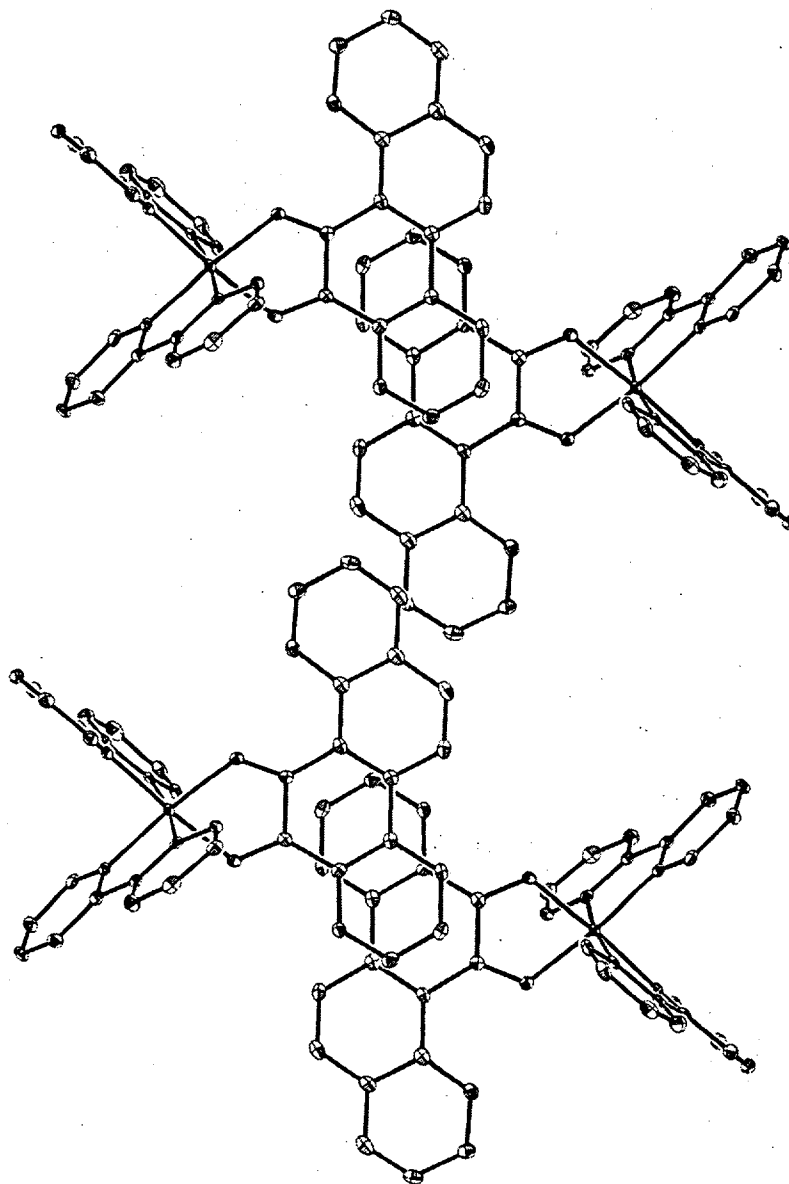


**Figure S1.** Hydrogen bonding network in the crystal of  $[\text{Rh}(\text{bpy})_2(\text{chrysi})]\text{Cl}_3$  involving the metal complex imino protons, two chloride counter-ions and two ordered water molecules. For clarity, all atoms except the central rhodium ion, its coordinating nitrogens, and the imino protons are omitted from the metal complex.



**Figure S2.** Top view of four molecules from the crystal structure of  $[\text{Rh}(\text{bpy})_2(\text{chrysi})]\text{Cl}_3$ . Note that the overlap of the chrysi intercalating ligands for aromatic-aromatic stacking interactions occurs on the side of the molecule not subject to protonation induced distortion.

## Final Heavy Atom Parameters for

Bis 2-2'bipyridyl chrysenequinone diimine rhodium(III) chloride · 3CH<sub>3</sub>CN·2H<sub>2</sub>O

