Inorganic Chemistry
including bioinorganic chemistry
Inorg. Chem., 1996, 35(21), 5986-5994, DOI:10.1021/ic9513494

Table S-I - Crystallographic Data for Compounds **4a**·1/2C_7H_8 and **5b**·CH_2Cl_2

	4a·1/2C_7H_8	**5b**·CH_2Cl_2
mol formula	$[C_{47}H_{43}AuNOP_2Pd][BF_4]\cdot 1/2C_7H_8$	$C_{40}H_{36}NiCoI_2P_2O_2\cdot CH_2Cl_2$
mol wt	1136.05	1066.3
cryst system	triclinic	monoclinic
space group	$P\bar{1}$	$P2_1/n$
diffractometer	Philips PW 1100	Enraf Nonius CAD4
radiatn	graphite-monochromated (Mo-Kα, λ = 0.71073 Å)	
a, Å	16.778(4)	12.940(1)
b, Å	14.269(5)	18.329(2)
c, Å	10.838(6)	18.495(2)
α, deg	79.27(4)	-
β, deg	71.59(3)	91.627(8)
γ, deg	72.68(2)	-
V, Å^3	2338(2)	4384.8(8)
Z	2	4
D_{calcd}, g cm^{-3}	1.614	1.617
F(000)	1122	2100
cryst dimens ,mm	0.17x0.21x0.25	0.1x0.1x0.14
μ(Mo-Kα) , cm^{-1}	36.4	24.9
scan speed, deg min^{-1}	3-9.6	0.25-0.5
scan width, deg	1.20 + 0.346 tan θ	0.8 + 0.346 tan θ
scan mode	ω/2θ	ω/2θ
θ range, deg	3-26	2-23
reflectns measd	±*h*,±*k*,*l*	*h*,*k*,±*l*
unique total data	9681	6079
unique obsd data	7240 [$I > 2\sigma(I)$]	3644 [$I > 6\sigma(I)$]
no. of variables	567	479
R^a	0.0363	0.040
$R_W{}^b$	0.0406	0.038

^{a} $R = \Sigma||F_o|-|F_c||/\Sigma|F_o|$. ^{b} $R_W = [\Sigma w(|F_o|-|F_c|)^2/\Sigma w(F_o)^2]^{1/2}$

Table S-II. Fractional Atomic Coordinates ($x10^4$) and Equivalent Isotropic Thermal Parameters ($Å^2x10^4$) with E.s.d.'s in Parentheses for the Non-Hydrogen Atoms of Complex **4a**·1/2C_7H_8.

	x/a	y/b	z/c	Ueq[a]
Au	6658(1)	1417(1)	149(1)	535(1)
Pd	8565(1)	2377(1)	344(1)	494(2)
P(1)	7656(1)	1705(1)	2010(1)	434(5)
P(2)	5679(1)	2134(1)	-1015(1)	585(6)
O(1)	8867(2)	986(3)	-373(4)	612(15)
N(1)	9399(3)	2919(4)	-1388(5)	655(20)
C(1)	7597(3)	721(4)	1219(5)	463(18)
C(2)	8351(3)	446(4)	142(5)	527(20)
C(3)	8372(4)	3706(4)	878(6)	721(24)
C(4)	8911(5)	4244(6)	-14(9)	1233(41)
C(5)	8849(5)	5222(5)	184(10)	1148(44)
C(6)	8286(5)	5636(5)	1250(8)	1072(38)
C(7)	7766(7)	5145(6)	2112(8)	1210(43)
C(8)	7802(5)	4161(5)	1954(6)	923(32)
C(9)	9664(7)	3702(7)	-1011(11)	1707(55)
C(10)	8838(6)	3493(8)	-2188(9)	1241(50)
C(11)	10106(8)	2236(8)	-1993(12)	1728(64)
C(12)	8055(3)	1153(4)	3439(5)	545(20)
C(13)	8052(5)	1761(6)	4281(7)	1082(36)
C(14)	8384(6)	1384(7)	5335(8)	1360(45)
C(15)	8708(6)	407(8)	5536(8)	1245(47)
C(16)	8695(6)	-223(7)	4758(8)	1248(45)
C(17)	8380(5)	148(5)	3671(7)	891(32)
C(18)	6530(3)	2354(4)	2698(5)	482(19)
C(19)	6023(3)	1915(4)	3802(5)	540(21)
C(20)	5132(4)	2347(5)	4213(6)	703(25)
C(21)	4755(4)	3194(5)	3597(7)	745(28)
C(22)	5264(4)	3648(5)	2500(7)	809(30)
C(23)	6151(4)	3215(4)	2045(6)	584(23)
C(24)	8553(4)	-498(4)	-452(5)	560(22)
C(25)	9369(4)	-826(5)	-1298(6)	744(28)
C(26)	9569(6)	-1679(5)	-1904(8)	891(36)

Table S-II. (continued)

