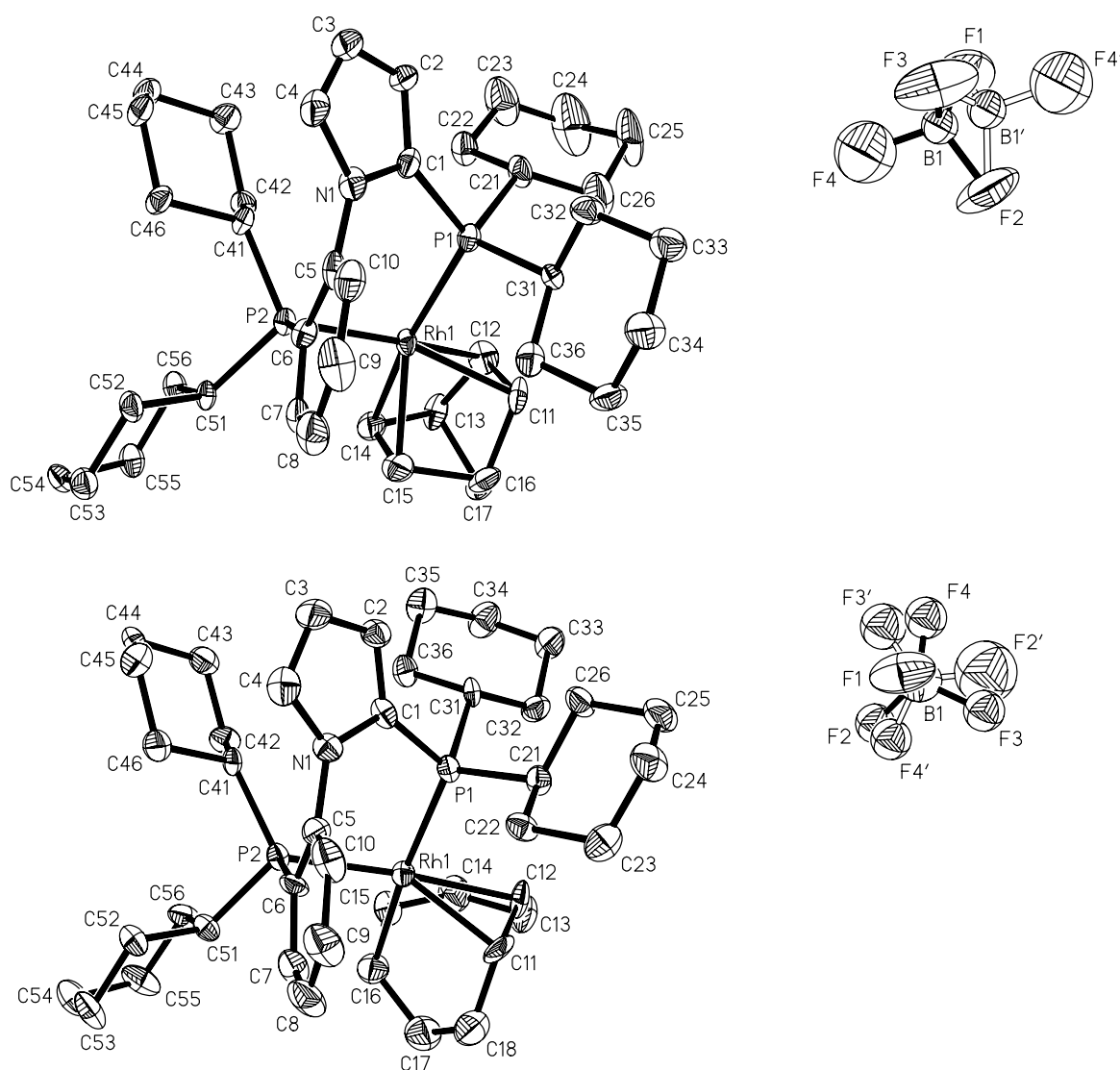


Crystal structures of 1-(2-(dicyclohexylphosphinophenyl)pyrrol-2-dicyclohexylphosphino-rhodium(I) norborna-2,5-diene tetrafluoroborate tetrahydrofuran hemisolvate, $[\text{Rh}(\text{C}_{34}\text{H}_{51}\text{NP}_2)(\text{C}_7\text{H}_8)][\text{BF}_4] \cdot 0.5 \text{C}_4\text{H}_8\text{O}$, and 1-(2-(dicyclohexylphosphinophenyl)-pyrrol-2-dicyclohexylphosphino-rhodium(I) (Z,Z)-cycloocta-1,5-diene tetrafluoroborate, $[\text{Rh}(\text{C}_{34}\text{H}_{51}\text{NP}_2)(\text{C}_8\text{H}_{12})][\text{BF}_4]$

Ralf Jackstell, Zhenya Dai, Thomas Schmidt, Detlef Heller and Hans-Joachim Drexler*