Atom	<i>x, y, z</i> and <i>U<sub>eq</sub></i>			<i>U<sub>eq</sub></i>
	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	
Rh	0.07663(2)	0.44184(2)	0.23928(1)	0.00770(5)
Cl1	-0.25851(7)	0.75302(6)	0.28821(3)	0.0209(1)
Cl2	0.53452(6)	0.33062(6)	0.22957(3)	0.0176(1)
Cl3 <sup>†</sup>	0.5929(7)	0.1022(5)	-0.0136(3)	0.0161(6)
Cl4 <sup>†</sup>	0.8822(6)	0.0038(4)	0.0448(2)	0.0190(6)
O3 <sup>†</sup>	0.574(2)	0.110(2)	-0.0273(7)	0.019(2)
O4 <sup>†</sup>	0.884(2)	-0.007(1)	0.0646(5)	0.029(2)
O5	0.6054(3)	0.5090(2)	0.33744(10)	0.0317(5)
N1	0.1647(2)	0.5932(2)	0.21162(9)	0.0098(4)
N2	-0.0908(2)	0.5358(2)	0.18157(9)	0.0096(4)
N3	0.1590(2)	0.3416(2)	0.16400(9)	0.0095(4)
N4	-0.0208(2)	0.2915(2)	0.25483(9)	0.0098(4)
N5	0.0060(2)	0.5279(2)	0.31834(9)	0.0101(4)
N6	0.2385(2)	0.3640(2)	0.30089(9)	0.0097(4)
C1	0.2978(3)	0.6158(2)	0.23100(11)	0.0117(5)
C2	0.3548(3)	0.7153(2)	0.20522(12)	0.0143(5)
C3	0.2763(3)	0.7921(2)	0.15811(12)	0.0159(5)
C4	0.1377(3)	0.7711(2)	0.13955(12)	0.0149(5)
C5	0.0833(3)	0.6715(2)	0.16742(10)	0.0108(5)
C6	-0.0628(3)	0.6419(2)	0.15218(11)	0.0111(5)

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U<sub>eq</sub></i>
C7	-0.1682(3)	0.7167(2)	0.11262(11)	0.0137(5)
C8	-0.3045(3)	0.6814(2)	0.10290(11)	0.0150(6)
C9	-0.3309(3)	0.5727(2)	0.13316(11)	0.0142(7)
C10	-0.2226(3)	0.5022(2)	0.17246(11)	0.0129(5)
C11	0.2609(3)	0.3701(2)	0.12198(11)	0.0122(5)
C12	0.3054(3)	0.2992(2)	0.07087(11)	0.0152(6)
C13	0.2420(3)	0.1977(2)	0.06161(12)	0.0153(6)
C14	0.1385(3)	0.1667(2)	0.10520(11)	0.0137(5)
C15	0.1000(2)	0.2385(2)	0.15674(11)	0.0108(5)
C16	0.0014(3)	0.2089(2)	0.20861(11)	0.0113(5)
C17	-0.0634(3)	0.1043(2)	0.21292(12)	0.0158(5)
C18	-0.1491(3)	0.0832(2)	0.26550(12)	0.0173(6)
C19	-0.1716(3)	0.1685(2)	0.31169(12)	0.0155(6)
C20	-0.1070(3)	0.2716(2)	0.30493(11)	0.0129(6)
C21	0.0899(2)	0.4988(2)	0.36774(11)	0.0094(5)
C22	0.2211(2)	0.3945(2)	0.35905(11)	0.0096(5)
C23	0.3182(3)	0.3431(2)	0.41262(11)	0.0106(5)
C24	0.4187(3)	0.2236(2)	0.41186(11)	0.0118(5)
C25	0.4166(3)	0.1341(2)	0.36620(11)	0.0136(5)
C26	0.5167(3)	0.0229(2)	0.36809(12)	0.0154(5)

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{eq}$
C27	0.6262(3)	-0.0068(2)	0.41588(12)	0.0162(6)
C28	0.6279(3)	0.0733(2)	0.46244(12)	0.0169(6)
C29	0.5231(3)	0.1882(2)	0.46268(11)	0.0141(6)
C30	0.5147(3)	0.2662(2)	0.51387(12)	0.0161(6)
C31	0.4098(3)	0.3735(2)	0.51635(11)	0.0145(5)
C32	0.3090(3)	0.4155(2)	0.46545(11)	0.0116(5)
C33	0.1939(3)	0.5314(2)	0.47068(11)	0.0118(5)
C34	0.1928(3)	0.6080(2)	0.52137(11)	0.0137(5)
C35	0.0817(3)	0.7129(2)	0.52690(11)	0.0156(5)
C36	-0.0348(3)	0.7439(2)	0.48355(11)	0.0151(5)
C37	-0.0367(3)	0.6702(2)	0.43286(11)	0.0131(5)
C38	0.0785(3)	0.5664(2)	0.42539(11)	0.0114(5)
C39	0.4394(3)	0.0336(2)	0.20067(12)	0.0202(6)
C40	0.5725(3)	0.0270(3)	0.16099(14)	0.0263(7)
N7	0.3335(3)	0.0380(2)	0.23110(11)	0.0250(5)
C41	0.1485(4)	0.8547(3)	0.33137(15)	0.0344(8)
C42	0.1164(3)	0.9466(3)	0.37906(13)	0.0235(6)
N8	0.0915(3)	1.0190(2)	0.41597(12)	0.0338(6)
C43	0.2098(6)	0.6730(4)	-0.03079(23)	0.0623(14)
C44 <sup>†</sup>	0.3227(6)	0.6071(5)	-0.00366(25)	0.0213(12)

