6) 39(5) 33(6) 4(4) 7(5) -4(4)

C(9C) 38(7) 44(6) 34(6) -5(5) 9(6) 1(5)

C(23C) 38(7) 53(11) 46(10) 22(8) 24(7) 24(8)

C(11C) 44(8) 45(6) 40(6) -5(5) 17(7) -8(5)

N(3C) 25(4) 36(3) 28(4) 0(3) 2(3) -3(3)

O(2C) 29(5) 39(5) 56(6) -5(4) 23(5) -4(4)

N(1C) 18(4) 35(5) 23(5) -2(4) 2(4) 2(4)

N(2C) 24(3) 27(2) 44(3) -4(2) 14(2) 1(2)

C(22C) 26(5) 33(8) 37(8) 11(6) 16(6) 6(5)

C(13C) 22(5) 36(4) 31(4) -6(3) 2(4) -6(3)

O(1C) 23(5) 39(5) 45(5) 4(4) 16(4) 9(4)

C(3C) 21(6) 39(6) 41(6) 6(5) 13(5) 9(5)

C(18C) 24(7) 47(5) 42(7) 8(4) 6(5) -5(4)

C(14C) 13(5) 39(4) 30(5) 1(3) 1(4) -6(3)

C(21C) 32(4) 43(4) 37(4) 0(3) 7(3) -3(3)

C(2C) 17(5) 33(6) 23(6) -2(4) 4(4) 3(4)

N(4C) 23(5) 30(6) 42(7) 6(5) 16(5) 2(4)

C(6C) 23(6) 26(7) 29(6) -3(5) 4(5) -4(5)

C(5C) 25(4) 37(4) 36(4) -3(3) 9(3) -2(3)

C(16C) 23(7) 40(5) 42(7) 6(4) 6(5) -3(4)

C(8C) 46(8) 35(5) 41(6) -7(4) 16(6) -2(5)

C(7C) 16(5) 31(4) 25(5) 1(3) -2(4) 3(4)

Rh(1) 18(1) 7(1) 32(1) -1(1) 8(1) 1(1)

Cl(2) 17(1) 17(1) 31(2) -2(1) 3(1) -1(1)

Cl(1) 25(1) 21(1) 32(2) -2(1) 2(1) 4(1)

C(14) 23(5) 17(4) 29(4) -1(3) 7(4) 2(3)

N(1) 21(4) 23(4) 31(4) 0(3) 7(3) 4(3)

C(4) 24(6) 21(7) 48(7) -1(6) 15(6) 0(5)

C(8) 46(6) 26(6) 63(10) -6(6) -1(5) 17(4)

C(12) 48(6) 27(6) 39(8) 14(5) 11(5) 16(4)

C(17) 31(7) 28(5) 39(6) -2(4) 14(6) 1(4)

C(21) 28(6) 16(4) 39(6) -7(4) 11(5) 3(4)

C(3) 29(7) 27(5) 42(6) -3(4) 12(5) 3(4)

C(13) 23(6) 15(4) 31(6) -4(3) 6(5) 3(3)

C(15) 27(6) 17(4) 36(6) -1(3) 13(5) 3(3)

C(10) 70(7) 33(7) 69(11) 1(7) 13(6) 22(5)

C(16) 32(7) 23(5) 37(6) 1(4) 15(6) -1(4)

N(4) 17(2) 18(1) 21(2) -1(1) 3(1) 0(1)

C(5) 18(5) 19(4) 28(6) 1(4) 4(5) -1(3)

C(22) 18(3) 19(2) 21(3) -1(2) 3(2) 1(2)

N(3) 17(3) 17(2) 21(3) -2(2) 2(2) 2(2)

C(23) 28(8) 17(4) 29(8) 0(3) 6(6) -1(3)

C(11) 68(7) 36(6) 60(10) 3(6) 17(6) 20(5)

N(2) 24(3) 27(2) 44(3) -4(2) 14(2) 1(2)

C(1) 18(6) 25(4) 34(6) 1(4) 5(5) 2(3)

C(2) 22(6) 25(4) 34(6) -3(4) 6(5) 6(4)

C(20) 25(6) 21(4) 37(6) -5(3) 10(5) 4(4)