Leibniz-Institut für Katalyse e. V. an der Universität Rostock, Albert-Einstein-Str. 29a, 18059 Rostock, Germany

Received May 22, 2007, accepted and available on-line January 9, 2008; CCDC nos. 1267/2093, 1267/2094



Abstract

$\text{C}_{43}\text{H}_{63}\text{BF}_4\text{NO}_{0.50}\text{P}_2\text{Rh}$, monoclinic, $P12_1/n1$ (no. 14), $a = 10.341(2) \text{ \AA}$, $b = 16.063(3) \text{ \AA}$, $c = 27.425(5) \text{ \AA}$, $\beta = 98.76(3)^\circ$, $V = 4502.4 \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, $R_{\text{gt}}(F) = 0.060$, $wR_{\text{ref}}(F^2) = 0.143$, $T = 200 \text{ K}$.

$\text{C}_{42}\text{H}_{63}\text{BF}_4\text{NP}_2\text{Rh}$, monoclinic, $P12_1/c1$ (no. 14), $a = 10.503(2) \text{ \AA}$, $b = 17.665(4) \text{ \AA}$, $c = 21.946(4) \text{ \AA}$, $\beta = 101.95(3)^\circ$, $V = 3983.5 \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, $R_{\text{gt}}(F) = 0.045$, $wR_{\text{ref}}(F^2) = 0.073$, $T = 200 \text{ K}$.

* Correspondence author (e-mail: hans-joachim.drexler@catalysis.de)

Source of material

Standard procedures were performed according [1]. The ligand is commercially available.

Experimental details

The small $2\theta_{\max}$ values are caused by the limits of the diffractometer system and resulted in small $N_{\text{gt}}/N_{\text{param}}$ ratios.

Discussion

Unexpected differences between the title compounds in the catalytic hydrogenation of the diolefines norborna-2,5-diene (NBD)

and (*Z,Z*)-cycloocta-1,5-diene (COD; cp. [2]) motivated us to determine the crystal structures. The ratio of the rate constants for the hydrogenation of the diolefine complexes is approximately 630 [2].

It is well known that the double bonds of the diolefines are not coordinated perpendicular to the P,Rh,P plane. The dihedral angle between the planes P,Rh,P and X,Rh,X (*X* = centroid of the double bond) is in the case of the NBD-complex 11.8° and for the COD-complex 30.7°.

1. 1-(2-(Dicyclohexylphosphinophenyl)pyrrol-2-dicyclohexylphosphino-rhodium(I) norborna-2,5-diene tetrafluoroborate tetrahydrofuran hemisolvate, [Rh(C₃₄H₅₁NP₂)(C₇H₈)] [BF₄] · 0.5 C₄H₈O

Table 1. Data collection and handling.

Crystal:	red needle, size 0.1 × 0.1 × 0.4 mm
Wavelength:	Mo <i>K</i> _α radiation (0.71073 Å)
μ :	4.97 cm ⁻¹
Diffractometer, scan mode:	Stoe IPDS I, φ
$2\theta_{\max}$:	42.06°
$N(hkl)_{\text{measured}}$, $N(hkl)_{\text{unique}}$:	11957, 4730
Criterion for I_{obs} , $N(hkl)_{\text{gt}}$:	$I_{\text{obs}} > 2 \sigma(I_{\text{obs}})$, 2750
$N(\text{param})_{\text{refined}}$:	455
Programs:	SHELXS-97 [3], SHELXL-97 [4]

Table 2. Atomic coordinates and displacement parameters (in Å²).

Atom	Site	Occ.	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso}
H(2A)	4e		0.3308	0.3208	0.1430	0.08
H(3A)	4e		0.0872	0.3108	0.1410	0.08
H(4A)	4e		0.0347	0.1713	0.1691	0.08
H(7A)	4e		0.3549	-0.1225	0.1890	0.08
H(8A)	4e		0.2659	-0.1398	0.2623	0.08
H(9A)	4e		0.1529	-0.0310	0.2930	0.08
H(10A)	4e		0.1484	0.0997	0.2564	0.08
H(11A)	4e		0.8048	0.0904	0.2173	0.08
H(12A)	4e		0.8078	0.1360	0.1328	0.08
H(13A)	4e		0.8438	0.0155	0.0800	0.08
H(14A)	4e		0.6459	-0.0724	0.0804	0.08
H(15A)	4e		0.6363	-0.1224	0.1618	0.08
H(16A)	4e		0.8311	-0.0676	0.2188	0.08
H(17A)	4e		0.9855	-0.0198	0.1618	0.08
H(17B)	4e		0.9156	-0.1017	0.1398	0.08
H(21A)	4e		0.5374	0.3096	0.1753	0.08
H(22A)	4e		0.4853	0.2705	0.0960	0.08
H(22B)	4e		0.6159	0.2216	0.0984	0.08
H(23A)	4e		0.5914	0.3933	0.0985	0.08
H(23B)	4e		0.6454	0.3417	0.0583	0.08
H(24A)	4e		0.8001	0.4137	0.1062	0.08
H(24B)	4e		0.8238	0.3182	0.1101	0.08
H(25A)	4e		0.7228	0.4108	0.1825	0.08
H(25B)	4e		0.8641	0.3744	0.1897	0.08
H(26A)	4e		0.7758	0.2384	0.1857	0.08
H(26B)	4e		0.7197	0.2848	0.2277	0.08
H(31A)	4e		0.6470	0.1766	0.2593	0.08
H(32A)	4e		0.3941	0.2145	0.2740	0.08
H(32B)	4e		0.4971	0.2820	0.2664	0.08
H(33A)	4e		0.4888	0.2647	0.3523	0.08
H(33B)	4e		0.6265	0.2390	0.3410	0.08
H(34A)	4e		0.4286	0.1246	0.3492	0.08
H(34B)	4e		0.5485	0.1361	0.3902	0.08
H(35A)	4e		0.5796	0.0194	0.3412	0.08