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{eq}$
C45 <sup>†</sup>	0.1235(7)	0.5960(6)	-0.01880(29)	0.0301(15)
N9 <sup>†</sup>	0.4280(5)	0.5483(4)	0.01874(24)	0.0315(12)
N10 <sup>†</sup>	0.0355(7)	0.5347(5)	-0.00937(32)	0.0511(20)

$$^a U_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j [U_{ij}(a_i^* a_j^*)(\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j)]$$

<sup>†</sup> Population: 0.5

**Final Refined Hydrogen Parameters (less four half atoms) for  
Bis 2-2'bipyridyl chrysenequinone diimine rhodium(III) chloride · 3CH<sub>3</sub>CN·2H<sub>2</sub>O**

*x, y, z and U<sub>iso</sub>*

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U<sub>iso</sub></i>
H4a <sup>†</sup>	0.933(10)	-0.014(9)	0.034(5)	0.06(5)
H4b <sup>†</sup>	0.826(13)	0.040(11)	0.048(6)	0.12(6)
H5a	0.591(4)	0.465(3)	0.3088(16)	0.038(10)
H5b	0.624(4)	0.581(3)	0.3223(16)	0.045(11)
H5	-0.066(4)	0.591(3)	0.3142(15)	0.037(9)
H6	0.317(4)	0.313(3)	0.2889(14)	0.032(9)
H1	0.352(3)	0.558(2)	0.2615(12)	0.010(6)
H2	0.450(3)	0.726(2)	0.2210(12)	0.020(7)
H3	0.315(3)	0.855(2)	0.1390(12)	0.014(7)
H4	0.088(3)	0.822(2)	0.1089(13)	0.018(7)
H7	-0.148(3)	0.787(2)	0.0949(11)	0.003(6)
H8	-0.373(3)	0.732(2)	0.0771(12)	0.013(6)
H9	-0.423(3)	0.550(2)	0.1271(12)	0.018(7)
H10	-0.237(3)	0.426(2)	0.1917(12)	0.017(7)
H11	0.296(3)	0.443(2)	0.1274(10)	0.003(6)
H12	0.378(3)	0.322(2)	0.0435(13)	0.020(7)
H13	0.271(3)	0.147(2)	0.0279(12)	0.010(6)
H14	0.101(3)	0.099(3)	0.1010(13)	0.022(7)
H17	-0.046(3)	0.050(2)	0.1810(12)	0.012(6)
H18	-0.193(3)	0.011(3)	0.2704(13)	0.024(7)
H19	-0.226(3)	0.160(2)	0.3460(13)	0.023(7)
H20	-0.120(3)	0.334(2)	0.3341(11)	0.007(6)
H25	0.347(3)	0.148(2)	0.3334(12)	0.009(6)
H26	0.510(3)	-0.037(2)	0.3380(12)	0.011(6)
H27	0.690(3)	-0.084(2)	0.4136(11)	0.011(6)
H28	0.697(3)	0.052(2)	0.4959(13)	0.020(7)
H30	0.585(3)	0.237(2)	0.5495(13)	0.024(7)
H31	0.407(3)	0.418(2)	0.5513(12)	0.012(6)
H34	0.264(3)	0.588(2)	0.5509(12)	0.013(6)
H35	0.087(3)	0.770(3)	0.5590(13)	0.025(7)
H36	-0.110(3)	0.817(2)	0.4888(11)	0.011(6)
H37	-0.116(3)	0.693(2)	0.4029(12)	0.014(6)
H40a	0.546(3)	0.013(3)	0.1180(16)	0.038(9)
H40b	0.649(4)	-0.046(3)	0.1762(15)	0.040(9)
H40c	0.604(4)	0.106(3)	0.1646(15)	0.042(9)
H41a	0.214(4)	0.780(3)	0.3494(15)	0.041(9)
H41b	0.058(5)	0.830(4)	0.3150(18)	0.068(13)
H41c	0.188(4)	0.891(3)	0.2948(16)	0.044(10)
H43a	0.231(4)	0.699(3)	-0.0708(19)	0.058(12)
H43b	0.177(6)	0.738(5)	-0.0137(23)	0.096(18)

