ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1997, 16(4), 551-562, DOI:10.1021/om960790e

s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

******** Complex 1a **********

==========
S U P P L E M E N T A R Y M A T E R I A L
==========

B E L O N G I N G T O T H E P A P E R

Insertion of Allenes into Palladium-Carbon Bonds of Complexes Containing Bidentate Nitrogen Ligands. Mechanism and Structural Studies.

b y

J.G.P. Delis, J.H. Groen, K. Vrieze & P.W.N.M. van Leeuwen

C o n t e n t s

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Crystal Data			
Empirical Formula			C18 H17 Cl N2 Pd
Formula Weight			403.22
Crystal System			Triclinic
Space group		P-1	(No. 2)
a, b, c [Angstrom]	9.2427(13)	11.211(2)	15.966(8)
alpha, beta, gamma [deg]	88.19(3)	88.76(3)	89.728(12)
V [Ang**3]			1653.2(9)
Z			4
D(calc) [g/cm**3]			1.620
F(000) [Electrons]			808
Mu(MoKa) [/cm]			12.8
Crystal Size [mm]		0.08 x 0.20 x	0.30
Data Collection			
Temperature (K)			150
Radiation [Angstrom]	MoKa (with monochromator)		0.71073
Theta Min-Max [Deg]			1.3, 27.5
Scan type, Scan, [Deg]	Omega/2Theta, 0.84 + 0.35 Tan(Theta)		
Hor. and vert. aperture [mm]		3.03	4.00
Reference Reflection(s)	-2, 2, 1 ; -2, -2, 5 ; -1, -3, 2		
Dataset		-12: 12 ; -14: 14 ; -13: 20	
Tot., Uniq. Data, R(int)		9113, 7582,	0.0382
Observed data [I > 2.0 sigma(I)]			5495
DIFABS transmission range			0.676, 1.000
Refinement			
Nref, Npar			7574, 399
R, wR, S			0.0732, 0.1682, 1.14
w = 1/[s^2^(Fo^2^)+(0.0202P)^2^+24.296P] where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3			
Max. and Av. Shift/Error			0.001, 0.000
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]			-1.21, 1.59