Table 2. Continued.

Atom	Site	Occ.	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso}
H(35B)	4e		0.6847	0.0860	0.3342	0.08
H(36A)	4e		0.5919	0.0378	0.2556	0.08
H(36B)	4e		0.4527	0.0606	0.2663	0.08
H(41A)	4e		0.2660	0.1304	0.0963	0.08
H(42A)	4e		0.3352	0.0587	0.0117	0.08
H(42B)	4e		0.4264	0.1190	0.0455	0.08
H(43A)	4e		0.3057	0.1937	-0.0219	0.08
H(43B)	4e		0.2712	0.2260	0.0280	0.08
H(44A)	4e		0.1133	0.1152	-0.0340	0.08
H(44B)	4e		0.0747	0.2069	-0.0256	0.08
H(45A)	4e		-0.0359	0.1148	0.0207	0.08
H(45B)	4e		0.0519	0.1754	0.0554	0.08
H(46A)	4e		0.0842	0.0417	0.0885	0.08
H(46B)	4e		0.1206	0.0089	0.0389	0.08
H(51A)	4e		0.4087	-0.1333	0.1118	0.08
H(52A)	4e		0.1460	-0.1182	0.0697	0.08
H(52B)	4e		0.1864	-0.1394	0.1253	0.08
H(53A)	4e		0.1421	-0.2643	0.0797	0.08
H(53B)	4e		0.2879	-0.2622	0.1041	0.08
H(54A)	4e		0.2009	-0.2255	0.0044	0.08
H(54B)	4e		0.2802	-0.3047	0.0226	0.08
H(55A)	4e		0.4182	-0.2016	-0.0055	0.08
H(55B)	4e		0.4638	-0.2211	0.0500	0.08
H(56A)	4e		0.4548	-0.0735	0.0377	0.08
H(56B)	4e		0.3058	-0.0816	0.0183	0.08
B(1)	4e	0.49(6)	0.506(1)	-0.3184(6)	0.1780(4)	0.06(1)
F(4)	4e	0.49	0.449(1)	-0.3775(8)	0.1491(5)	0.18
B(1')	4e	0.51	0.540(1)	-0.2811(6)	0.1967(4)	0.07(2)
F(4')	4e	0.51	0.593(2)	-0.2222(8)	0.2266(5)	0.18
O(101)	4e	0.50	0.264(6)	0.499(2)	0.078(2)	0.32(2)
C(102)	4e	0.50	0.335(4)	0.477(3)	0.036(3)	0.32
C(103)	4e	0.50	0.241(8)	0.431(3)	-0.002(2)	0.32
C(104)	4e	0.50	0.112(6)	0.425(3)	0.017(3)	0.32
C(105)	4e	0.50	0.126(5)	0.467(4)	0.066(2)	0.32

Table 3. Atomic coordinates and displacement parameters (in Å²).

