

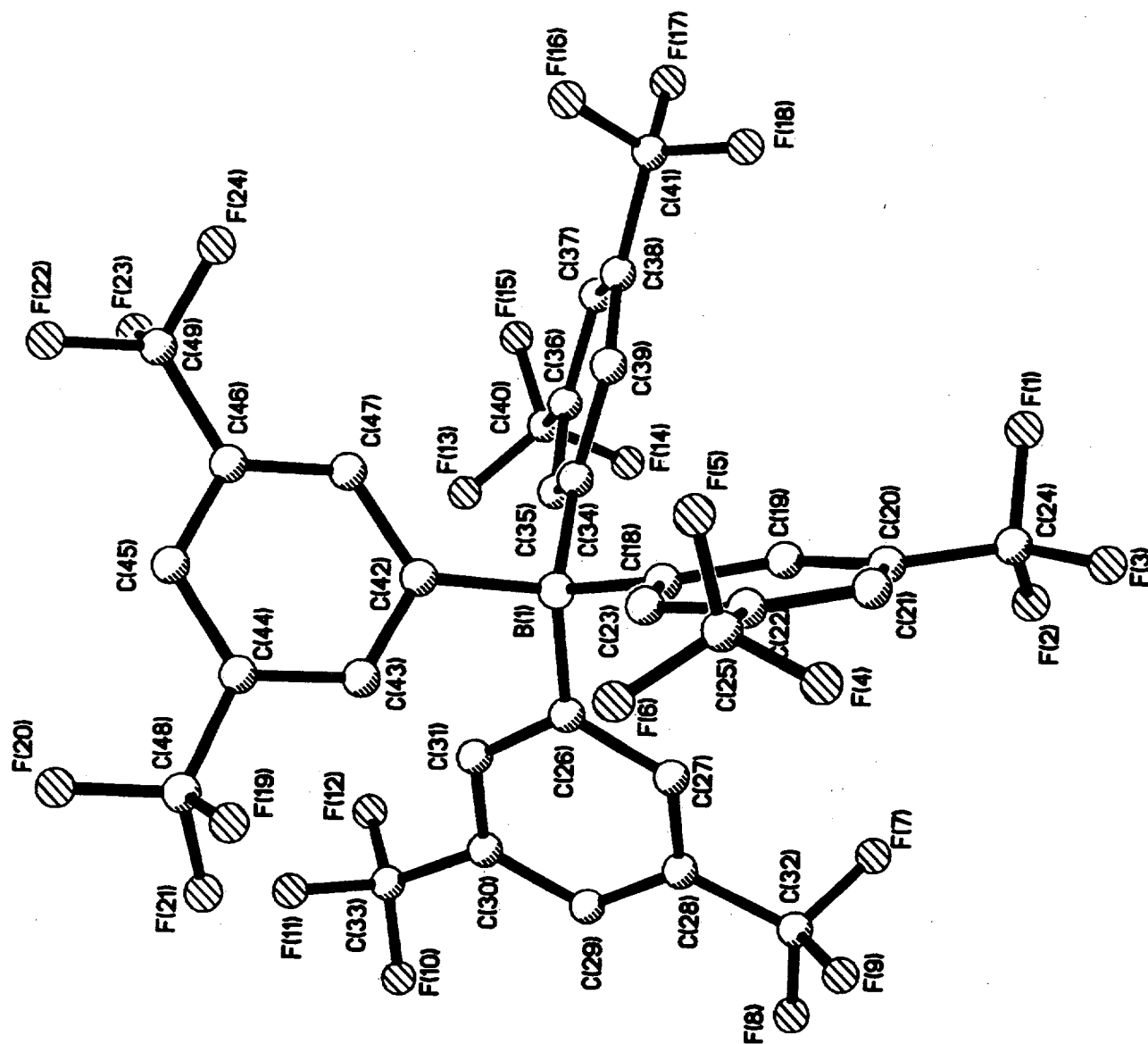


Table 1. Crystal data and structure refinement for [(N₂S₂)PdMe]BArF.