C(27)	8928(7)	-2176(6)	-1663(8)	1100(45)
C(28)	8160(6)	-1880(6)	-842(10)	1255(45)
C(29)	7954(5)	-1033(4)	-213(7)	844(30)
C(30)	6037(4)	3049(4)	-2307(5)	587(22)
C(31)	6604(5)	3554(5)	-2197(7)	924(31)
C(32)	6875(5)	4244(5)	-3176(8)	1056(38)
C(33)	6613(5)	4428(5)	-4298(7)	840(35)
C(34)	6050(6)	3975(5)	-4413(7)	997(37)
C(35)	5760(5)	3273(5)	-3423(6)	851(30)
C(36)	4617(4)	2760(4)	-28(5)	622(23)
C(37)	4160(4)	3670(5)	-399(7)	771(30)
C(38)	3355(5)	4096(5)	415(8)	868(34)
C(39)	3026(5)	3610(5)	1591(7)	848(32)
C(40)	3473(5)	2709(6)	1963(7)	852(33)
C(41)	4263(4)	2276(5)	1163(7)	748(29)
C(42)	5512(4)	1253(4)	-1850(6)	693(24)
C(43)	6256(5)	586(5)	-2525(7)	866(31)
C(44)	6173(7)	-31(5)	-3263(7)	1118(43)
C(45)	5370(7)	-35(6)	-3312(8)	1244(42)
C(46)	4627(6)	598(6)	-2629(8)	1341(44)
C(47)	4697(5)	1240(5)	-1910(7)	974(32)
B(1)	7369(5)	7822(8)	3985(10)	953(42)
F(1)	7983(5)	7788(5)	4636(8)	2391(48)
F(2)	6679(4)	8500(6)	4539(8)	2563(47)
F(3)	7099(6)	7042(7)	4128(11)	3477(64)
F(4)	7701(6)	8095(8)	2783(7)	2917(64)
C(48)	500(7)	4066(7)	4603(10)	1263(33)
C(49)	787(6)	4524(7)	5140(10)	1156(30)
C(50)	342(7)	5478(8)	5574(11)	1436(38)
C(51)	622(10)	5951(9)	6079(15)	933(45)

[a] Equivalent Isotropic U defined as one-third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

Table S-III: Positional Parameters and Their Estimated Standard Deviations for **5b**

Atom	x	y	z	B(Å^2)
I1	0.03373(6)	0.11559(3)	0.44904(4)	4.79(2)
I2	-0.14968(6)	0.18696(4)	0.26261(4)	5.37(2)
Co	-0.06526(9)	0.21808(6)	0.38522(6)	3.04(3)
Ni	-0.12976(8)	0.36600(5)	0.38020(6)	2.56(2)
P1	-0.2870(2)	0.4018(1)	0.3854(1)	2.90(5)
P2	-0.0673(2)	0.4492(1)	0.3116(1)	2.88(5)
O1	-0.1675(4)	0.2824(3)	0.4374(3)	2.7(1)
O2	0.0006(4)	0.3173(3)	0.3772(3)	2.7(1)
C1	0.0714(6)	0.3446(5)	0.3329(4)	2.8(2)
C2	0.0561(7)	0.4088(5)	0.2993(5)	3.6(2)
C3	-0.3349(7)	0.3281(4)	0.4364(5)	3.4(2)
C4	-0.2663(6)	0.2752(4)	0.4552(4)	2.8(2)
C5	-0.2938(7)	0.2098(4)	0.4962(4)	3.1(2)
C6	-0.2195(8)	0.1702(5)	0.5335(5)	4.1(2)
C7	-0.2470(8)	0.1067(5)	0.5711(5)	4.6(3)
C8	-0.3469(8)	0.0819(5)	0.5712(5)	4.1(3)
C9	-0.4198(8)	0.1237(6)	0.5363(6)	5.2(3)
C10	-0.3966(8)	0.1862(5)	0.4984(5)	4.7(3)
C11	-0.3747(9)	0.0105(6)	0.6080(6)	6.4(3)
C12	0.1664(7)	0.3008(4)	0.3248(5)	3.2(2)
C13	0.2052(7)	0.2589(5)	0.3813(5)	3.6(2)
C14	0.2939(7)	0.2170(5)	0.3731(6)	4.2(3)
C15	0.3461(7)	0.2167(5)	0.3092(6)	4.3(3)
C16	0.3076(8)	0.2585(6)	0.2536(6)	5.3(3)
C17	0.2186(7)	0.3001(5)	0.2595(6)	4.7(3)
C18	0.4417(7)	0.1687(5)	0.3002(6)	5.5(3)
C19	-0.0490(7)	0.5392(4)	0.3499(5)	3.2(2)
C20	-0.1312(7)	0.5888(5)	0.3532(5)	3.8(2)
C21	-0.1195(9)	0.6550(5)	0.3877(5)	4.9(3)
C22	-0.025(1)	0.6716(6)	0.4203(5)	5.7(3)
C23	0.0573(9)	0.6242(6)	0.4166(6)	5.7(3)

Table 3 cont. (cont.)