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
Rh(1)	4e	0.58088(7)	0.04899(4)	0.14634(3)	0.0183(4)	0.0345(4)	0.0346(4)	−0.0054(4)	0.0033(3)	−0.0067(5)
P(1)	4e	0.5107(2)	0.1689(2)	0.18369(9)	0.023(2)	0.037(2)	0.034(2)	−0.004(1)	0.002(1)	−0.001(1)
P(2)	4e	0.3676(2)	0.0060(2)	0.11993(9)	0.026(2)	0.034(1)	0.028(1)	−0.005(1)	0.002(1)	−0.001(1)
N(1)	4e	0.2346(8)	0.1482(5)	0.1802(3)	0.020(5)	0.050(6)	0.048(6)	−0.001(5)	0.011(5)	−0.013(5)
C(1)	4e	0.337(1)	0.1999(6)	0.1728(3)	0.025(6)	0.048(7)	0.032(6)	0.005(6)	0.000(6)	−0.013(5)
C(2)	4e	0.284(1)	0.2744(6)	0.1535(4)	0.038(8)	0.041(7)	0.044(7)	0.010(5)	−0.004(6)	−0.004(6)
C(3)	4e	0.150(1)	0.2679(7)	0.1515(4)	0.039(8)	0.053(8)	0.064(8)	0.011(6)	−0.005(7)	−0.010(7)
C(4)	4e	0.121(1)	0.1924(7)	0.1673(4)	0.024(7)	0.066(8)	0.053(7)	0.007(6)	0.007(6)	−0.022(7)
C(5)	4e	0.2423(9)	0.0626(7)	0.1993(4)	0.024(6)	0.056(8)	0.029(6)	−0.018(6)	0.007(5)	−0.006(6)
C(6)	4e	0.2964(9)	−0.0016(6)	0.1767(3)	0.015(6)	0.042(6)	0.033(6)	−0.001(5)	0.009(5)	0.000(6)
C(7)	4e	0.310(1)	−0.0772(6)	0.2020(4)	0.038(7)	0.046(7)	0.026(6)	−0.016(5)	0.001(6)	−0.003(5)
C(8)	4e	0.257(1)	−0.0873(8)	0.2453(4)	0.063(9)	0.065(8)	0.047(8)	−0.032(7)	0.004(7)	0.011(7)
C(9)	4e	0.194(1)	−0.0225(9)	0.2642(4)	0.061(9)	0.09(1)	0.037(7)	−0.026(7)	0.032(7)	−0.018(8)
C(10)	4e	0.188(1)	0.0532(8)	0.2424(4)	0.032(6)	0.068(9)	0.051(8)	−0.009(6)	0.006(6)	−0.006(7)
C(11)	4e	0.7813(9)	0.0558(7)	0.1888(4)	0.028(6)	0.070(8)	0.034(6)	−0.004(6)	−0.005(5)	−0.022(7)
C(12)	4e	0.783(1)	0.0806(7)	0.1408(4)	0.029(7)	0.060(7)	0.058(8)	0.001(5)	0.021(6)	−0.013(7)
C(13)	4e	0.8128(9)	0.0057(7)	0.1107(4)	0.015(6)	0.077(8)	0.042(6)	−0.009(6)	0.009(6)	−0.005(7)
C(14)	4e	0.686(1)	−0.0435(7)	0.1094(4)	0.034(7)	0.049(7)	0.058(7)	0.011(6)	0.002(6)	−0.009(7)
C(15)	4e	0.680(1)	−0.0720(6)	0.1551(4)	0.027(7)	0.046(7)	0.080(9)	0.004(5)	0.007(7)	0.003(7)
C(16)	4e	0.8063(9)	−0.0407(6)	0.1876(4)	0.037(7)	0.050(7)	0.051(6)	0.005(6)	−0.004(6)	0.022(6)
C(17)	4e	0.9028(9)	−0.0457(7)	0.1504(4)	0.023(6)	0.055(6)	0.056(6)	0.004(6)	0.003(6)	0.002(7)
C(21)	4e	0.589(1)	0.2645(6)	0.1660(4)	0.039(7)	0.038(6)	0.051(7)	−0.019(5)	0.003(7)	−0.002(5)
C(22)	4e	0.576(1)	0.2703(6)	0.1100(3)	0.055(8)	0.050(7)	0.036(6)	−0.019(6)	0.005(6)	0.004(6)
C(23)	4e	0.644(2)	0.3458(8)	0.0932(5)	0.14(2)	0.09(1)	0.068(9)	−0.05(1)	0.01(1)	0.003(8)