Empirical formula	C ₄₉ H ₃₅ B F ₂₄ N ₂ Pd S ₂	
Formula weight	1289.12	
Temperature	203(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	monoclinic	
Space group	P $\bar{1}$	
Unit cell dimensions	a = 12.478(1) Å	α = 95.783(1)°.
	b = 12.6904(9) Å	β = 104.743(1)°.
	c = 18.4723(15) Å	γ = 108.212(2)°.
Volume	2634.7(4) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.625 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.553 mm ⁻¹	
F(000)	1284	
Crystal size	0.16 x 0.12 x 0.08 mm ³	
Theta range for data collection	1.16 to 22.48°.	
Index ranges	-13 ≤ h ≤ 13, -12 ≤ k ≤ 13, -19 ≤ l ≤ 19	
Reflections collected	10826	
Independent reflections	5502 [R(int) = 0.0413]	
Max. and min. transmission	0.957 and 0.917	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	5502 / 4 / 726	
Goodness-of-fit on F ²	1.047	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0540, wR2 = 0.1274	
R indices (all data)	R1 = 0.0821, wR2 = 0.1402	
Largest diff. peak and hole	0.696 and -0.375 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[(\text{N}_2\text{S}_2)\text{PdMe}]\text{BArF}$. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Pd(1)	1079(1)	10973(1)	6935(1)	51(1)
S(1)	-611(2)	11160(2)	7057(1)	78(1)
S(2)	766(8)	8153(4)	5477(4)	71(2)
S(2')	2621(18)	8676(17)	4698(11)	78(5)
C(6)	2240(30)	8420(30)	4750(20)	104(18)
C(6')	980(60)	8120(40)	5380(40)	110(50)
B(1)	4465(6)	5879(7)	7784(4)	35(2)
C(1)	3644(7)	9338(7)	6975(5)	80(3)
C(2)	2730(6)	9833(7)	7083(4)	53(2)
C(3)	2928(6)	10946(7)	6105(4)	64(2)
C(4)	1960(7)	10329(8)	5342(4)	70(3)
C(5)	1757(7)	9092(9)	5155(4)	62(2)
C(7)	1877(13)	7300(13)	4704(6)	98(5)
C(8)	1038(9)	7034(9)	5083(5)	84(3)
C(9)	2594(7)	8838(6)	8226(4)	76(3)
C(10)	2084(7)	9439(6)	7635(4)	55(2)
C(11)	406(7)	9243(7)	8064(4)	67(2)
C(12)	-799(8)	9293(9)	7774(5)	88(3)
C(13)	-832(8)	11226(12)	8380(6)	101(4)
C(14)	-671(10)	12303(12)	8233(7)	118(4)
C(15)	-489(9)	12427(9)	7554(6)	102(3)
C(16)	-807(7)	10469(11)	7812(5)	81(3)
C(17)	1367(7)	12379(7)	6485(4)	76(3)
C(18)	3284(5)	5959(5)	7986(3)	37(2)
C(19)	3255(6)	6090(6)	8744(3)	41(2)
C(20)	2247(6)	6040(6)	8941(4)	45(2)
C(21)	1216(6)	5902(6)	8386(4)	53(2)
C(22)	1208(6)	5802(6)	7631(4)	44(2)
C(23)	2213(5)	5821(5)	7442(4)	42(2)
C(24)	2277(8)	6136(9)	9758(5)	66(2)
C(25)	117(7)	5705(9)	7028(5)	73(3)