† Population: 0.5

## Anisotropic Displacement Parameters for

Bis 2-2'-bipyridyl chrysenequinone diimine rhodium(III) chloride · 3CH<sub>3</sub>CN·2H<sub>2</sub>O

Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
Rh	0.0048(1)	0.0107(1)	0.0074(1)	-0.0010(1)	-0.0003(1)	-0.0007(1)
Cl1	0.0203(3)	0.0198(3)	0.0192(3)	0.0053(3)	-0.0041(3)	-0.0042(3)
Cl2	0.0105(3)	0.0195(3)	0.0230(3)	-0.0033(2)	0.0010(2)	-0.0022(2)
Cl3	0.0141(13)	0.0187(11)	0.0154(17)	-0.0025(8)	-0.0006(13)	-0.0013(11)
Cl4	0.0160(12)	0.0149(11)	0.0267(19)	-0.0048(8)	-0.0060(14)	0.0005(12)
O3	0.0118(43)	0.0293(42)	0.0168(69)	-0.0066(30)	-0.0050(36)	0.0004(37)
O4	0.0176(37)	0.0350(47)	0.0345(70)	-0.0060(28)	-0.0047(49)	0.0021(46)
O5	0.0423(13)	0.0339(13)	0.0207(11)	-0.0103(10)	-0.0033(9)	-0.0064(10)
N1	0.0088(10)	0.0107(10)	0.0095(10)	-0.0007(8)	0.0025(8)	-0.0030(8)
N2	0.0078(10)	0.0132(10)	0.0077(10)	-0.0012(8)	0.0014(8)	-0.0026(8)
N3	0.0066(9)	0.0113(10)	0.0101(10)	-0.0006(8)	-0.0021(8)	-0.0009(8)
N4	0.0068(9)	0.0122(10)	0.0095(10)	-0.0003(8)	-0.0033(8)	0.0016(8)
N5	0.0073(10)	0.0109(10)	0.0119(10)	-0.0013(8)	0.0004(8)	-0.0003(8)
N6	0.0080(10)	0.0102(10)	0.0111(10)	-0.0020(8)	0.0014(8)	-0.0014(8)
C1	0.0077(11)	0.0142(12)	0.0123(12)	0.0006(9)	-0.0015(9)	-0.0029(10)
C2	0.0097(12)	0.0169(13)	0.0173(13)	-0.0035(10)	0.0027(10)	-0.0065(10)
C3	0.0181(13)	0.0138(13)	0.0176(13)	-0.0075(10)	0.0036(10)	-0.0015(10)
C4	0.0167(13)	0.0138(13)	0.0133(13)	-0.0013(10)	-0.0006(10)	0.0013(10)
C5	0.0108(12)	0.0133(12)	0.0078(11)	-0.0005(9)	0.0012(9)	-0.0024(9)
C6	0.0106(12)	0.0124(12)	0.0099(12)	-0.0010(9)	0.0018(9)	-0.0023(9)
C7	0.0138(12)	0.0136(13)	0.0126(12)	-0.0006(10)	0.0001(10)	0.0010(10)
C8	0.0088(12)	0.0216(14)	0.0116(12)	0.0044(10)	-0.0026(10)	-0.0008(10)
C9	0.0060(12)	0.0227(14)	0.0138(12)	-0.0016(10)	-0.0016(9)	-0.0029(10)
C10	0.0117(12)	0.0165(13)	0.0114(12)	-0.0039(10)	0.0010(9)	-0.0060(10)
C11	0.0089(12)	0.0126(12)	0.0149(12)	-0.0021(10)	-0.0020(9)	0.0001(10)
C12	0.0100(12)	0.0213(14)	0.0129(13)	-0.0001(10)	0.0012(10)	-0.0008(10)
C13	0.0116(12)	0.0191(13)	0.0134(13)	0.0030(10)	-0.0012(10)	-0.0061(11)
C14	0.0129(12)	0.0128(13)	0.0158(13)	-0.0028(10)	-0.0033(10)	-0.0024(10)
C15	0.0067(11)	0.0121(12)	0.0129(12)	0.0002(9)	-0.0046(9)	-0.0008(9)
C16	0.0074(11)	0.0130(12)	0.0128(12)	-0.0006(9)	-0.0047(9)	0.0011(9)
C17	0.0133(12)	0.0158(13)	0.0193(13)	-0.0045(10)	-0.0018(10)	-0.0028(11)
C18	0.0138(13)	0.0176(14)	0.0216(14)	-0.0070(10)	-0.0050(10)	0.0045(11)
C19	0.0115(12)	0.0238(14)	0.0117(13)	-0.0062(10)	-0.0016(10)	0.0045(10)
C20	0.0095(12)	0.0197(13)	0.0087(12)	-0.0016(10)	-0.0021(9)	0.0011(10)
C21	0.0065(11)	0.0113(12)	0.0114(12)	-0.0049(9)	0.0015(9)	0.0011(9)
C22	0.0064(11)	0.0107(12)	0.0130(12)	-0.0047(9)	0.0012(9)	-0.0002(9)
C23	0.0065(11)	0.0148(12)	0.0108(12)	-0.0038(9)	0.0001(9)	0.0014(9)
C24	0.0076(11)	0.0161(12)	0.0122(12)	-0.0046(9)	0.0026(9)	0.0027(10)
C25	0.0104(12)	0.0175(13)	0.0132(12)	-0.0036(10)	-0.0013(10)	0.0004(10)