C(24)	4e	0.768(2)	0.363(1)	0.1180(6)	0.17(2)	0.14(2)	0.10(1)	−0.10(1)	0.04(1)	−0.00(1)
C(25)	4e	0.776(2)	0.3655(8)	0.1740(5)	0.13(1)	0.11(1)	0.067(9)	−0.10(1)	0.00(1)	−0.005(9)
C(26)	4e	0.720(1)	0.2832(8)	0.1927(5)	0.09(1)	0.08(1)	0.074(9)	−0.037(8)	0.001(9)	−0.004(8)
C(31)	4e	0.5556(9)	0.1631(5)	0.2521(3)	0.035(6)	0.024(5)	0.031(6)	0.000(5)	−0.001(5)	−0.008(5)
C(32)	4e	0.486(1)	0.2274(6)	0.2794(3)	0.055(7)	0.037(6)	0.038(6)	0.009(5)	0.010(6)	−0.002(5)
C(33)	4e	0.535(1)	0.2249(6)	0.3353(4)	0.077(9)	0.042(7)	0.049(7)	0.001(6)	0.006(7)	0.003(6)
C(34)	4e	0.520(1)	0.1379(6)	0.3552(4)	0.09(1)	0.058(8)	0.033(6)	0.020(7)	0.015(7)	−0.009(6)
C(35)	4e	0.593(1)	0.0737(6)	0.3282(3)	0.075(9)	0.045(7)	0.037(6)	0.022(6)	−0.001(6)	0.007(5)
C(36)	4e	0.543(1)	0.0763(6)	0.2725(3)	0.039(7)	0.051(7)	0.044(6)	−0.004(5)	0.001(6)	−0.005(6)
C(41)	4e	0.2698(8)	0.0802(5)	0.0776(3)	0.022(6)	0.040(6)	0.025(5)	−0.002(4)	−0.001(5)	0.002(5)
C(42)	4e	0.337(1)	0.1049(5)	0.0340(3)	0.040(7)	0.034(6)	0.033(6)	−0.005(5)	0.006(6)	0.002(5)
C(43)	4e	0.265(1)	0.1790(6)	0.0062(4)	0.047(8)	0.051(7)	0.049(7)	−0.005(6)	0.006(7)	0.016(6)
C(44)	4e	0.119(1)	0.1591(6)	−0.0101(4)	0.048(8)	0.049(7)	0.036(6)	−0.005(6)	−0.008(6)	0.016(6)
C(45)	4e	0.053(1)	0.1298(6)	0.0327(4)	0.030(7)	0.055(7)	0.058(7)	0.005(6)	−0.009(6)	−0.008(6)
C(46)	4e	0.1244(8)	0.0562(6)	0.0604(3)	0.023(6)	0.045(6)	0.048(6)	−0.002(5)	0.000(5)	0.008(6)
C(51)	4e	0.3449(8)	−0.0987(5)	0.0924(3)	0.017(6)	0.039(6)	0.029(6)	−0.009(5)	0.005(5)	−0.003(5)
C(52)	4e	0.2117(9)	−0.1442(5)	0.0932(4)	0.029(6)	0.037(6)	0.048(6)	−0.010(5)	0.003(6)	−0.005(5)
C(53)	4e	0.224(1)	−0.2364(6)	0.0796(4)	0.040(7)	0.043(7)	0.045(7)	−0.007(5)	0.004(6)	−0.001(6)
C(54)	4e	0.268(1)	−0.2468(6)	0.0293(4)	0.046(7)	0.028(6)	0.059(8)	−0.003(5)	−0.001(7)	−0.013(6)
C(55)	4e	0.395(1)	−0.1974(6)	0.0269(4)	0.033(7)	0.053(7)	0.048(7)	−0.012(5)	0.011(6)	−0.006(6)
C(56)	4e	0.3772(9)	−0.1048(6)	0.0406(3)	0.030(6)	0.043(6)	0.037(6)	−0.009(5)	0.009(6)	−0.007(5)
F(1)	4e	0.564(1)	−0.2660(6)	0.1518(3)	0.18(1)	0.18(1)	0.160(9)	−0.028(8)	0.019(8)	0.092(8)
F(2)	4e	0.5897(8)	−0.3532(6)	0.2124(3)	0.123(8)	0.19(1)	0.162(9)	0.015(7)	−0.030(7)	0.110(8)
F(3)	4e	0.413(1)	−0.2786(7)	0.1966(4)	0.20(1)	0.21(1)	0.18(1)	0.10(1)	0.06(1)	0.072(9)