Atom	x	y	z	B(Å^2)
C24	0.0466(7)	0.5582(5)	0.3823(5)	4.6(3)
C25	-0.1267(6)	0.4586(4)	0.2220(5)	3.2(2)
C26	-0.1539(7)	0.3950(5)	0.1857(5)	4.0(2)
C27	-0.1982(7)	0.3976(6)	0.1175(5)	4.3(3)
C28	-0.2152(8)	0.4644(7)	0.0847(5)	5.2(3)
C29	-0.1876(7)	0.5270(5)	0.1189(5)	4.3(3)
C30	-0.1432(6)	0.5255(5)	0.1875(5)	3.4(2)
C31	-0.3138(7)	0.4845(4)	0.4348(5)	3.1(2)
C32	-0.4046(7)	0.5228(5)	0.4265(5)	4.8(3)
C33	-0.4234(9)	0.5824(6)	0.4692(7)	6.8(4)
C34	-0.351(1)	0.6042(6)	0.5210(6)	6.8(4)
C35	-0.2623(9)	0.5671(6)	0.5304(6)	5.7(3)
C36	-0.2431(8)	0.5060(5)	0.4871(5)	5.0(3)
C37	-0.3599(6)	0.4047(5)	0.3003(5)	3.2(2)
C38	-0.3746(7)	0.4695(5)	0.2634(5)	3.9(2)
C39	-0.4238(8)	0.4707(6)	0.1959(6)	4.8(3)
C40	-0.4597(8)	0.4062(8)	0.1668(6)	5.9(3)
C41	-0.4444(8)	0.3401(6)	0.2036(6)	5.5(3)
C42	-0.3951(7)	0.3403(5)	0.2704(5)	4.2(3)
Cl1	0.1552(4)	0.1333(4)	0.1393(3)	14.4(2)
Cl2	0.1762(4)	0.0043(4)	0.2248(3)	15.8(2)
C43	0.133(1)	0.0976(9)	0.2206(8)	10.3(6)

Anisotropically refined atoms are given in the form of the isotropic equivalent displacement parameter defined as:
(4/3) * [a2*B(1,1) + b2*B(2,2) + c2*B(3,3) + ab(cos gamma)*B(1,2) + ac(cos beta)*B(1,3) + bc(cos alpha)*B(2,3)]

Table S-IV. Fractional Atomic Coordinates ($x10^4$) and Isotropic Thermal Parameters ($x10^4$) with E.s.d.'s in Parentheses for the Hydrogen Atoms of 4a · ½ C_7H_8

	x/a	y/b	z/c	U
H1	7500	178	1869	1055(255)
H5	9211	5591	-463	764(108)
H6	8265	6294	1366	764(108)
H7	7361	5452	2862	764(108)
H8	7428	3806	2600	764(108)
H91	9837	4153	-1758	2454(298)
H92	10140	3406	-636	2454(298)
H101	8819	2841	-2262	1687(145)
H102	9169	3754	-3006	1687(145)
H103	8258	3911	-1968	1687(145)
H111	10492	1936	-1457	1687(145)
H112	10416	2527	-2805	1687(145)
H113	9881	1743	-2163	1687(145)
H13	7820	2460	4127	1429(142)
H14	8363	1812	5938	1429(142)
H15	8971	156	6239	1429(142)
H16	8900	-922	4960	1429(142)
H17	8390	-284	3082	1429(142)
H19	6286	1319	4260	616(83)
H20	4782	2034	4961	616(83)
H21	4143	3487	3909	616(83)
H22	4997	4250	2057	616(83)
H23	6497	3523	1287	616(83)
H25	9790	-453	-1467	943(105)
H26	10140	-1923	-2464	943(105)
H27	9041	-2738	-2119	943(105)
H28	7736	-2250	-672	943(105)
H29	7395	-824	396	943(105)
H31	6800	3424	-1425	1030(112)
H32	7255	4597	-3086	1030(112)
H33	6832	4888	-4997	1030(112)
H34	5840	4140	-5174	1030(112)
H35	5374	2933	-3526	1030(112)
H37	4393	4018	-1220	931(102)
H38	3022	4731	144	931(102)
H39	2483	3926	2163	931(102)
H40	3232	2367	2784	931(102)
H41	4574	1624	1422	931(102)
H43	6817	569	-2459	826(97)
H44	6685	-460	-3762	826(97)
H45	5322	-491	-3818	826(97)
H46	4068	588	-2680	826(97)
H47	4185	1684	-1438	826(97)

Table 3-7. Positional Parameters (Estimated Standard Deviation) for **5b**·CH_2Cl_2

Atom	x	y	z	B(Å^2)
H2	0.1141(7)	0.4335(5)	0.2663(5)	5*
H3	-0.4148(7)	0.3250(4)	0.4515(5)	5*
H6	-0.1399(8)	0.1875(5)	0.5320(5)	5*
H7	-0.1887(8)	0.0766(5)	0.6015(5)	5*
H9	-0.4994(8)	0.1063(6)	0.5381(6)	5*
H10	-0.4566(8)	0.2176(5)	0.4711(5)	5*
H13	0.1664(7)	0.2587(5)	0.4322(5)	5*
H14	0.3219(7)	0.1834(5)	0.4175(6)	5*
H16	0.3482(8)	0.2587(6)	0.2034(6)	5*
H17	0.1893(7)	0.3314(5)	0.2139(6)	5*
H20	-0.2046(7)	0.5749(5)	0.3274(5)	5*
H21	-0.1831(9)	0.6932(5)	0.3895(5)	5*
H22	-0.015(1)	0.7225(6)	0.4493(5)	5*
H23	0.1306(9)	0.6389(6)	0.4420(6)	5*
H24	0.1120(7)	0.5220(5)	0.3787(5)	5*
H26	-0.1439(7)	0.3429(5)	0.2123(5)	5*
H27	-0.2156(7)	0.3478(6)	0.0883(5)	5*
H28	-0.2521(8)	0.4670(7)	0.0316(5)	5*
H29	-0.2002(7)	0.5788(5)	0.0924(5)	5*
H30	-0.1223(6)	0.5756(5)	0.2150(5)	5*
H32	-0.4612(7)	0.5051(5)	0.3862(5)	5*
H33	-0.4934(9)	0.6135(6)	0.4599(7)	5*
H34	-0.371(1)	0.6487(6)	0.5564(6)	5*
H35	-0.2054(9)	0.5860(6)	0.5700(6)	5*
H36	-0.1722(8)	0.4756(5)	0.4945(5)	5*
H38	-0.3480(7)	0.5197(5)	0.2882(5)	5*
H39	-0.4319(8)	0.5214(6)	0.1667(6)	5*
H40	-0.5013(8)	0.4080(8)	0.1154(6)	5*
H41	-0.4713(8)	0.2900(6)	0.1787(6)	5*
H42	-0.3837(7)	0.2903(5)	0.3003(5)	5*
H431	0.171(1)	0.1291(9)	0.2629(8)	5*
H432	0.050(1)	0.0981(9)	0.2281(8)	5*

Starred atoms were refined isotropically.