C(7) 46(6) 21(5) 27(7) 8(4) 7(5) 12(4)

C(18) 22(6) 27(5) 30(5) -3(4) 5(5) 1(4)

C(9) 71(7) 27(6) 72(11) -6(7) 8(6) 18(5)

O(2) 38(7) 17(4) 60(8) 3(4) 23(6) 0(3)

C(6) 38(8) 26(5) 41(8) 0(5) 7(7) 9(5)

O(1) 31(5) 28(4) 44(6) -2(4) 15(5) 1(4)

C(19) 21(5) 22(4) 32(5) -4(3) 6(5) 3(3)

Rh(1D) 19(1) 35(1) 34(1) -6(1) 14(1) -1(1)

Cl(2D) 29(2) 36(2) 42(2) -6(2) 11(2) -1(2)

Cl(1D) 26(2) 63(3) 36(2) -18(2) 17(2) -8(2)

C(11D) 38(6) 28(6) 35(6) 3(5) 8(5) 0(5)

N(2D) 24(3) 27(2) 44(3) -4(2) 14(2) 1(2)

C(9D) 29(5) 23(6) 34(6) 7(4) 5(4) 5(4)

C(19D) 31(6) 52(5) 39(6) 2(4) 15(6) -10(4)

C(2D) 29(5) 29(6) 37(7) -5(5) 5(5) -1(4)

C(23D) 12(7) 36(10) 47(10) -11(7) 8(7) 1(6)

C(7D) 31(5) 19(5) 35(5) 4(4) 5(4) 3(4)

C(3D) 27(6) 30(5) 46(8) -3(5) 2(5) -3(4)

C(15D) 32(7) 44(5) 40(7) 6(5) 20(6) -1(5)

N(3D) 28(5) 43(5) 35(6) -1(4) 16(5) -4(4)

C(20D) 19(6) 53(5) 39(6) -9(4) 7(5) -17(4)

C(18D) 45(8) 51(5) 48(8) 6(5) 16(7) -8(5)

C(17D) 43(8) 50(6) 48(8) 8(5) 15(7) -8(5)

C(8D) 31(5) 22(5) 35(6) 1(4) 8(4) 1(4)

O(2D) 31(5) 50(6) 67(7) -16(5) 26(5) -4(4)

C(22D) 27(7) 25(8) 26(7) -1(7) 8(6) -2(7)

C(10D) 30(6) 22(6) 32(6) 7(4) 6(4) 6(4)

O(1D) 47(6) 36(5) 88(9) 11(5) 30(6) 11(4)

C(14D) 22(6) 43(4) 38(6) 0(4) 12(5) -6(4)

C(6D) 43(7) 32(8) 39(8) -8(6) 13(6) -11(6)

C(13D) 22(5) 42(4) 40(6) -11(4) 13(5) -9(4)

C(1D) 40(6) 32(5) 65(9) 0(5) 21(7) 6(4)

N(4D) 18(6) 32(7) 27(6) -3(6) 8(5) 0(6)

C(16D) 39(8) 44(6) 44(8) 7(5) 14(7) -2(5)

C(21D) 24(6) 54(6) 39(6) -9(5) 13(5) -14(5)

C(5D) 19(5) 40(5) 43(5) -11(4) 13(4) -9(4)

N(1D) 32(5) 29(5) 40(7) -5(4) 10(5) 2(4)

C(12D) 44(6) 26(6) 40(6) -3(5) 14(5) -7(5)

Rh(1B) 19(1) 9(1) 27(1) -1(1) 9(1) 2(1)

N(1B) 18(3) 21(3) 20(3) -1(2) 5(2) 3(2)

C(9B) 19(7) 39(5) 73(7) -10(4) -9(6) 1(4)

C(4B) 44(7) 21(4) 48(7) 2(4) 31(7) 4(4)

C(7B) 35(8) 33(4) 39(5) -8(3) 2(4) 4(5)

C(21B) 27(6) 14(4) 43(6) -6(4) 17(6) 2(4)

C(22B) 18(3) 19(2) 21(3) -1(2) 3(2) 1(2)