2. 1-(2-(Dicyclohexylphosphinophenyl)-pyrrol-2-dicyclohexylphosphino-rhodium(I) (Z,Z)-cycloocta-1,5-diene tetrafluoroborate, [Rh(C₃₄H₅₁NP₂)(C₈H₁₂)] [BF₄]

Table 4. Data collection and handling.

Crystal:	red, prism-like, size 0.3 × 0.3 × 0.4 mm
Wavelength:	Mo K α radiation (0.71073 Å)
μ :	5.59 cm ^{−1}
Diffractionmeter, scan mode:	Stoe IPDS I, φ
2 θ _{max} :	45°
<i>N</i> (<i>hkl</i>) _{measured} , <i>N</i> (<i>hkl</i>) _{unique} :	9728, 4985
Criterion for <i>I</i> _{obs} , <i>N</i> (<i>hkl</i>) _{gt} :	<i>I</i> _{obs} > 2 σ (<i>I</i> _{obs}), 2732
<i>N</i> (<i>param</i>) _{refined} :	458
Programs:	SHELXS-97 [3], SHELXL-97 [4]

Table 5. Atomic coordinates and displacement parameters (in Å²).

Atom	Site	Occ.	x	y	z	U _{iso}
H(2A)	4e		0.5344	0.3481	0.2718	0.08
H(3A)	4e		0.7685	0.3636	0.2608	0.08
H(4A)	4e		0.9051	0.2775	0.3382	0.08
H(7A)	4e		0.7873	0.1361	0.5527	0.08
H(8A)	4e		0.8766	0.0285	0.5168	0.08
H(9A)	4e		0.9175	0.0245	0.4160	0.08
H(10A)	4e		0.8504	0.1254	0.3483	0.08
H(11A)	4e		0.4003	0.0849	0.4444	0.08
H(12A)	4e		0.2473	0.1659	0.4191	0.08
H(13A)	4e		0.1902	0.1570	0.5332	0.08
H(13B)	4e		0.1126	0.2041	0.4780	0.08
H(14A)	4e		0.2231	0.3099	0.5105	0.08
H(14B)	4e		0.2137	0.2740	0.5739	0.08
H(15A)	4e		0.4298	0.3192	0.5722	0.08
H(16A)	4e		0.5544	0.2271	0.6102	0.08
H(17A)	4e		0.3429	0.1368	0.6030	0.08
H(17B)	4e		0.4849	0.1143	0.6336	0.08
H(18A)	4e		0.5191	0.0626	0.5444	0.08
H(18B)	4e		0.3785	0.0361	0.5449	0.08
H(21A)	4e		0.3366	0.1344	0.3368	0.08
H(22A)	4e		0.5463	0.0840	0.3717	0.08
H(22B)	4e		0.5891	0.1191	0.3142	0.08
H(23A)	4e		0.3997	0.0041	0.3058	0.08
H(23B)	4e		0.5388	−0.0082	0.2936	0.08
H(24A)	4e		0.3852	0.0017	0.1994	0.08
H(24B)	4e		0.4897	0.0651	0.2047	0.08
H(25A)	4e		0.2871	0.1199	0.1721	0.08
H(25B)	4e		0.2415	0.0854	0.2292	0.08
H(26A)	4e		0.4327	0.1993	0.2387	0.08
H(26B)	4e		0.2927	0.2136	0.2492	0.08
H(31A)	4e		0.3516	0.3226	0.2981	0.08
H(32A)	4e		0.1961	0.3001	0.3858	0.08
H(32B)	4e		0.1783	0.2543	0.3240	0.08
H(33A)	4e		0.1309	0.3664	0.2680	0.08
H(33B)	4e		0.0326	0.3575	0.3116	0.08

Table 5. Continued.

Atom	Site	Occ.	x	y	z	U _{iso}
H(34A)	4e		0.1153	0.4821	0.3146	0.08
H(34B)	4e		0.1506	0.4445	0.3801	0.08
H(35A)	4e		0.3351	0.5030	0.3602	0.08
H(35B)	4e		0.3211	0.4598	0.2975	0.08
H(36A)	4e		0.4803	0.4010	0.3717	0.08
H(36B)	4e		0.3816	0.3902	0.4149	0.08
H(41A)	4e		0.6881	0.3648	0.4250	0.08
H(42A)	4e		0.7025	0.4467	0.5341	0.08
H(42B)	4e		0.5715	0.4249	0.4902	0.08
H(43A)	4e		0.6222	0.4968	0.4108	0.08
H(43B)	4e		0.6332	0.5484	0.4690	0.08
H(44A)	4e		0.8108	0.5654	0.4209	0.08
H(44B)	4e		0.8563	0.5386	0.4894	0.08
H(45A)	4e		0.9675	0.4691	0.4284	0.08
H(45B)	4e		0.8369	0.4447	0.3857	0.08
H(46A)	4e		0.9117	0.3450	0.4541	0.08
H(46B)	4e		0.9140	0.3985	0.5107	0.08
H(51A)	4e		0.7568	0.2331	0.6052	0.08
H(52A)	4e		0.9633	0.3228	0.5863	0.08
H(52B)	4e		0.9578	0.2360	0.5737	0.08
H(53A)	4e		1.0801	0.2588	0.6750	0.08
H(53B)	4e		0.9545	0.2143	0.6793	0.08
H(54A)	4e		0.9775	0.3134	0.7509	0.08
H(54B)	4e		0.9798	0.3704	0.6971	0.08
H(55A)	4e		0.7756	0.3733	0.7188	0.08
H(55B)	4e		0.7633	0.2862	0.7089	0.08
H(56A)	4e		0.7747	0.3902	0.6134	0.08
H(56B)	4e		0.6492	0.3463	0.6189	0.08
F(2)	4e	0.52(2)	−0.1058(8)	0.4901(7)	0.2275(3)	0.061(4)
F(3)	4e	0.52	−0.2145(8)	0.4119(5)	0.1577(5)	0.065(4)
F(4)	4e	0.52	−0.178(1)	0.5267(6)	0.1282(4)	0.067(4)
F(2')	4e	0.48	−0.2374(7)	0.445(1)	0.1341(6)	0.153(7)
F(3')	4e	0.48	−0.123(1)	0.5495(4)	0.1555(7)	0.082(5)
F(4')	4e	0.48	−0.119(1)	0.4657(7)	0.2291(3)	0.065(5)

Table 6. Atomic coordinates and displacement parameters (in Å²).