Table S-VI Anisotropic Thermal Parameters($\times 10^4$) with E.s.d.'s in Parentheses for the non-Hydrogen Atoms of $4a \cdot \frac{1}{2} C_7H_8$
They are in the form:

$$\exp(-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2}+\ldots+2U_{12}hka^*b^*+..))$$

	U_{11}orU	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Au	415(1)	416(1)	407(1)	44(1)	147(1)	100(1)
Pd	384(2)	419(2)	352(2)	5(2)	43(2)	193(2)
P(1)	361(7)	357(6)	302(6)	10(5)	59(5)	133(5)
P(2)	487(8)	440(7)	416(8)	40(6)	182(6)	106(6)
O(1)	464(21)	488(21)	477(22)	99(18)	35(17)	208(18)
N(1)	453(27)	653(31)	412(26)	87(23)	32(21)	265(24)
C(1)	349(25)	368(25)	355(26)	9(21)	113(21)	121(21)
C(2)	376(27)	440(28)	414(29)	52(23)	129(23)	94(22)
C(3)	553(34)	464(31)	577(36)	56(27)	164(29)	292(27)
C(4)	837(55)	638(43)	1149(69)	197(44)	407(50)	481(42)
C(5)	818(54)	547(42)	1358(83)	61(48)	70(55)	388(40)
C(6)	926(56)	561(41)	926(58)	25(40)	191(47)	443(41)
C(7)	1350(76)	643(45)	722(50)	204(40)	299(51)	292(49)
C(8)	1037(55)	555(37)	473(35)	69(30)	112(36)	408(38)
C(9)	1300(75)	1072(67)	1295(84)	261(66)	382(67)	798(61)
C(10)	768(59)	1561(90)	729(56)	518(59)	10(46)	55(58)
C(11)	1321(90)	989(74)	1474(99)	250(67)	997(76)	44(64)
C(12)	381(27)	520(30)	373(28)	30(23)	58(22)	192(23)
C(13)	1060(59)	738(47)	610(42)	83(35)	459(42)	166(42)
C(14)	1177(68)	1063(66)	787(53)	171(47)	621(51)	137(54)
C(15)	973(62)	1397(85)	557(45)	36(50)	444(45)	94(58)
C(16)	1165(72)	852(56)	802(57)	107(46)	562(56)	89(50)
C(17)	797(48)	620(41)	644(45)	86(34)	352(38)	35(35)
C(18)	386(26)	390(27)	338(26)	56(21)	91(21)	126(22)
C(19)	450(29)	438(29)	407(30)	26(23)	63(24)	124(23)
C(20)	424(31)	713(40)	509(34)	163(30)	42(26)	213(29)
C(21)	391(31)	650(40)	781(46)	225(36)	66(31)	45(29)
C(22)	650(41)	461(34)	764(47)	140(33)	202(37)	118(31)
C(23)	541(34)	435(30)	441(32)	10(25)	88(27)	93(26)
C(24)	496(31)	364(27)	442(31)	92(23)	165(26)	46(23)
C(25)	660(41)	674(41)	481(36)	140(31)	54(31)	91(33)
C(26)	960(58)	577(42)	699(49)	196(37)	34(43)	0(41)
C(27)	1318(79)	559(45)	744(55)	298(41)	150(53)	68(50)
C(28)	1023(66)	634(46)	1152(72)	286(47)	357(58)	253(45)
C(29)	676(41)	489(34)	779(47)	190(32)	188(36)	138(31)
C(30)	519(32)	466(30)	398(30)	60(24)	115(25)	104(25)
C(31)	811(47)	568(37)	711(45)	5(33)	273(38)	261(34)
C(32)	867(52)	627(43)	941(61)	50(41)	149(45)	374(39)
C(33)	985(59)	587(41)	499(42)	44(33)	53(40)	120(40)
C(34)	1242(67)	644(43)	415(36)	24(32)	224(40)	234(44)
C(35)	809(45)	709(42)	452(35)	5(31)	188(33)	234(36)
C(36)	516(32)	482(31)	433(31)	54(25)	176(26)	120(26)
C(37)	628(41)	652(42)	623(44)	29(35)	156(35)	29(33)
C(38)	674(45)	608(41)	840(54)	8(38)	152(40)	103(35)
C(39)	556(40)	775(47)	728(49)	230(40)	45(35)	113(35)
C(40)	652(44)	855(52)	595(42)	34(38)	39(35)	179(39)
C(41)	655(41)	556(38)	605(41)	72(32)	79(33)	120(32)

Table S-VI (cont.)