C(8B) 39(4) 39(4) 43(4) -1(2) 3(2) 2(2)

Cl(1B) 24(1) 19(1) 29(1) -2(1) 8(1) 1(1)

N(2B) 17(2) 18(1) 21(2) -1(1) 3(1) 0(1)

N(3B) 22(5) 13(4) 32(5) -4(3) 11(4) 1(3)

C(10B) 58(13) 52(7) 71(6) -12(5) -8(6) 20(7)

C(17B) 29(6) 25(5) 35(6) -3(4) 12(5) -1(4)

C(2B) 17(5) 23(4) 28(6) -3(3) 7(5) 4(3)

C(1B) 20(5) 22(3) 26(5) 0(3) 8(4) 2(3)

C(13B) 19(5) 13(4) 34(5) -2(3) 9(5) 2(3)

O(2B) 41(6) 13(3) 49(6) 2(3) 23(5) 3(3)

O(1B) 38(5) 26(4) 53(6) -3(4) 31(5) 2(3)

C(5B) 32(6) 14(3) 45(7) 0(3) 19(6) 1(3)

C(15B) 19(6) 17(4) 30(6) -1(3) 5(5) 1(3)

N(4B) 17(2) 18(1) 21(2) -1(1) 3(1) 0(1)

C(19B) 11(5) 20(4) 29(5) -5(3) 2(4) 0(3)

C(12B) 56(11) 50(6) 40(5) -9(4) 3(5) 22(7)

Cl(2B) 24(1) 19(1) 29(1) -2(1) 8(1) 1(1)

C(14B) 17(5) 17(4) 29(5) -2(3) 7(4) 1(3)

C(16B) 29(6) 22(5) 35(6) -3(4) 12(5) -2(4)

C(23B) 31(4) 25(3) 31(4) 1(2) 4(2) -1(2)

C(6B) 22(7) 31(5) 33(7) -3(4) 7(6) -2(5)

C(18B) 25(6) 24(4) 38(6) -4(4) 13(5) -2(4)

C(20B) 20(6) 19(4) 34(6) -6(3) 9(5) 1(3)

C(3B) 34(6) 26(5) 57(9) -5(4) 27(7) 1(4)

C(11B) 54(11) 53(7) 64(6) -19(5) -2(6) 23(7)

C(4D) 49(7) 41(5) 80(10) 9(6) 33(8) 10(5)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**Table S2.5.** Hydrogen coordinates ( x 104) and isotropic displacement parameters (Å2x 10 3) for **82**.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