C(26)	4581(5)	4643(5)	7867(3)	34(2)
C(27)	4085(5)	3981(5)	8340(3)	38(2)
C(28)	4283(6)	2997(6)	8467(3)	39(2)
C(29)	4975(6)	2611(6)	8114(3)	44(2)
C(30)	5464(6)	3231(6)	7630(3)	39(2)
C(31)	5257(5)	4220(6)	7512(3)	41(2)
C(32)	3740(8)	2362(7)	9002(4)	57(2)
C(33)	6234(7)	2863(8)	7243(5)	65(2)
C(34)	5646(5)	6883(6)	8388(3)	33(2)
C(35)	6734(5)	6741(6)	8674(3)	38(2)
C(36)	7731(5)	7603(6)	9146(4)	38(2)
C(37)	7694(6)	8671(6)	9371(3)	44(2)
C(38)	6636(6)	8841(6)	9098(3)	37(2)
C(39)	5643(6)	7954(6)	8625(3)	38(2)
C(40)	8850(7)	7378(8)	9429(5)	63(2)
C(41)	6567(7)	9969(7)	9300(4)	49(2)
C(42)	4418(5)	6088(6)	6912(3)	34(2)
C(43)	3721(5)	5228(6)	6280(3)	39(2)
C(44)	3668(6)	5348(7)	5532(4)	44(2)
C(45)	4307(6)	6358(8)	5386(4)	47(2)
C(46)	5006(6)	7226(7)	5994(4)	42(2)
C(47)	5063(6)	7095(6)	6737(4)	42(2)
C(48)	2879(7)	4369(8)	4896(4)	59(2)
C(49)	5749(8)	8322(8)	5864(4)	60(2)
N(1)	2460(5)	10567(5)	6727(3)	52(2)
N(2)	1128(5)	9646(5)	7562(3)	50(2)
F(1)	3006(8)	7166(6)	10164(3)	140(3)
F(2)	2814(5)	5550(5)	10140(3)	107(2)
F(3)	1304(6)	5962(10)	9886(3)	209(5)
F(4)	-841(4)	5278(8)	7175(4)	193(4)
F(5)	111(5)	6688(5)	6882(3)	131(3)
F(6)	5(5)	5180(6)	6364(4)	156(3)
F(7)	4103(4)	2989(4)	9698(2)	82(2)
F(8)	3946(6)	1426(5)	9065(3)	124(2)
F(9)	2571(5)	2061(5)	8796(3)	101(2)
F(10)	6199(6)	1837(5)	7275(4)	119(2)

F(11)	5993(6)	2911(6)	6520(3)	139(3)
F(12)	7350(5)	3493(5)	7538(4)	129(2)
F(13)	9023(4)	6712(6)	8914(4)	143(3)
F(14)	8926(4)	6935(5)	10045(3)	110(2)
F(15)	9812(4)	8316(5)	9621(3)	92(2)
F(16)	6419(5)	10469(4)	8714(3)	102(2)
F(17)	7512(5)	10686(4)	9819(3)	105(2)
F(18)	5682(5)	9932(4)	9559(4)	113(2)
F(19)	1747(4)	4197(5)	4800(3)	111(2)
F(20)	3057(5)	4488(5)	4237(2)	115(2)
F(21)	3001(5)	3406(5)	5017(3)	97(2)
F(22)	5516(4)	8419(5)	5138(3)	111(2)
F(23)	6889(4)	8487(4)	6086(3)	91(2)
F(24)	5653(6)	9211(5)	6231(4)	140(3)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for [(N₂S₂)PdMe]BArF.

Pd(1)-C(17)	2.014(7)
Pd(1)-N(1)	2.059(6)
Pd(1)-N(2)	2.145(5)
Pd(1)-S(1)	2.257(2)
S(1)-C(15)	1.712(11)
S(1)-C(16)	1.750(9)
S(2)-C(5)	1.704(12)
S(2)-C(8)	1.697(14)
S(2')-C(7)	1.71(3)
S(2')-C(5)	1.698(19)
C(6)-C(5)	1.43(3)
C(6)-C(7)	1.34(3)
C(6')-C(8)	1.47(5)
C(6')-C(5)	1.48(5)
B(1)-C(26)	1.638(10)
B(1)-C(18)	1.639(9)
B(1)-C(42)	1.648(9)
B(1)-C(34)	1.657(10)
C(1)-C(2)	1.507(10)
C(2)-N(1)	1.274(8)
C(2)-C(10)	1.486(10)
C(3)-N(1)	1.472(9)
C(3)-C(4)	1.542(10)
C(4)-C(5)	1.499(11)
C(7)-C(8)	1.379(15)
C(9)-C(10)	1.516(9)
C(10)-N(2)	1.277(8)
C(11)-N(2)	1.472(9)
C(11)-C(12)	1.486(11)
C(12)-C(16)	1.490(13)
C(13)-C(16)	1.363(13)
C(13)-C(14)	1.383(14)
C(14)-C(15)	1.346(13)
C(18)-C(23)	1.400(8)