C(42)	641(36)	461(30)	461(33)	21(26)	216(29)	180(27)
C(43)	803(47)	568(38)	610(41)	118(32)	221(36)	175(34)
C(44)	1392(81)	501(38)	640(47)	125(34)	253(50)	276(45)
C(45)	1372(76)	600(44)	667(48)	50(36)	482(51)	461(50)
C(46)	1130(68)	871(56)	834(56)	96(47)	537(52)	507(53)
C(47)	727(45)	732(44)	694(44)	16(36)	353(37)	298(37)
B(1)	497(44)	1059(70)	791(62)	91(53)	82(42)	159(45)
F(1)	1505(55)	1700(61)	2314(83)	144(56)	1114(56)	43(45)
F(2)	1061(42)	2397(76)	2267(78)	1459(66)	575(47)	293(46)
F(3)	2222(82)	1948(69)	3150(112)	1276(74)	948(77)	1274(65)
F(4)	2133(80)	3693(126)	944(48)	30(62)	151(51)	1373(83)
C(48)	1263(33)					
C(49)	1156(30)					
C(50)	1436(38)					
C(51)	933(45)					

Table S-VII: General Displacement Parameter Expressions (U's) for **5b**·CH_2Cl_2

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
I1	0.0787(5)	0.0414(4)	0.0614(4)	0.0039(1)	-0.0059(2)	0.0074(3)
I2	0.0956(6)	0.0437(4)	0.0636(5)	-0.0011(1)	-0.0151(2)	-0.0046(3)
Co	0.0445(8)	0.0277(6)	0.0431(7)	0.0007(2)	0.0001(3)	0.0000(4)
Ni	0.0343(6)	0.0244(5)	0.0384(6)	0.0012(2)	0.0001(2)	-0.0001(3)
P1	0.038(1)	0.029(1)	0.043(1)	0.0002(4)	0.0013(6)	0.0015(7)
P2	0.034(1)	0.026(1)	0.049(1)	0.0031(4)	-0.0011(6)	-0.0014(7)
O1	0.036(4)	0.029(3)	0.039(3)	0.0022(9)	0.001(1)	-0.002(2)
O2	0.035(3)	0.024(3)	0.044(3)	0.0018(9)	0.002(1)	0.001(2)
C1	0.032(5)	0.038(5)	0.037(5)	-0.001(1)	-0.001(2)	-0.006(3)
C2	0.043(6)	0.045(6)	0.048(6)	0.005(2)	0.005(2)	0.006(3)
C3	0.036(5)	0.038(5)	0.055(6)	0.003(2)	0.009(2)	0.005(3)
C4	0.031(5)	0.034(5)	0.040(5)	-0.001(1)	0.007(2)	-0.007(3)
C5	0.043(6)	0.037(5)	0.038(5)	-0.002(1)	0.006(2)	-0.008(3)
C6	0.061(7)	0.042(6)	0.051(6)	0.004(2)	-0.001(3)	-0.010(4)
C7	0.077(8)	0.048(6)	0.048(6)	0.005(2)	-0.000(3)	-0.003(4)
C8	0.063(7)	0.045(6)	0.049(6)	-0.001(2)	0.008(3)	-0.009(4)
C9	0.056(7)	0.061(7)	0.081(8)	0.001(2)	0.015(3)	-0.010(4)
C10	0.055(7)	0.050(6)	0.074(7)	0.004(2)	0.009(3)	-0.001(4)

Table S-VII: General Displacement Parameter Expressions (U's) for **5b**·CH_2Cl_2

(Continued)

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
C11	0.11(1)	0.055(7)	0.082(8)	0.007(2)	0.019(3)	-0.024(5)
C12	0.038(5)	0.030(5)	0.052(6)	0.000(2)	-0.001(2)	-0.004(3)
C13	0.045(6)	0.041(5)	0.052(6)	0.001(2)	-0.000(2)	0.002(3)
C14	0.048(6)	0.046(6)	0.066(7)	0.002(2)	-0.001(3)	0.005(3)
C15	0.045(6)	0.044(6)	0.076(8)	-0.000(2)	0.008(3)	-0.003(3)
C16	0.055(7)	0.073(7)	0.075(8)	0.005(2)	0.015(3)	0.014(4)
C17	0.052(7)	0.058(7)	0.067(7)	0.006(2)	0.008(3)	0.005(4)
C18	0.038(6)	0.063(7)	0.110(9)	0.001(2)	0.008(3)	0.015(4)
C19	0.044(6)	0.038(5)	0.039(5)	0.002(1)	-0.001(2)	-0.001(3)
C20	0.047(6)	0.034(5)	0.065(7)	0.001(2)	-0.004(3)	0.002(3)
C21	0.079(8)	0.040(6)	0.067(7)	-0.001(2)	-0.003(3)	-0.002(4)
C22	0.12(1)	0.040(6)	0.056(7)	-0.002(2)	-0.014(3)	-0.000(5)
C23	0.088(9)	0.058(7)	0.070(7)	0.001(2)	-0.023(3)	-0.013(5)
C24	0.052(7)	0.047(6)	0.076(7)	0.003(2)	-0.012(3)	0.001(4)
C25	0.045(6)	0.028(5)	0.048(6)	0.000(2)	0.002(2)	-0.001(3)
C26	0.055(6)	0.044(6)	0.051(6)	0.000(2)	0.002(2)	0.001(3)
C27	0.066(7)	0.064(7)	0.033(6)	-0.005(2)	-0.001(2)	-0.005(4)
C28	0.059(7)	0.099(9)	0.037(6)	0.005(2)	0.000(3)	-0.005(5)