Atom	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
C26	0.0148(13)	0.0142(13)	0.0169(13)	-0.0021(10)	0.0035(10)	-0.0014(10)
C27	0.0131(13)	0.0144(13)	0.0193(14)	0.0006(10)	0.0033(10)	0.0027(10)
C28	0.0123(13)	0.0221(14)	0.0151(13)	-0.0020(10)	-0.0015(10)	0.0056(11)
C29	0.0092(12)	0.0178(13)	0.0156(13)	-0.0041(10)	0.0001(10)	0.0027(10)
C30	0.0125(12)	0.0220(14)	0.0138(13)	-0.0044(10)	-0.0029(10)	0.0040(10)
C31	0.0139(12)	0.0194(13)	0.0112(12)	-0.0054(10)	-0.0009(10)	-0.0021(10)
C32	0.0091(11)	0.0145(12)	0.0123(12)	-0.0058(9)	0.0011(9)	0.0014(9)
C33	0.0110(12)	0.0153(12)	0.0101(12)	-0.0058(9)	0.0014(9)	0.0012(9)
C34	0.0143(13)	0.0174(13)	0.0098(12)	-0.0047(10)	-0.0027(10)	0.0012(10)
C35	0.0196(13)	0.0173(13)	0.0114(12)	-0.0066(11)	0.0021(10)	-0.0031(10)
C36	0.0159(13)	0.0156(13)	0.0131(12)	-0.0017(11)	0.0034(10)	-0.0011(10)
C37	0.0119(12)	0.0160(13)	0.0115(12)	-0.0031(10)	-0.0010(10)	-0.0008(10)
C38	0.0089(11)	0.0136(12)	0.0123(12)	-0.0038(9)	0.0030(9)	-0.0021(9)
C39	0.0250(15)	0.0174(14)	0.0183(14)	-0.0032(11)	-0.0114(12)	-0.0021(11)
C40	0.0193(15)	0.0345(18)	0.0257(16)	-0.0050(13)	-0.0004(12)	-0.0081(13)
N7	0.0230(13)	0.0307(14)	0.0220(12)	-0.0059(10)	-0.0045(10)	-0.0042(10)
C41	0.0508(22)	0.0267(18)	0.0250(17)	-0.0063(16)	0.0098(15)	-0.0029(14)
C42	0.0216(14)	0.0244(15)	0.0226(15)	-0.0014(12)	-0.0014(11)	0.0032(12)
N8	0.0321(14)	0.0346(15)	0.0315(14)	0.0035(11)	-0.0074(11)	-0.0087(12)
C43	0.1082(40)	0.0316(22)	0.0484(27)	-0.0148(25)	-0.0107(26)	-0.0081(20)
C44	0.0256(31)	0.0166(27)	0.0243(29)	-0.0104(24)	-0.0081(25)	-0.0002(23)
C45	0.0273(34)	0.0224(32)	0.0371(36)	0.0059(27)	-0.0053(27)	-0.0090(26)
N9	0.0304(29)	0.0297(28)	0.0372(30)	-0.0153(23)	-0.0105(24)	0.0094(23)
N10	0.0408(42)	0.0389(42)	0.0641(45)	0.0135(29)	0.0044(32)	0.0019(32)

The form of the displacement factor is:

$$\exp -2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}hla^*c^* + 2U_{23}klb^*c^*)$$

## Distances and Angles for

Bis 2-2'bipyridyl chrysenequinone diimine rhodium(III) chloride · 3CH<sub>3</sub>CN·2H<sub>2</sub>O