C(18)-C(19)	1.404(8)
C(19)-C(20)	1.381(8)
C(20)-C(21)	1.374(9)
C(20)-C(24)	1.491(10)
C(21)-C(22)	1.385(9)
C(22)-C(23)	1.378(8)
C(22)-C(25)	1.484(10)
C(24)-F(3)	1.251(9)
C(24)-F(2)	1.295(8)
C(24)-F(1)	1.346(10)
C(25)-F(4)	1.259(9)
C(25)-F(6)	1.289(9)
C(25)-F(5)	1.306(10)
C(26)-C(31)	1.387(8)
C(26)-C(27)	1.396(8)
C(27)-C(28)	1.377(8)
C(28)-C(29)	1.378(9)
C(28)-C(32)	1.500(9)
C(29)-C(30)	1.381(9)
C(30)-C(31)	1.385(8)
C(30)-C(33)	1.488(9)
C(32)-F(8)	1.302(8)
C(32)-F(9)	1.325(8)
C(32)-F(7)	1.328(8)
C(33)-F(10)	1.298(9)
C(33)-F(11)	1.305(8)
C(33)-F(12)	1.306(9)
C(34)-C(39)	1.386(9)
C(34)-C(35)	1.401(8)
C(35)-C(36)	1.382(9)
C(36)-C(37)	1.395(9)
C(36)-C(40)	1.487(9)
C(37)-C(38)	1.380(8)
C(38)-C(39)	1.395(9)
C(38)-C(41)	1.477(9)
C(40)-F(13)	1.312(9)

C(40)-F(14)	1.315(9)
C(40)-F(15)	1.337(9)
C(41)-F(18)	1.300(8)
C(41)-F(16)	1.310(8)
C(41)-F(17)	1.310(8)
C(42)-C(43)	1.394(9)
C(42)-C(47)	1.398(9)
C(43)-C(44)	1.392(9)
C(44)-C(45)	1.376(9)
C(44)-C(48)	1.498(10)
C(45)-C(46)	1.373(10)
C(46)-C(47)	1.387(9)
C(46)-C(49)	1.492(10)
C(48)-F(20)	1.307(8)
C(48)-F(21)	1.312(9)
C(48)-F(19)	1.322(9)
C(49)-F(24)	1.311(9)
C(49)-F(23)	1.317(8)
C(49)-F(22)	1.325(8)

C(17)-Pd(1)-N(1)	96.3(3)
C(17)-Pd(1)-N(2)	168.5(3)
N(1)-Pd(1)-N(2)	77.7(2)
C(17)-Pd(1)-S(1)	88.3(3)
N(1)-Pd(1)-S(1)	171.40(18)
N(2)-Pd(1)-S(1)	98.98(18)
C(15)-S(1)-C(16)	92.7(6)
C(15)-S(1)-Pd(1)	116.8(4)
C(16)-S(1)-Pd(1)	101.9(3)
C(5)-S(2)-C(8)	92.6(7)
C(7)-S(2')-C(5)	89.9(11)
C(5)-C(6)-C(7)	120(2)
C(8)-C(6')-C(5)	113(4)
C(26)-B(1)-C(18)	110.5(5)
C(26)-B(1)-C(42)	109.7(5)
C(18)-B(1)-C(42)	110.7(4)