Table S-VII: General Displacement Parameter Expressions (U's) for **5b**·CH_2Cl_2

(Continued)

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
C29	0.055(7)	0.053(6)	0.054(7)	0.005(2)	-0.003(3)	-0.001(4)
C30	0.037(5)	0.040(5)	0.052(6)	0.004(2)	-0.001(2)	-0.004(3)
C31	0.035(6)	0.033(5)	0.049(6)	0.000(1)	0.004(2)	0.002(3)
C32	0.050(7)	0.065(7)	0.068(7)	-0.010(2)	-0.003(3)	0.012(4)
C33	0.073(8)	0.092(9)	0.092(9)	-0.016(3)	-0.002(4)	0.024(5)
C34	0.12(1)	0.066(7)	0.071(8)	-0.012(2)	-0.003(4)	0.023(6)
C35	0.090(9)	0.058(7)	0.069(8)	-0.009(2)	-0.016(3)	0.009(5)
C36	0.067(7)	0.061(7)	0.060(7)	-0.001(2)	-0.011(3)	0.007(4)
C37	0.035(5)	0.041(5)	0.045(6)	0.000(2)	0.001(2)	-0.003(3)
C38	0.044(6)	0.049(6)	0.053(6)	0.002(2)	-0.002(2)	0.001(3)
C39	0.054(7)	0.073(8)	0.056(7)	0.002(2)	-0.001(3)	0.007(4)
C40	0.046(7)	0.12(1)	0.060(8)	-0.004(3)	-0.003(3)	-0.001(5)
C41	0.077(8)	0.069(8)	0.062(8)	-0.010(2)	-0.002(3)	-0.014(5)
C42	0.060(7)	0.042(6)	0.059(7)	-0.001(2)	0.003(3)	-0.007(3)
Cl1	0.150(4)	0.276(7)	0.121(4)	0.001(1)	-0.007(2)	-0.054(3)
Cl2	0.133(4)	0.250(7)	0.219(6)	0.004(2)	0.020(2)	0.043(3)
C43	0.10(1)	0.18(2)	0.11(1)	-0.012(4)	0.003(5)	-0.019(8)

The form of the anisotropic displacement parameter is:

exp[-2PI2{h2a2U(1,1) + k2b2U(2,2) + l2c2U(3,3) + 2hkabU(1,2) + 2hlacU(1,3) + 2klbcU(2,3)}] where a,b, and c are reciprocal lattice constants.

Table S-VIII Complete list of bond distances (Å) and angles (deg) of 4a

Au	-	P2	2.272(2)
Au	-	C1	2.146(6)
Au	-	C2	2.763(5)
Pd	-	P1	2.234(2)
Pd	-	O1	2.128(5)
Pd	-	N1	2.127(5)
Pd	-	C3	1.990(7)
P1	-	C1	1.817(7)
P1	-	C12	1.831(6)
P1	-	C18	1.819(5)
P2	-	C30	1.811(5)
P2	-	C36	1.822(5)
P2	-	C42	1.809(8)
O1	-	C2	1.260(7)
N1	-	C9	1.481(15)
N1	-	C10	1.449(11)
N1	-	C11	1.358(11)
C1	-	C2	1.435(6)
C2	-	C24	1.502(9)
C3	-	C4	1.388(10)
C3	-	C8	1.380(8)
C4	-	C5	1.420(12)
C4	-	C9	1.493(12)
C5	-	C6	1.345(11)
C6	-	C7	1.315(12)
C7	-	C8	1.427(12)
C12	-	C13	1.369(11)
C12	-	C17	1.380(8)
C13	-	C14	1.378(13)
C14	-	C15	1.340(14)
C15	-	C16	1.351(16)
C16	-	C17	1.394(13)
C18	-	C19	1.394(7)
C18	-	C23	1.382(7)
C19	-	C20	1.395(7)
C20	-	C21	1.348(9)
C21	-	C22	1.401(9)
C22	-	C23	1.394(8)
C24	-	C25	1.385(8)
C24	-	C29	1.371(11)
C25	-	C26	1.393(11)
C26	-	C27	1.391(16)
C27	-	C28	1.312(12)
C28	-	C29	1.398(12)
C30	-	C31	1.396(12)
C30	-	C35	1.380(10)
C31	-	C32	1.369(10)
C32	-	C33	1.375(13)
C33	-	C34	1.339(14)
C34	-	C35	1.397(10)
C36	-	C37	1.358(8)
C36	-	C41	1.387(8)
C37	-	C38	1.389(9)

Table S-VIII(cont.)

C38	- C39	1.366(10)
C39	- C40	1.342(10)
C40	- C41	1.370(9)
C42	- C43	1.405(8)
C42	- C47	1.395(12)
C43	- C44	1.356(13)
C44	- C45	1.367(17)
C45	- C46	1.383(11)
C46	- C47	1.359(14)
B1	- F1	1.406(15)
B1	- F2	1.322(11)
B1	- F3	1.288(16)
B1	- F4	1.281(12)
C48	- C49	1.226(19)
C49	- C50	1.429(14)
C50	- C51	1.210(24)