Atom	Site	x	y	z	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Rh(1)	4e	0.48074(6)	0.22665(3)	0.48159(2)	0.0199(3)	0.0214(3)	0.0203(3)	−0.0019(3)	0.0033(2)	−0.0019(3)
P(1)	4e	0.4649(2)	0.2396(1)	0.37297(7)	0.017(1)	0.020(1)	0.021(1)	0.0004(8)	0.0005(8)	−0.0030(8)
P(2)	4e	0.6905(2)	0.2784(1)	0.50464(7)	0.015(1)	0.023(1)	0.0213(9)	0.001(1)	0.0006(8)	−0.002(1)
N(1)	4e	0.7317(6)	0.2481(2)	0.3649(2)	0.022(4)	0.028(4)	0.020(3)	0.002(2)	0.007(3)	0.000(2)
C(1)	4e	0.6041(6)	0.2721(4)	0.3423(2)	0.013(4)	0.029(4)	0.019(3)	0.005(4)	0.004(3)	−0.004(4)
C(2)	4e	0.6085(7)	0.3226(4)	0.2961(3)	0.025(6)	0.032(4)	0.021(4)	0.000(3)	0.007(3)	0.001(3)
C(3)	4e	0.7380(8)	0.3308(4)	0.2897(3)	0.042(6)	0.042(5)	0.021(4)	−0.007(4)	0.014(4)	0.001(4)
C(4)	4e	0.8127(7)	0.2843(4)	0.3322(3)	0.029(5)	0.038(5)	0.033(4)	−0.001(4)	0.011(4)	−0.007(4)
C(5)	4e	0.7788(7)	0.1905(4)	0.4094(3)	0.021(5)	0.025(4)	0.029(4)	0.000(3)	0.003(3)	0.004(3)
C(6)	4e	0.7647(7)	0.1978(3)	0.4726(3)	0.030(5)	0.017(4)	0.021(4)	0.005(3)	−0.007(3)	0.004(3)
C(7)	4e	0.7999(7)	0.1345(4)	0.5106(3)	0.031(5)	0.025(4)	0.034(5)	0.007(4)	−0.005(4)	−0.008(4)
C(8)	4e	0.8555(8)	0.0713(4)	0.4897(4)	0.037(6)	0.037(5)	0.042(5)	0.016(4)	−0.010(4)	0.000(4)
C(9)	4e	0.8760(7)	0.0679(4)	0.4297(4)	0.035(6)	0.036(5)	0.046(5)	0.018(4)	−0.002(4)	−0.008(4)
C(10)	4e	0.8366(7)	0.1270(4)	0.3902(3)	0.017(5)	0.042(5)	0.039(5)	0.012(4)	0.002(4)	−0.012(4)
C(11)	4e	0.3870(8)	0.1156(3)	0.4786(3)	0.055(6)	0.010(4)	0.037(5)	−0.011(4)	0.011(4)	−0.003(3)
C(12)	4e	0.2875(7)	0.1671(4)	0.4626(3)	0.013(5)	0.028(5)	0.049(5)	−0.009(3)	0.005(4)	−0.011(4)
C(13)	4e	0.1977(8)	0.1951(4)	0.5030(3)	0.030(6)	0.047(5)	0.048(5)	−0.013(4)	0.011(4)	−0.006(4)
C(14)	4e	0.2508(7)	0.2678(5)	0.5377(3)	0.033(6)	0.054(5)	0.051(5)	−0.002(5)	0.010(4)	0.000(5)
C(15)	4e	0.3962(7)	0.2704(5)	0.5578(3)	0.029(5)	0.037(4)	0.025(4)	0.001(4)	0.008(3)	−0.012(4)
C(16)	4e	0.4758(8)	0.2113(4)	0.5824(3)	0.035(6)	0.036(5)	0.029(4)	−0.002(4)	0.010(4)	0.001(4)
C(17)	4e	0.4302(8)	0.1336(4)	0.5963(3)	0.046(6)	0.056(6)	0.039(5)	−0.004(4)	0.010(4)	0.007(4)
C(18)	4e	0.4314(8)	0.0797(4)	0.5416(3)	0.045(6)	0.039(5)	0.053(6)	−0.006(4)	0.010(4)	0.005(4)
C(21)	4e	0.4084(7)	0.1570(3)	0.3226(3)	0.020(5)	0.019(4)	0.028(4)	0.002(3)	0.000(3)	−0.003(3)
C(22)	4e	0.5170(7)	0.0974(3)	0.3287(3)	0.031(5)	0.024(4)	0.017(4)	0.006(3)	0.004(3)	−0.002(3)
C(23)	4e	0.4685(7)	0.0274(3)	0.2897(3)	0.042(6)	0.024(4)	0.042(5)	0.001(4)	0.015(4)	−0.005(4)
C(24)	4e	0.4191(8)	0.0463(4)	0.2220(3)	0.051(6)	0.035(5)	0.025(4)	0.003(4)	0.004(4)	−0.010(4)
C(25)	4e	0.3150(8)	0.1061(4)	0.2152(3)	0.056(6)	0.034(5)	0.022(4)	−0.001(4)	−0.004(4)	−0.004(4)
C(26)	4e	0.3617(7)	0.1770(3)	0.2537(3)	0.038(6)	0.021(4)	0.027(4)	0.004(3)	−0.009(4)	−0.001(3)

Table 6. Continued.