C(26)-B(1)-C(34)	109.2(5)
C(18)-B(1)-C(34)	108.6(5)
C(42)-B(1)-C(34)	108.0(5)
N(1)-C(2)-C(10)	117.0(7)
N(1)-C(2)-C(1)	124.4(7)
C(10)-C(2)-C(1)	118.6(7)
N(1)-C(3)-C(4)	107.9(6)
C(5)-C(4)-C(3)	113.4(7)
C(6)-C(5)-C(6')	95(2)
C(6)-C(5)-C(4)	135.1(16)
C(6')-C(5)-C(4)	130(2)
C(6)-C(5)-S(2)	105.4(16)
C(6')-C(5)-S(2)	10(2)
C(4)-C(5)-S(2)	119.6(7)
C(6)-C(5)-S(2')	16.7(18)
C(6')-C(5)-S(2')	111(2)
C(4)-C(5)-S(2')	118.7(9)
S(2)-C(5)-S(2')	121.5(9)
C(8)-C(7)-S(2')	120.5(12)
C(8)-C(7)-C(6)	106.8(16)
S(2')-C(7)-C(6)	14.4(14)
C(7)-C(8)-C(6')	105(2)
C(7)-C(8)-S(2)	115.2(10)
C(6')-C(8)-S(2)	10(2)
N(2)-C(10)-C(2)	115.6(6)
N(2)-C(10)-C(9)	125.7(7)
C(2)-C(10)-C(9)	118.6(7)
N(2)-C(11)-C(12)	111.4(6)
C(11)-C(12)-C(16)	113.4(8)
C(16)-C(13)-C(14)	115.0(10)
C(15)-C(14)-C(13)	113.9(11)
C(14)-C(15)-S(1)	110.3(9)
C(13)-C(16)-C(12)	132.2(9)
C(13)-C(16)-S(1)	107.8(9)
C(12)-C(16)-S(1)	119.7(7)
C(23)-C(18)-C(19)	114.4(6)

C(23)-C(18)-B(1)	124.6(5)
C(19)-C(18)-B(1)	120.8(5)
C(20)-C(19)-C(18)	123.3(6)
C(21)-C(20)-C(19)	120.0(6)
C(21)-C(20)-C(24)	120.0(6)
C(19)-C(20)-C(24)	120.0(6)
C(20)-C(21)-C(22)	118.9(6)
C(23)-C(22)-C(21)	120.3(6)
C(23)-C(22)-C(25)	120.3(7)
C(21)-C(22)-C(25)	119.4(6)
C(22)-C(23)-C(18)	123.1(6)
F(3)-C(24)-F(2)	108.3(8)
F(3)-C(24)-F(1)	107.1(8)
F(2)-C(24)-F(1)	97.3(7)
F(3)-C(24)-C(20)	116.3(7)
F(2)-C(24)-C(20)	115.2(6)
F(1)-C(24)-C(20)	110.7(8)
F(4)-C(25)-F(6)	107.6(9)
F(4)-C(25)-F(5)	104.3(8)
F(6)-C(25)-F(5)	101.0(8)
F(4)-C(25)-C(22)	115.8(7)
F(6)-C(25)-C(22)	114.6(7)
F(5)-C(25)-C(22)	112.1(8)
C(31)-C(26)-C(27)	115.3(6)
C(31)-C(26)-B(1)	121.7(5)
C(27)-C(26)-B(1)	122.8(5)
C(28)-C(27)-C(26)	122.5(6)
C(27)-C(28)-C(29)	120.7(6)
C(27)-C(28)-C(32)	118.7(6)
C(29)-C(28)-C(32)	120.7(6)
C(28)-C(29)-C(30)	118.5(6)
C(29)-C(30)-C(31)	119.9(6)
C(29)-C(30)-C(33)	120.8(6)
C(31)-C(30)-C(33)	119.2(6)
C(30)-C(31)-C(26)	123.0(6)
F(8)-C(32)-F(9)	105.1(7)