	Distance(Å)		Distance(Å)
Rh -N1	2.035(2)	C8 -H8	0.91(3)
Rh -N2	2.039(2)	C9 -C10	1.381(3)
Rh -N3	2.039(2)	C9 -H9	0.93(3)
Rh -N4	2.030(2)	C10 -H10	0.94(3)
Rh -N5	2.006(2)	C11 -C12	1.379(3)
Rh -N6	2.005(2)	C11 -H11	0.93(2)
H6 ... H25	1.96(4)	C12 -C13	1.375(3)
Cl3 ... O3	0.338(16)	C12 -H12	0.93(3)
Cl4 ... O4	0.427(15)	C13 -C14	1.385(3)
O4 -H4a	0.78(10)	C13 -H13	0.93(3)
O4 -H4b	0.73(12)	C14 -C15	1.383(3)
O5 -H5a	0.82(3)	C14 -H14	0.89(3)
O5 -H5b	0.88(4)	C15 -C16	1.470(3)
N1 -C1	1.355(3)	C16 -C17	1.387(3)
N1 -C5	1.355(3)	C17 -C18	1.385(4)
N2 -C6	1.356(3)	C17 -H17	0.92(3)
N2 -C10	1.340(3)	C18 -C19	1.378(4)
N3 -C11	1.344(3)	C18 -H18	0.95(3)
N3 -C15	1.362(3)	C19 -C20	1.373(3)
N4 -C16	1.358(3)	C19 -H19	0.88(3)
N4 -C20	1.344(3)	C20 -H20	0.94(2)
N5 -C21	1.291(3)	C21 -C22	1.497(3)
N5 -H5	0.85(3)	C21 -C38	1.457(3)
N6 -C22	1.295(3)	C22 -C23	1.463(3)
N6 -H6	0.86(3)	C23 -C24	1.443(3)
C1 -C2	1.380(3)	C23 -C32	1.401(3)
C1 -H1	0.95(2)	C24 -C25	1.420(3)
C2 -C3	1.378(4)	C24 -C29	1.429(3)
C2 -H2	0.96(3)	C25 -C26	1.369(3)
C3 -C4	1.389(4)	C25 -H25	0.93(2)
C3 -H3	0.91(3)	C26 -C27	1.408(4)
C4 -C5	1.386(3)	C26 -H26	0.95(3)
C4 -H4	0.89(3)	C27 -C28	1.361(4)
C5 -C6	1.470(3)	C27 -H27	0.94(3)
C6 -C7	1.387(3)	C28 -C29	1.422(3)
C7 -C8	1.389(3)	C28 -H28	0.94(3)
C7 -H7	0.89(2)	C29 -C30	1.412(3)
C8 -C9	1.383(3)	C30 -C31	1.363(4)

	Distance(Å)		Angle(°)
C30 -H30	1.00(3)	N1 -Rh -N2	80.0(1)
C31 -C32	1.420(3)	N1 -Rh -N3	94.9(1)
C31 -H31	0.91(3)	N1 -Rh -N4	172.4(1)
C32 -C33	1.486(3)	N1 -Rh -N5	87.7(1)
C33 -C34	1.400(3)	N1 -Rh -N6	97.1(1)
C33 -C38	1.411(3)	N2 -Rh -N3	87.7(1)
C34 -C35	1.381(3)	N2 -Rh -N4	94.2(1)
C34 -H34	0.90(3)	N2 -Rh -N5	97.1(1)
C35 -C36	1.388(4)	N2 -Rh -N6	174.5(1)
C35 -H35	0.96(3)	N3 -Rh -N4	79.9(1)
C36 -C37	1.383(3)	N3 -Rh -N5	174.8(1)
C36 -H36	0.95(3)	N3 -Rh -N6	97.2(1)
C37 -C38	1.400(3)	N4 -Rh -N5	97.9(1)
C37 -H37	0.95(3)	N4 -Rh -N6	89.2(1)
C39 -C40	1.455(4)	N5 -Rh -N6	78.0(1)
C39 -N7	1.145(4)	Rh -N1 -C1	125.5(2)
C40 -H40a	0.98(3)	Rh -N1 -C5	114.7(1)
C40 -H40b	0.99(3)	Rh -N2 -C6	115.0(1)
C40 -H40c	0.96(3)	Rh -N2 -C10	125.3(2)
C41 -C42	1.454(4)	Rh -N3 -C11	126.1(2)
C42 -N8	1.136(4)	Rh -N3 -C15	114.7(1)
C41 -H41a	0.98(3)	Rh -N4 -C16	115.2(1)
C41 -H41b	0.98(4)	Rh -N4 -C20	125.3(2)
C41 -H41c	0.94(3)	Rh -N5 -C21	117.2(2)
C43 -C44	1.257(7)	Rh -N5 -H5	116.3(21)
C43 -C45	1.275(8)	Rh -N6 -C22	117.6(2)
C43 -H43a	0.91(4)	Rh -N6 -H6	121.2(20)
C43 -H43b	0.82(5)	H4b -O4 -H4a	91(12)
C44 -N9	1.135(7)	H5b -O5 -H5a	111.3(32)
C45 -N10	1.150(9)	C5 -N1 -C1	119.6(2)
		C10 -N2 -C6	119.7(2)
		C15 -N3 -C11	119.2(2)
		C20 -N4 -C16	119.5(2)
		H5 -N5 -C21	125.2(21)
		H6 -N6 -C22	121.3(21)
		C2 -C1 -N1	121.3(2)
		H1 -C1 -N1	116.9(15)
		H1 -C1 -C2	121.7(15)