x y z U(eq)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

H(20C) 3688 5538 2602 47

H(12C) 6106 11532 580 36

H(4CA) 3990 10686 1500 38

H(4CB) 3562 10225 1158 38

H(10C) 6784 9913 -303 46

H(17C) 4577 2524 2069 53

H(15C) 4795 5350 1392 37

H(9C) 6372 8213 -156 46

H(23A) 5918 5994 622 66

H(23B) 6051 5301 1026 66

H(23C) 6297 6573 970 66

H(11C) 6659 11658 58 51

H(3CA) 5017 11426 525 39

H(3CB) 4589 10726 235 39

H(18C) 4102 3623 2448 45

H(21C) 3434 7414 2386 44

H(2C) 4943 9046 448 29

H(6CA) 5609 10447 1003 31

H(6CB) 5660 9046 996 31

H(16C) 4932 3391 1529 42

H(8C) 5804 8133 315 48

H(4A) 2568 9896 1548 36

H(4B) 2133 10226 1192 36

H(8) 2016 4176 928 55

H(12) 3592 4717 1209 45

H(17) 50 6715 3095 38

H(21) 943 11267 2246 33

H(3A) 3012 6926 761 38

H(3B) 2475 7255 498 38

H(15) 1007 6314 2227 31

H(10) 3076 1722 664 68

H(16) 484 5489 2673 36

H(23D) 1118 3352 1599 37

H(23E) 1374 3480 2042 37

H(23F) 1741 3325 1697 37

H(11) 3744 2852 933 65

H(2) 2045 6128 902 32

H(20) 423 10510 2694 33

H(18) 119 8751 3040 31

H(9) 2215 2320 655 68

H(6A) 3016 6106 1411 41

H(6B) 2498 5540 1553 41

H(11D) 2185 6236 5746 40

H(9D) 1633 3753 4974 34

H(2D) 2765 5025 4178 37

H(23G) 1819 8592 3959 47

H(23H) 2138 8917 4372 47

H(23I) 1921 7612 4293 47

H(3DA) 3397 3705 4708 42

H(3DB) 3057 3232 4319 42

H(15D) 3283 9535 3699 45

H(20D) 4554 9639 2572 44

H(18D) 4061 11488 2711 57

H(17D) 3485 12447 3061 55

H(8D) 2338 4163 4602 35

H(10D) 1600 4767 5579 33

H(6DA) 3422 5693 4877 45

H(6DB) 3058 6629 4632 45

H(16D) 3087 11450 3549 50

H(21D) 4839 7800 2799 46

H(12D) 2867 6649 5384 43

H(9B) 577 8816 3785 54

H(4BA) 1140 898 3910 43

H(4BB) 667 802 3565 43

H(21B) 2193 -713 2831 33

H(8B) 814 6878 3637 48

H(10B) 519 9266 4420 74

H(17B) 3173 3488 1879 35

H(2B) 605 4988 3564 27

H(15B) 2232 4234 2730 26

H(12B) 977 5948 4775 59

H(16B) 2739 4866 2245 34

H(23J) 1901 7181 2839 43

H(23K) 2153 7280 3285 43

H(23L) 1536 7459 3177 43

H(6BA) 1233 4613 4309 34

H(6BB) 1477 5221 3949 34

H(18B) 3059 1520 1978 34

H(20B) 2718 -131 2358 29

H(3BA) 280 4205 4255 45

H(3BB) -54 4033 3835 45

H(11B) 680 7865 4947 69

H(4DA) 4648 4876 3982 66

H(4DB) 4312 4313 3604 66

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_



**Table S3.2.** Atomic coordinates (x 104) and equivalent isotropic displacement parameters (Å2x103) for **102**. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ x y z U(eq)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

O(3) -5207(2) -6800(1) -7150(1) 23(1)

O(4) -6471(2) -5626(1) -3435(1) 21(1)

O(1) -7188(2) -9003(1) -8034(1) 34(1)

O(2) -8117(1) -6578(1) -6808(1) 20(1)

C(15) -6394(2) -5172(1) -4882(1) 18(1)

C(2) -7922(2) -9478(1) -9435(1) 17(1)

C(1) -7892(2) -9899(1) -8530(1) 20(1)

C(5) -8485(2) -9996(1) -10181(1) 21(1)

C(4) -6601(2) -8109(1) -8570(1) 17(1)

C(6) -8261(2) -9447(2) -10954(1) 23(1)

C(14) -6914(2) -5924(1) -4251(1) 16(1)

C(10) -6754(2) -6797(1) -7358(1) 17(1)

C(12) -8153(2) -7114(1) -5333(1) 18(1)

C(16) -6764(2) -5388(1) -5734(1) 19(1)

C(9) -7421(2) -7035(1) -8246(1) 19(1)

C(17) -6867(3) -6403(2) -2774(1) 25(1)

C(3) -7161(2) -8432(1) -9460(1) 16(1)

C(11) -7638(2) -6361(1) -5949(1) 17(1)

C(8) -6942(2) -7872(1) -10228(1) 18(1)

C(7) -7496(2) -8394(1) -10976(1) 22(1)

C(13) -7802(2) -6895(1) -4473(1) 18(1)

**Table S3.3.** Bond lengths [Å] and angles [°] for **102**.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

O(3)-C(10) 1.2009(19)

O(4)-C(14) 1.3669(19)

O(4)-C(17) 1.4269(19)

O(1)-C(1) 1.431(2)

O(1)-C(4) 1.4350(19)

O(2)-C(10) 1.3594(19)

O(2)-C(11) 1.4145(18)

C(15)-C(14) 1.397(2)

C(15)-C(16) 1.385(2)

C(2)-C(1) 1.505(2)

C(2)-C(5) 1.389(2)

C(2)-C(3) 1.386(2)

C(5)-C(6) 1.389(2)