F(8)-C(32)-F(7)	107.8(6)
F(9)-C(32)-F(7)	104.4(6)
F(8)-C(32)-C(28)	114.1(7)
F(9)-C(32)-C(28)	113.1(6)
F(7)-C(32)-C(28)	111.8(7)
F(10)-C(33)-F(11)	105.5(8)
F(10)-C(33)-F(12)	105.1(7)
F(11)-C(33)-F(12)	104.6(8)
F(10)-C(33)-C(30)	114.4(7)
F(11)-C(33)-C(30)	114.0(6)
F(12)-C(33)-C(30)	112.5(8)
C(39)-C(34)-C(35)	114.6(6)
C(39)-C(34)-B(1)	122.1(5)
C(35)-C(34)-B(1)	123.3(6)
C(36)-C(35)-C(34)	122.8(6)
C(35)-C(36)-C(37)	120.8(6)
C(35)-C(36)-C(40)	119.3(7)
C(37)-C(36)-C(40)	119.8(7)
C(38)-C(37)-C(36)	117.9(6)
C(37)-C(38)-C(39)	119.9(6)
C(37)-C(38)-C(41)	119.8(7)
C(39)-C(38)-C(41)	120.3(6)
C(34)-C(39)-C(38)	123.9(6)
F(13)-C(40)-F(14)	107.6(8)
F(13)-C(40)-F(15)	104.3(7)
F(14)-C(40)-F(15)	104.7(6)
F(13)-C(40)-C(36)	112.9(7)
F(14)-C(40)-C(36)	113.7(7)
F(15)-C(40)-C(36)	112.8(7)
F(18)-C(41)-F(16)	105.1(6)
F(18)-C(41)-F(17)	106.0(6)
F(16)-C(41)-F(17)	105.3(7)
F(18)-C(41)-C(38)	112.9(7)
F(16)-C(41)-C(38)	112.6(6)
F(17)-C(41)-C(38)	114.1(6)
C(43)-C(42)-C(47)	114.7(6)

C(43)-C(42)-B(1)	120.7(6)
C(47)-C(42)-B(1)	124.6(6)
C(44)-C(43)-C(42)	123.2(7)
C(45)-C(44)-C(43)	120.1(7)
C(45)-C(44)-C(48)	121.2(7)
C(43)-C(44)-C(48)	118.7(7)
C(46)-C(45)-C(44)	118.4(7)
C(45)-C(46)-C(47)	121.1(7)
C(45)-C(46)-C(49)	120.2(7)
C(47)-C(46)-C(49)	118.7(7)
C(46)-C(47)-C(42)	122.5(7)
F(20)-C(48)-F(21)	105.7(7)
F(20)-C(48)-F(19)	106.8(6)
F(21)-C(48)-F(19)	105.0(8)
F(20)-C(48)-C(44)	113.6(7)
F(21)-C(48)-C(44)	113.2(6)
F(19)-C(48)-C(44)	112.0(7)
F(24)-C(49)-F(23)	104.9(8)
F(24)-C(49)-F(22)	105.9(7)
F(23)-C(49)-F(22)	104.4(7)
F(24)-C(49)-C(46)	113.7(7)
F(23)-C(49)-C(46)	113.1(6)
F(22)-C(49)-C(46)	113.9(7)
C(2)-N(1)-C(3)	123.2(6)
C(2)-N(1)-Pd(1)	114.9(5)
C(3)-N(1)-Pd(1)	120.9(5)
C(10)-N(2)-C(11)	119.2(6)
C(10)-N(2)-Pd(1)	111.5(5)
C(11)-N(2)-Pd(1)	126.6(5)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[(\text{N}_2\text{S}_2)\text{PdMe}]\text{BArF}$. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Pd(1)	52(1)	52(1)	43(1)	17(1)	9(1)	13(1)
S(1)	67(1)	113(2)	66(1)	31(1)	15(1)	45(2)
S(2)	63(3)	69(4)	56(3)	8(2)	12(2)	-4(2)
S(2')	66(11)	98(10)	62(7)	15(6)	9(6)	28(8)
C(6)	53(19)	200(40)	48(11)	4(16)	30(12)	20(20)
B(1)	35(4)	40(6)	33(4)	13(4)	10(3)	16(4)
C(1)	77(6)	90(8)	75(6)	11(5)	16(5)	41(6)
C(2)	42(4)	49(6)	50(4)	-1(4)	2(4)	4(4)
C(3)	52(5)	67(7)	61(5)	14(4)	21(4)	2(5)
C(4)	61(5)	96(9)	49(5)	34(5)	24(4)	10(6)
C(5)	57(5)	69(8)	43(4)	14(5)	5(4)	5(6)
C(7)	98(10)	83(10)	84(8)	8(7)	-14(7)	27(9)
C(8)	75(7)	94(10)	68(6)	8(6)	4(5)	26(7)
C(9)	102(7)	41(6)	70(5)	8(4)	4(5)	24(5)
C(10)	66(5)	49(6)	40(4)	-1(4)	4(4)	19(5)
C(11)	71(6)	59(7)	70(5)	25(4)	28(4)	12(5)
C(12)	75(7)	105(10)	71(6)	24(6)	35(5)	4(7)
C(13)	80(7)	175(13)	86(7)	43(8)	42(6)	77(8)
C(14)	129(10)	170(14)	95(9)	25(8)	30(7)	109(10)
C(15)	114(8)	126(10)	107(8)	43(7)	38(7)	88(8)
C(16)	43(5)	144(11)	59(5)	34(6)	20(4)	28(6)
C(17)	87(6)	59(7)	68(5)	19(5)	11(5)	15(5)
C(18)	39(4)	22(5)	42(4)	8(3)	7(3)	5(3)
C(19)	47(4)	42(5)	36(4)	8(3)	14(3)	16(4)
C(20)	49(4)	49(6)	47(4)	14(4)	25(4)	24(4)
C(21)	39(4)	55(6)	74(5)	17(4)	27(4)	20(4)
C(22)	34(4)	29(5)	66(5)	12(4)	16(3)	7(4)
C(23)	40(4)	41(5)	41(4)	11(3)	6(3)	13(4)
C(24)	88(7)	71(8)	60(5)	9(5)	35(5)	46(6)
C(25)	51(6)	110(9)	66(6)	19(6)	10(4)	42(6)
C(26)	32(4)	36(5)	30(3)	2(3)	7(3)	9(4)