Angle(°)			Angle(°)				
C3	-C2	-C1	119.5(2)	H14	-C14	-C15	120.3(18)
H2	-C2	-C1	116.9(16)	C14	-C15	-N3	120.7(2)
H2	-C2	-C3	123.5(16)	C16	-C15	-N3	114.8(2)
C4	-C3	-C2	119.2(2)	C16	-C15	-C14	124.5(2)
H3	-C3	-C2	120.5(16)	C15	-C16	-N4	114.8(2)
H3	-C3	-C4	120.4(16)	C17	-C16	-N4	120.6(2)
C5	-C4	-C3	119.4(2)	C17	-C16	-C15	124.5(2)
H4	-C4	-C3	118.2(17)	C18	-C17	-C16	119.4(2)
H4	-C4	-C5	122.4(17)	H17	-C17	-C16	118.6(16)
C4	-C5	-N1	120.8(2)	H17	-C17	-C18	121.9(16)
C6	-C5	-N1	115.2(2)	C19	-C18	-C17	119.2(2)
C6	-C5	-C4	123.9(2)	H18	-C18	-C17	121.6(17)
C5	-C6	-N2	114.8(2)	H18	-C18	-C19	119.2(17)
C7	-C6	-N2	121.2(2)	C20	-C19	-C18	119.3(2)
C7	-C6	-C5	124.0(2)	H19	-C19	-C18	122.8(18)
C8	-C7	-C6	119.1(2)	H19	-C19	-C20	117.9(18)
H7	-C7	-C6	119.4(15)	C19	-C20	-N4	122.0(2)
H7	-C7	-C8	121.5(15)	H20	-C20	-N4	114.8(15)
C9	-C8	-C7	118.8(2)	H20	-C20	-C19	123.2(15)
H8	-C8	-C7	118.4(16)	C22	-C21	-N5	113.9(2)
H8	-C8	-C9	122.7(16)	C38	-C21	-N5	126.4(2)
C10	-C9	-C8	119.7(2)	C38	-C21	-C22	119.3(2)
H9	-C9	-C8	118.5(16)	C21	-C22	-N6	112.7(2)
H9	-C9	-C10	121.7(16)	C23	-C22	-N6	127.1(2)
C9	-C10	-N2	121.5(2)	C23	-C22	-C21	120.2(2)
H10	-C10	-N2	118.0(16)	C24	-C23	-C22	122.2(2)
H10	-C10	-C9	120.4(16)	C32	-C23	-C22	116.9(2)
C12	-C11	-N3	121.9(2)	C32	-C23	-C24	121.0(2)
H11	-C11	-N3	117.1(14)	C25	-C24	-C23	125.0(2)
H11	-C11	-C12	120.9(14)	C29	-C24	-C23	118.1(2)
C13	-C12	-C11	119.4(2)	C29	-C24	-C25	116.8(2)
H12	-C12	-C11	118.7(17)	C26	-C25	-C24	121.7(2)
H12	-C12	-C13	121.9(17)	H25	-C25	-C24	121.6(15)
C14	-C13	-C12	119.0(2)	H25	-C25	-C26	116.6(15)
H13	-C13	-C12	121.3(15)	C27	-C26	-C25	120.7(2)
H13	-C13	-C14	119.6(15)	H26	-C26	-C25	119.9(15)
C15	-C14	-C13	119.7(2)	H26	-C26	-C27	119.3(15)
H14	-C14	-C13	120.0(18)	C28	-C27	-C26	119.6(2)