C(4)-C(9) 1.521(2)

C(4)-C(3) 1.505(2)

C(6)-C(7) 1.395(2)

C(14)-C(13) 1.392(2)

C(10)-C(9) 1.503(2)

C(12)-C(11) 1.378(2)

C(12)-C(13) 1.396(2)

C(16)-C(11) 1.386(2)

C(3)-C(8) 1.388(2)

C(8)-C(7) 1.392(2)

C(14)-O(4)-C(17) 116.84(12)

C(1)-O(1)-C(4) 111.46(12)

C(10)-O(2)-C(11) 116.60(12)

C(16)-C(15)-C(14) 120.06(14)

C(5)-C(2)-C(1) 129.98(14)

C(3)-C(2)-C(1) 109.12(13)

C(3)-C(2)-C(5) 120.80(14)

O(1)-C(1)-C(2) 105.04(12)

C(2)-C(5)-C(6) 118.59(15)

O(1)-C(4)-C(9) 108.93(13)

O(1)-C(4)-C(3) 105.01(12)

C(3)-C(4)-C(9) 114.65(12)

C(5)-C(6)-C(7) 120.43(15)

O(4)-C(14)-C(15) 114.86(13)

O(4)-C(14)-C(13) 124.79(14)

C(13)-C(14)-C(15) 120.35(14)

O(3)-C(10)-O(2) 123.41(14)

O(3)-C(10)-C(9) 124.65(14)

O(2)-C(10)-C(9) 111.94(12)

C(11)-C(12)-C(13) 119.72(14)

C(15)-C(16)-C(11) 119.13(14)

C(10)-C(9)-C(4) 109.70(12)

C(2)-C(3)-C(4) 108.99(13)

C(2)-C(3)-C(8) 121.11(14)

C(8)-C(3)-C(4) 129.84(14)

C(12)-C(11)-O(2) 118.05(13)

C(12)-C(11)-C(16) 121.47(14)

C(16)-C(11)-O(2) 120.38(14)

C(3)-C(8)-C(7) 118.12(14)

C(8)-C(7)-C(6) 120.95(15)

C(14)-C(13)-C(12) 119.26(14)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**Table S3.4.** Anisotropic displacement parameters (Å2x 103) for **92**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -22[ h2 a\*2U11 + ... + 2 h k a\* b\* U12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

U11 U22 U33 U23 U13 U12

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

O(3) 17(1) 30(1) 23(1) -8(1) -3(1) 3(1)

O(4) 26(1) 21(1) 17(1) -1(1) -1(1) -4(1)

O(1) 66(1) 18(1) 17(1) 2(1) -4(1) -10(1)

O(2) 16(1) 25(1) 19(1) -5(1) -1(1) 1(1)

C(15) 16(1) 15(1) 22(1) -3(1) 2(1) -2(1)

C(2) 13(1) 16(1) 21(1) 1(1) 1(1) 3(1)

C(1) 22(1) 16(1) 22(1) 2(1) 2(1) -1(1)

C(5) 16(1) 19(1) 27(1) -5(1) -2(1) -1(1)

C(4) 19(1) 15(1) 16(1) 0(1) -2(1) 1(1)

C(6) 20(1) 30(1) 19(1) -7(1) -4(1) 4(1)

C(14) 14(1) 16(1) 19(1) 0(1) 1(1) 3(1)

C(10) 18(1) 13(1) 21(1) -2(1) -1(1) 2(1)

C(12) 13(1) 15(1) 26(1) -3(1) 0(1) 1(1)

C(16) 18(1) 18(1) 20(1) 2(1) 4(1) -1(1)

C(9) 18(1) 18(1) 20(1) -2(1) -2(1) 3(1)

C(17) 31(1) 26(1) 18(1) 2(1) -1(1) -5(1)

C(3) 14(1) 15(1) 18(1) -2(1) 0(1) 4(1)

C(11) 14(1) 21(1) 18(1) -4(1) 0(1) 3(1)

C(8) 16(1) 18(1) 21(1) 2(1) 1(1) 2(1)

C(7) 21(1) 28(1) 17(1) 3(1) 1(1) 6(1)