C1	-Au	-C2	30.9(2)
P2	-Au	-C2	148.2(1)
P2	-Au	-C1	178.9(2)
N1	-Pd	-C3	83.1(2)
O1	-Pd	-C3	174.7(2)
O1	-Pd	-N1	91.8(2)
P1	-Pd	-C3	102.7(2)
P1	-Pd	-N1	173.1(2)
P1	-Pd	-O1	82.5(1)
Pd	-P1	-C18	122.8(2)
Pd	-P1	-C12	116.0(2)
Pd	-P1	-C1	99.3(2)
C12	-P1	-C18	104.3(3)
C1	-P1	-C18	104.8(3)
C1	-P1	-C12	108.5(3)
Au	-P2	-C42	112.1(2)
Au	-P2	-C36	113.6(2)
Au	-P2	-C30	112.5(2)
C36	-P2	-C42	107.4(3)
C30	-P2	-C42	104.4(3)
C30	-P2	-C36	106.1(3)
Pd	-O1	-C2	118.0(4)
Pd	-N1	-C11	115.8(6)
Pd	-N1	-C10	105.7(5)
Pd	-N1	-C9	106.1(5)
C10	-N1	-C11	115.8(8)
C9	-N1	-C11	110.8(7)
C9	-N1	-C10	101.4(7)
Au	-C1	-P1	104.7(3)
P1	-C1	-C2	111.9(4)
Au	-C1	-C2	99.1(4)
O1	-C2	-C1	122.3(5)
Au	-C2	-C1	50.1(3)
Au	-C2	-O1	112.5(4)

Table S·VIII(cont.)

C1	-C2	-C24	121.3(5)
O1	-C2	-C24	116.4(5)
Au	-C2	-C24	106.0(4)
Pd	-C3	-C8	131.0(5)
Pd	-C3	-C4	112.2(5)
C4	-C3	-C8	116.8(7)
C3	-C4	-C9	117.7(8)
C3	-C4	-C5	120.3(7)
C5	-C4	-C9	120.8(8)
C4	-C5	-C6	120.9(7)
C5	-C6	-C7	120.1(8)
C6	-C7	-C8	121.0(8)
C3	-C8	-C7	120.8(6)
N1	-C9	-C4	108.4(7)
P1	-C12	-C17	122.0(5)
P1	-C12	-C13	118.8(5)
C13	-C12	-C17	119.2(6)
C12	-C13	-C14	120.9(7)
C13	-C14	-C15	119.1(9)
C14	-C15	-C16	121.9(10)
C15	-C16	-C17	119.6(8)
C12	-C17	-C16	119.2(7)
P1	-C18	-C23	120.2(4)
P1	-C18	-C19	119.3(4)
C19	-C18	-C23	120.0(5)
C18	-C19	-C20	119.0(5)
C19	-C20	-C21	121.7(6)
C20	-C21	-C22	119.5(6)
C21	-C22	-C23	119.9(7)
C18	-C23	-C22	119.9(6)
C2	-C24	-C29	122.5(5)
C2	-C24	-C25	118.6(5)
C25	-C24	-C29	118.9(7)
C24	-C25	-C26	120.3(6)
C25	-C26	-C27	118.6(7)
C26	-C27	-C28	121.4(10)
C27	-C28	-C29	120.6(8)
C24	-C29	-C28	120.2(6)
P2	-C30	-C35	121.5(4)
P2	-C30	-C31	120.6(5)
C31	-C30	-C35	117.9(7)
C30	-C31	-C32	120.5(7)
C31	-C32	-C33	120.4(7)
C32	-C33	-C34	120.3(8)
C33	-C34	-C35	120.2(8)
C30	-C35	-C34	120.6(6)
P2	-C36	-C41	117.9(5)
P2	-C36	-C37	123.4(5)
C37	-C36	-C41	118.8(6)
C36	-C37	-C38	119.7(6)
C37	-C38	-C39	120.4(8)

Table S-VIII (cont.)

C38	-C39	-C40	120.2(7)
C39	-C40	-C41	120.0(8)
C36	-C41	-C40	120.9(7)
P2	-C42	-C47	123.5(5)
P2	-C42	-C43	117.2(5)
C43	-C42	-C47	119.2(7)
C42	-C43	-C44	119.6(6)
C43	-C44	-C45	120.5(9)
C44	-C45	-C46	120.9(10)
C45	-C46	-C47	119.6(8)
C42	-C47	-C46	120.2(8)
F3	-B1	-F4	112.4(10)
F2	-B1	-F4	112.0(9)
F2	-B1	-F3	105.2(9)
F1	-B1	-F4	105.8(9)
F1	-B1	-F3	117.5(9)
F1	-B1	-F2	103.8(8)
C48	-C49	-C50	124.5(10)
C49	-C50	-C51	125.5(11)

Table S-IX: Complete List of Bond Distances (Å) and Angles (deg) for **5b**·CH_2Cl_2