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
C(31)	4e	0.3483(7)	0.3169(3)	0.3412(3)	0.013(5)	0.024(4)	0.022(4)	−0.004(3)	−0.002(3)	−0.005(3)
C(32)	4e	0.2057(7)	0.3020(3)	0.3433(3)	0.028(6)	0.023(5)	0.041(5)	−0.001(3)	0.002(4)	0.009(3)
C(33)	4e	0.1225(7)	0.3662(4)	0.3108(3)	0.018(5)	0.036(5)	0.066(6)	0.001(4)	−0.006(4)	0.017(4)
C(34)	4e	0.1658(8)	0.4428(4)	0.3385(4)	0.030(6)	0.039(5)	0.062(6)	0.000(4)	0.012(4)	0.002(4)
C(35)	4e	0.3080(7)	0.4561(3)	0.3394(3)	0.032(6)	0.021(4)	0.047(5)	0.007(3)	0.009(4)	−0.009(3)
C(36)	4e	0.3903(7)	0.3922(3)	0.3723(3)	0.028(5)	0.028(4)	0.027(4)	−0.002(3)	0.002(3)	−0.009(3)
C(41)	4e	0.7285(6)	0.3693(3)	0.4683(3)	0.009(5)	0.028(4)	0.026(4)	−0.003(3)	0.001(3)	0.001(3)
C(42)	4e	0.6613(7)	0.4367(3)	0.4916(3)	0.032(5)	0.023(4)	0.026(4)	0.006(3)	0.005(3)	0.000(3)
C(43)	4e	0.6711(7)	0.5057(4)	0.4523(3)	0.034(6)	0.029(4)	0.027(5)	0.003(4)	0.000(4)	0.001(3)
C(44)	4e	0.8097(7)	0.5236(4)	0.4488(3)	0.034(6)	0.031(5)	0.024(4)	−0.010(4)	−0.011(4)	0.005(4)
C(45)	4e	0.8783(8)	0.4567(4)	0.4278(3)	0.034(6)	0.042(5)	0.042(5)	−0.008(4)	0.009(4)	0.005(4)
C(46)	4e	0.8699(7)	0.3876(4)	0.4688(3)	0.022(5)	0.037(5)	0.034(5)	0.000(3)	0.003(4)	0.004(4)
C(51)	4e	0.7822(6)	0.2786(4)	0.5870(2)	0.018(5)	0.027(4)	0.021(3)	0.005(4)	0.002(3)	0.000(4)
C(52)	4e	0.9308(6)	0.2754(4)	0.5983(3)	0.025(5)	0.036(4)	0.031(4)	0.001(4)	−0.005(3)	0.004(4)
C(53)	4e	0.9869(7)	0.2618(4)	0.6676(3)	0.029(5)	0.050(6)	0.035(4)	0.008(4)	−0.012(3)	−0.003(4)
C(54)	4e	0.9437(8)	0.3234(4)	0.7075(3)	0.045(7)	0.056(6)	0.023(4)	0.000(4)	−0.006(4)	−0.005(4)
C(55)	4e	0.7993(8)	0.3316(4)	0.6954(3)	0.050(7)	0.046(5)	0.022(5)	0.016(4)	−0.001(4)	0.000(4)
C(56)	4e	0.7424(7)	0.3433(3)	0.6263(3)	0.035(5)	0.025(4)	0.024(4)	0.006(3)	0.001(4)	0.007(3)
B(1)	4e	−0.1261(6)	0.4718(3)	0.1671(2)	0.09(1)	0.063(9)	0.062(9)	0.013(7)	0.031(8)	−0.013(7)
F(1)	4e	−0.0199(5)	0.4423(3)	0.1505(2)	0.092(5)	0.088(4)	0.114(5)	0.033(3)	0.059(4)	0.041(3)

Acknowledgment. We thank Ms. Cornelia Pribbenow for complex preparation.

References

1. Röttger, D.; Beller, M.; Jackstell, R.; Heller, D.; Drexler, H.-J.; Klein, H.; Wiese, K.-D.: Novel *N*-phenyl-pyrrol bisphosphane compounds and the metal complexes of same. Oxeno Olefinchemie, WO00200205528A1 (application date 12.12.2001).
2. Drexler, H.-J.; Baumann, W.; Spannenberg, A.; Fischer, C.; Heller, D.: COD- versus NBD-precatalysts. Dramatic difference in the asymmetric hydrogenation of prochiral olefins with five membered diphosphine Rh-hydrogenation catalysts. J. Organomet. Chem. **621** (2001) 89-102.
3. Sheldrick, G. M.: SHELXS-97. Program for the Solution of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany 1997.
4. Sheldrick, G. M.: SHELXL-97. Program for the Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany 1997.