	Angle(°)		Angle(°)
H27 -C27 -C26	115.3(15)	H40c -C40 -C39	105.4(20)
H27 -C27 -C28	125.0(15)	H40b -C40 -H40a	107.2(26)
C29 -C28 -C27	121.0(2)	H40c -C40 -H40a	113.5(27)
H28 -C28 -C27	120.1(16)	H40c -C40 -H40b	113.8(27)
H28 -C28 -C29	119.0(16)	H41a -C41 -C42	109.3(19)
C28 -C29 -C24	119.9(2)	H41b -C41 -C42	113.8(23)
C30 -C29 -C24	118.8(2)	H41c -C41 -C42	109.4(20)
C30 -C29 -C28	121.2(2)	H41b -C41 -H41a	107.9(30)
C31 -C30 -C29	122.0(2)	H41c -C41 -H41a	114.2(28)
H30 -C30 -C29	116.7(16)	H41c -C41 -H41b	102.3(31)
H30 -C30 -C31	121.2(16)	N8 -C42 -C41	179.5(3)
C32 -C31 -C30	121.1(2)	C45 ...C43 ...C44	95.2(5)
H31 -C31 -C30	117.8(16)	H43a -C43 -C44	112.1(25)
H31 -C31 -C32	121.2(16)	H43b -C43 -C44	113.5(35)
C31 -C32 -C23	118.5(2)	H43a -C43 -C45	123.2(25)
C33 -C32 -C23	122.1(2)	H43b -C43 -C45	109.8(35)
C33 -C32 -C31	119.4(2)	H43b -C43 -H43a	103.3(43)
C34 -C33 -C32	121.6(2)	N9 -C44 -C43	177.2(6)
C38 -C33 -C32	120.9(2)	N10 -C45 -C43	174.1(7)
C38 -C33 -C34	117.4(2)		
C35 -C34 -C33	121.0(2)		
H34 -C34 -C33	119.5(16)		
H34 -C34 -C35	119.5(16)		
C36 -C35 -C34	121.2(2)		
H35 -C35 -C34	120.9(17)		
H35 -C35 -C36	117.7(17)		
C37 -C36 -C35	119.2(2)		
H36 -C36 -C35	119.2(15)		
H36 -C36 -C37	121.6(15)		
C38 -C37 -C36	120.1(2)		
H37 -C37 -C36	118.6(15)		
H37 -C37 -C38	121.3(15)		
C33 -C38 -C21	118.2(2)		
C37 -C38 -C21	120.6(2)		
C37 -C38 -C33	121.0(2)		
N7 -C39 -C40	178.9(3)		
H40a -C40 -C39	108.3(19)		
H40b -C40 -C39	108.4(19)		

## Distances and Angles Involving Hydrogen Bonding for

Bis 2-2'-bipyridyl chrysenequinone diimine rhodium(III) chloride · 3CH<sub>3</sub>CN·2H<sub>2</sub>O

		Distance(Å)			Angle(°)
Cl1	...N5	3.128(2)	O5	...Cl1 <sup>i</sup>	70.5(1)
Cl1	...H5	2.28(3)	N6	...Cl2	80.7(1)
Cl1 <sup>i</sup>	...O5	3.276(2)	O3	...Cl3 <sup>ii</sup>	95.6(4)
Cl1 <sup>i</sup>	...H5b	2.42(4)	O4	...Cl4 <sup>iii</sup>	101.6(4)
Cl2	...O5	3.244(2)	Cl4	...O3	98.1(4)
Cl2	...N6	3.034(2)	Cl4 <sup>iii</sup>	...O4	98.1(4)
Cl2	...H5a	2.42(3)	Cl2	...O5	116.4(1)
Cl2	...H6	2.36(3)	O4	-H4a	165.5(95)
Cl3	...O4	3.129(15)	O4	-H4b	152.6(123)
Cl3	...H4b	2.46(12)	O5	-H5a	175.7(31)
Cl3 <sup>ii</sup>	...O3	3.103(16)	O5	-H5b	164.7(31)
Cl4	...O3	3.184(16)	N5	-H5	171.9(29)
Cl4 <sup>iii</sup>	...O4	3.124(15)	N6	-H6	135.5(26)
Cl4 <sup>iii</sup>	...H4a	2.36(10)	H4a	-O4	91.(12)
O4	-H4a	0.78(10)	H5a	-O5	111.(3)
O4	-H4b	0.73(12)			
O5	-H5a	0.82(3)			
O5	-H5b	0.88(4)			
N5	-H5	0.85(3)			
N6	-H6	0.86(3)			

Symmetry code (i) 1 + x, y, z (ii) 1 - x, -y, -z (iii) 2 - x, -y, -z