Atom 1	Atom 2	Distance	Atom 1	Atom 2	Distance
I1	Co	2.545(1)	C5	C10	1.40(1)
I2	Co	2.553(1)	C6	C7	1.41(1)
Co	O1	2.036(5)	C7	C8	1.37(1)
Co	O2	2.016(5)	C8	C9	1.36(1)
Ni	P1	2.143(2)	C8	C11	1.52(1)
Ni	P2	2.156(2)	C9	C10	1.38(1)
Ni	O1	1.932(5)	C12	C13	1.38(1)
Ni	O2	1.910(5)	C12	C17	1.40(1)
P1	C31	1.808(8)	P2	C19	1.808(8)
P1	C3	1.769(8)	C13	C14	1.39(1)
P1	C37	1.813(9)	P2	C25	1.815(9)
P2	C2	1.780(9)	C14	C15	1.38(1)
O1	O2	2.553(7)	C15	C16	1.37(1)
O1	C3	2.32(1)	C15	C18	1.53(1)
O1	C4	1.34(1)	C16	C17	1.39(1)
O2	C1	1.34(1)	C19	C20	1.40(1)
O2	C2	2.34(1)	C19	C24	1.40(1)
C1	C2	1.34(1)	C20	C21	1.38(1)
C3	C4	1.35(1)	C21	C22	1.38(2)
C1	C2	1.34(1)	C22	C23	1.38(2)
C1	C12	1.48(1)	C23	C24	1.37(1)
C3	C4	1.35(1)	C25	C26	1.39(1)
C4	C5	1.47(1)	C25	C30	1.40(1)
C5	C6	1.37(1)	C26	C27	1.37(1)
C27	C28	1.38(2)	C37	C38	1.38(1)
C28	C29	1.35(2)	C37	C42	1.37(1)
C29	C30	1.38(1)	C38	C39	1.38(1)
C31	C32	1.37(1)	C39	C40	1.37(2)
C31	C36	1.37(1)	C40	C41	1.40(2)
C32	C33	1.37(2)	C41	C42	1.38(1)
C33	C34	1.38(2)	C11	C43	1.67(2)
C34	C35	1.35(2)	C12	C43	1.80(2)
C35	C36	1.40(1)			

Table S-IX: continued

Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
I1	Co	I2	116.36(5)	O2	O1	C4	165.0(5)
I1	Co	O1	122.2(1)	C3	O1	C4	30.5(4)
I1	Co	O2	119.5(2)	Co	O2	Ni	92.5(2)
I2	Co	O1	106.4(1)	Co	O2	O1	51.3(2)
I2	Co	O2	107.9(2)	Co	O2	C1	132.6(5)
O1	Co	O2	78.1(2)	Co	O2	C2	146.2(3)
P1	Ni	P2	100.54(9)	Ni	O2	O1	48.7(2)
P1	Ni	O1	87.9(2)	Ni	O2	C1	117.6(5)
P1	Ni	O2	170.0(2)	Ni	O2	C2	88.3(3)
P2	Ni	O1	171.1(2)	O1	O2	C1	164.5(5)
P2	Ni	O2	88.1(2)	O1	O2	C2	136.8(3)
O1	Ni	O2	83.3(2)	C1	O2	C2	29.5(4)
Ni	P1	C3	98.0(3)	O2	C1	C2	121.0(7)
Ni	P2	C2	97.7(3)	P2	C2	O2	85.8(4)
Ni	P1	C31	118.3(3)	Ni	P2	C19	117.5(3)
Ni	P1	C37	116.2(3)	Ni	P2	C25	116.6(3)
C3	P1	C31	107.2(4)	C2	P2	C19	108.7(4)
C3	P1	C37	107.7(4)	C2	P2	C25	106.3(4)
C31	P1	C37	108.1(4)	C19	P2	C25	108.5(4)
Co	O1	Ni	91.3(2)	P2	C2	C1	115.2(7)
Co	O1	O2	50.6(2)	O2	C2	C1	29.5(4)
Co	O1	C3	145.5(3)	P1	C3	O1	86.5(4)
Co	O1	C4	134.4(5)	P1	C3	C4	116.5(6)
Ni	O1	O2	48.0(2)	O1	C3	C4	30.1(4)
Ni	O1	C3	87.7(3)	O1	C4	C3	119.4(7)
Ni	O1	C4	118.2(5)	C2	C1	C12	122.7(8)
O2	O1	C3	135.4(3)	C3	C4	C5	123.5(8)
C4	C5	C6	121.0(8)	C20	C21	C22	118.7(9)
C4	C5	C10	120.8(8)	C21	C22	C23	121.0(9)
C6	C5	C10	118.3(8)	C22	C23	C24	121.(1)
C5	C6	C7	120.1(9)	C19	C24	C23	119.5(9)

Table S-IX (cont.)

Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Angle
C6	C7	C8	121.8(9)	C26	C25	C30	119.0(8)
C7	C8	C9	116.9(9)	C25	C26	C27	120.7(9)
C7	C8	C11	121.4(9)	C26	C27	C28	119.4(9)
C9	C8	C11	122(1)	C27	C28	C29	120.6(8)
C8	C9	C10	123(1)	C28	C29	C30	121(1)
C5	C10	C9	119.4(8)	C25	C30	C29	119.5(8)
C1	C12	C13	120.8(8)	C32	C31	C36	118.8(8)
C1	C12	C17	121.0(8)	C31	C32	C33	120.5(9)
C13	C12	C17	118.3(8)	C32	C33	C34	120.(1)
C12	C13	C14	120.6(8)	C33	C34	C35	120.(1)
C13	C14	C15	121.4(8)	C34	C35	C36	120.(1)
C14	C15	C16	117.8(9)	C31	C36	C35	120.6(9)
C14	C15	C18	120.9(9)	C38	C37	C42	120.0(8)
C16	C15	C18	121(1)	C37	C38	C39	120.8(9)
C15	C16	C17	122(1)	C38	C39	C40	119(1)
C12	C17	C16	119.7(9)	C39	C40	C41	121(1)
C20	C19	C24	118.8(7)	C40	C41	C42	119.(1)
C19	C20	C21	121.2(9)	C37	C42	C41	120.3(9)
Cl1	C43	Cl2	110.4(9)				

Numbers in parentheses are estimated standard deviations in the least significant digits.