C(27)	44(4)	37(5)	33(3)	9(3)	13(3)	14(4)
C(28)	49(4)	29(5)	36(4)	9(3)	10(3)	9(4)
C(29)	58(5)	30(5)	38(4)	6(3)	5(3)	17(4)
C(30)	48(4)	30(5)	37(4)	5(3)	11(3)	12(4)
C(31)	44(4)	42(5)	37(4)	10(3)	12(3)	14(4)
C(32)	77(6)	45(6)	55(5)	27(5)	24(4)	18(5)
C(33)	59(6)	75(8)	87(6)	33(5)	34(5)	46(6)
C(34)	37(4)	33(5)	33(3)	11(3)	16(3)	14(4)
C(35)	38(4)	42(5)	37(4)	8(3)	12(3)	19(4)
C(36)	31(4)	37(5)	43(4)	8(4)	10(3)	8(4)
C(37)	37(4)	50(6)	35(4)	6(4)	10(3)	4(4)
C(38)	40(4)	29(5)	38(4)	8(3)	14(3)	6(4)
C(39)	32(4)	45(6)	42(4)	14(4)	12(3)	16(4)
C(40)	38(5)	71(8)	73(6)	6(5)	4(4)	21(6)
C(41)	57(5)	44(6)	43(4)	2(4)	13(4)	17(5)
C(42)	30(4)	31(5)	45(4)	16(4)	13(3)	13(4)
C(43)	33(4)	42(5)	36(4)	7(4)	9(3)	8(4)
C(44)	41(4)	54(6)	41(4)	14(4)	13(4)	19(5)
C(45)	47(4)	64(7)	34(4)	24(5)	15(4)	18(5)
C(46)	44(4)	45(6)	45(5)	23(4)	23(4)	13(4)
C(47)	41(4)	40(6)	45(4)	8(4)	11(3)	16(4)
C(48)	60(6)	64(7)	38(5)	2(5)	5(4)	11(5)
C(49)	68(6)	61(7)	58(5)	22(5)	27(4)	22(6)
N(1)	54(4)	45(5)	49(4)	14(3)	12(3)	8(4)
N(2)	62(4)	39(4)	42(3)	10(3)	19(3)	6(4)
F(1)	272(9)	93(6)	73(4)	15(4)	82(5)	65(6)
F(2)	157(5)	134(5)	66(3)	45(3)	51(3)	78(5)
F(3)	106(5)	501(16)	84(4)	87(6)	67(4)	152(7)
F(4)	32(3)	345(12)	193(7)	165(8)	16(4)	32(5)
F(5)	116(5)	89(5)	136(5)	16(4)	-58(4)	45(4)
F(6)	106(5)	220(8)	107(5)	-57(5)	-55(4)	104(5)
F(7)	109(4)	75(4)	37(2)	13(2)	21(2)	-2(3)
F(8)	222(7)	86(5)	141(5)	86(4)	121(5)	85(5)
F(9)	77(4)	125(5)	72(3)	41(3)	22(3)	-9(3)
F(10)	165(6)	78(5)	185(6)	48(4)	118(5)	80(5)
F(11)	199(6)	238(8)	86(4)	68(4)	89(4)	172(6)