C(13) 15(1) 15(1) 22(1) 3(1) 1(1) 1(1)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**Table S3.5.** Hydrogen coordinates ( x 104) and isotropic displacement parameters (Å2x103) for **92**.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

x y z U(eq)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

H(9A) -8722(15) -7087(15) -8241(12) 19(3)

H(9B) -7020(30) -6425(12) -8608(10) 19(3)

H(4) -5277(16) -8042(16) -8524(12) 19(3)

H(5) -8990(30) -10733(9) -10178(13) 22(2)

H(8) -6390(20) -7150(9) -10250(13) 22(2)

H(15) -5760(20) -4511(11) -4713(12) 22(2)

H(12) -8780(20) -7775(11) -5503(12) 22(2)

H(6) -8640(20) -9786(15) -11482(8) 22(2)

H(16) -6350(30) -4873(13) -6162(10) 22(2)

H(7) -7350(30) -8031(14) -11521(7) 22(2)

H(13) -8190(30) -7423(13) -4048(10) 22(2)

H(1A) -9100(30) -10087(18) -8334(13) 25(4)

H(1B) -7130(30) -10557(16) -8450(13) 25(4)

H(17A) -6270(30) -7115(13) -2881(13) 31(3)

H(17B) -6370(30) -6066(17) -2257(11) 31(3)

H(17C) -8163(18) -6493(18) -2712(14) 31(3)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**Table S3.6.** Torsion angles [°] for **92**. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

O(3)-C(10)-C(9)-C(4) 50.5(2)

O(4)-C(14)-C(13)-C(12) -178.96(14)

O(1)-C(4)-C(9)-C(10) 63.12(16)

O(1)-C(4)-C(3)-C(2) -3.39(17)

O(1)-C(4)-C(3)-C(8) 179.66(15)

O(2)-C(10)-C(9)-C(4) -129.24(13)

C(15)-C(14)-C(13)-C(12) 0.6(2)

C(15)-C(16)-C(11)-O(2) 176.70(14)

C(15)-C(16)-C(11)-C(12) 0.3(2)

C(2)-C(5)-C(6)-C(7) -0.4(2)

C(2)-C(3)-C(8)-C(7) -0.5(2)

C(1)-O(1)-C(4)-C(9) 129.34(14)

C(1)-O(1)-C(4)-C(3) 6.08(18)

C(1)-C(2)-C(5)-C(6) -175.73(16)

C(1)-C(2)-C(3)-C(4) -0.35(16)

C(1)-C(2)-C(3)-C(8) 176.92(14)

C(5)-C(2)-C(1)-O(1) -179.62(16)

C(5)-C(2)-C(3)-C(4) -177.16(14)

C(5)-C(2)-C(3)-C(8) 0.1(2)

C(5)-C(6)-C(7)-C(8) 0.0(3)

C(4)-O(1)-C(1)-C(2) -6.28(18)

C(4)-C(3)-C(8)-C(7) 176.14(15)

C(14)-C(15)-C(16)-C(11) -0.6(2)

C(10)-O(2)-C(11)-C(12) -113.30(16)

C(10)-O(2)-C(11)-C(16) 70.18(18)

C(16)-C(15)-C(14)-O(4) 179.71(14)

C(16)-C(15)-C(14)-C(13) 0.1(2)

C(9)-C(4)-C(3)-C(2) -122.90(14)

C(9)-C(4)-C(3)-C(8) 60.1(2)

C(17)-O(4)-C(14)-C(15) -175.90(14)

C(17)-O(4)-C(14)-C(13) 3.7(2)

C(3)-C(2)-C(1)-O(1) 3.96(17)

C(3)-C(2)-C(5)-C(6) 0.3(2)

C(3)-C(4)-C(9)-C(10) -179.58(13)

C(3)-C(8)-C(7)-C(6) 0.4(2)

C(11)-O(2)-C(10)-O(3) -0.8(2)

C(11)-O(2)-C(10)-C(9) 178.89(12)

C(11)-C(12)-C(13)-C(14) -0.8(2)

C(13)-C(12)-C(11)-O(2) -176.07(13)

C(13)-C(12)-C(11)-C(16) 0.4(2)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_