F(12)	65(4)	114(6)	206(7)	-21(5)	59(4)	29(4)
F(13)	68(4)	190(7)	154(5)	-58(5)	-7(3)	82(4)
F(14)	64(3)	126(5)	147(5)	82(4)	12(3)	41(3)
F(15)	36(3)	100(5)	125(4)	39(3)	6(3)	15(3)
F(16)	179(5)	67(4)	83(4)	27(3)	41(4)	66(4)
F(17)	91(4)	62(4)	125(4)	-27(3)	-15(3)	29(3)
F(18)	127(5)	61(4)	188(6)	13(4)	106(5)	40(4)
F(19)	56(3)	133(5)	101(4)	-27(3)	-10(3)	15(3)
F(20)	153(5)	116(5)	32(3)	1(3)	20(3)	-3(4)
F(21)	132(5)	70(4)	68(3)	-6(3)	5(3)	34(4)
F(22)	105(4)	112(5)	79(4)	63(3)	14(3)	-13(3)
F(23)	68(3)	83(4)	96(4)	28(3)	20(3)	-6(3)
F(24)	214(7)	50(4)	218(7)	49(4)	170(6)	39(4)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $[(\text{N}_2\text{S}_2)\text{PdMe}]\text{BArF}$.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	3982	9662	6601	120
H(1B)	3275	8533	6804	120
H(1C)	4255	9502	7451	120
H(3A)	3635	10767	6127	76
H(3B)	3131	11758	6153	76
H(4A)	1224	10420	5363	84
H(4B)	2184	10683	4935	84
H(9A)	2092	8641	8544	113
H(9B)	3371	9329	8534	113
H(9C)	2644	8163	7973	113
H(11A)	794	9704	8573	81
H(11B)	343	8469	8099	81
H(12A)	-1285	8908	8069	105
H(12B)	-1152	8891	7247	105
H(13)	-949	11033	8834	121
H(14)	-687	12887	8571	142
H(15)	-322	13105	7380	122
H(17A)	786	12711	6526	114
H(17B)	1309	12185	5957	114
H(17C)	2144	12911	6756	114
H(19)	3949	6216	9132	50
H(21)	536	5876	8514	64
H(23)	2179	5738	6930	50
H(27)	3602	4214	8579	46
H(29)	5110	1947	8199	52
H(31)	5586	4619	7179	49
H(35)	6787	6037	8542	45
H(37)	8361	9249	9694	52
H(39)	4938	8088	8459	46
H(43)	3270	4541	6362	47

H(45)	4267	6451	4888	56
H(47)	5550	7699	7135	50