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters of the non-Hydrogen atoms for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
Pd(1)	0.55769(7)	0.86840(6)	0.18487(4)	0.0205(2)
Cl(1)	0.6792(2)	0.8072(2)	0.06133(13)	0.0255(6)
N(11)	0.3525(7)	0.8529(6)	0.1302(4)	0.019(2)
N(12)	0.1086(8)	0.7669(6)	0.3184(5)	0.024(2)
C(11)	0.3182(9)	0.9246(8)	0.0640(5)	0.021(2)
C(12)	0.1864(9)	0.9220(8)	0.0257(5)	0.023(3)
C(13)	0.0846(9)	0.8401(8)	0.0545(6)	0.026(3)
C(14)	0.1164(10)	0.7696(9)	0.1236(6)	0.029(3)
C(15)	0.2512(9)	0.7743(8)	0.1579(5)	0.020(2)
C(16)	0.2911(9)	0.6883(7)	0.2265(6)	0.022(3)
C(17)	0.3987(10)	0.6066(9)	0.2122(6)	0.033(3)
C(18)	0.4326(12)	0.5170(9)	0.2720(7)	0.043(4)
C(19)	0.3530(12)	0.5075(9)	0.3463(7)	0.040(3)
C(110)	0.2449(10)	0.5909(8)	0.3641(6)	0.027(3)
C(111)	0.1623(10)	0.5882(9)	0.4395(6)	0.030(3)
C(112)	0.0581(10)	0.6710(8)	0.4535(6)	0.030(3)
C(113)	0.0390(10)	0.7591(8)	0.3895(6)	0.028(3)
C(114)	0.2137(9)	0.6826(8)	0.3034(5)	0.022(2)
C(115)	0.6246(11)	0.8763(9)	0.3103(6)	0.030(3)
C(116)	0.7370(11)	0.9101(9)	0.2553(6)	0.033(3)
C(117)	0.4971(12)	0.9437(10)	0.2991(6)	0.040(4)
C(118)	0.6276(11)	0.7636(9)	0.3636(6)	0.036(3)
Pd(2)	1.08967(7)	0.18381(6)	0.29535(4)	0.0216(2)
Cl(2)	1.2252(2)	0.2157(2)	0.41718(14)	0.0279(7)
N(21)	0.8892(7)	0.1719(6)	0.3627(4)	0.0176(19)
N(22)	0.6499(8)	0.2365(7)	0.1833(5)	0.024(2)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued) for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
C(21)	0.8743(10)	0.0880(8)	0.4246(5)	0.025(3)
C(22)	0.7475(11)	0.0655(8)	0.4675(6)	0.031(3)
C(23)	0.6270(11)	0.1327(9)	0.4480(6)	0.035(3)
C(24)	0.6404(10)	0.2198(8)	0.3858(6)	0.027(3)
C(25)	0.7728(9)	0.2384(7)	0.3450(5)	0.020(2)
C(26)	0.7936(8)	0.3391(7)	0.2812(5)	0.017(2)
C(27)	0.8717(10)	0.4369(8)	0.3018(5)	0.024(3)
C(28)	0.8805(10)	0.5377(8)	0.2469(6)	0.026(3)
C(29)	0.8132(9)	0.5376(7)	0.1722(6)	0.025(3)
C(210)	0.7358(9)	0.4373(8)	0.1479(5)	0.022(3)
C(211)	0.6669(10)	0.4326(9)	0.0700(6)	0.030(3)
C(212)	0.5937(10)	0.3328(9)	0.0507(6)	0.030(3)
C(213)	0.5876(10)	0.2365(8)	0.1104(6)	0.028(3)
C(214)	0.7251(9)	0.3358(7)	0.2031(5)	0.020(2)
C(215)	1.1446(10)	0.2080(9)	0.1657(6)	0.031(3)
C(216)	1.2652(10)	0.1715(11)	0.2127(6)	0.039(3)
C(217)	1.0243(11)	0.1315(9)	0.1751(5)	0.033(3)
C(218)	1.1328(13)	0.3321(10)	0.1261(7)	0.043(4)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters
for: sil61a C18 H17 Cl N2 Pd

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang^2]
H(11)	0.3873(9)	0.9785(8)	0.0432(5)	0.0250
H(12)	0.1664(9)	0.9745(8)	-0.0188(5)	0.0280
H(13)	-0.0033(9)	0.8329(8)	0.0278(6)	0.0300
H(14)	0.0466(10)	0.7185(9)	0.1472(6)	0.0340
H(17)	0.4506(10)	0.6106(9)	0.1616(6)	0.0390
H(18)	0.5083(12)	0.4641(9)	0.2617(7)	0.0510
H(19)	0.3717(12)	0.4453(9)	0.3846(7)	0.0480
H(111)	0.1796(10)	0.5288(9)	0.4801(6)	0.0360
H(112)	0.0022(10)	0.6699(8)	0.5026(6)	0.0360
H(113)	-0.0306(10)	0.8173(8)	0.3995(6)	0.0340
H(161)	0.8188(11)	0.8558(9)	0.2520(6)	0.0400
H(162)	0.7647(11)	0.9934(9)	0.2549(6)	0.0400
H(171)	0.5062(12)	1.0296(10)	0.3020(6)	0.0470
H(172)	0.4100(12)	0.9125(10)	0.3266(6)	0.0470
H(181)	0.688(6)	0.706(2)	0.337(2)	0.0540
H(182)	0.666(7)	0.7803(16)	0.4174(17)	0.0540
H(183)	0.5312(15)	0.733(4)	0.371(4)	0.0540
H(21)	0.9552(10)	0.0428(8)	0.4389(5)	0.0310
H(22)	0.7425(11)	0.0057(8)	0.5091(6)	0.0380
H(23)	0.5391(11)	0.1196(9)	0.4761(6)	0.0420
H(24)	0.5608(10)	0.2663(8)	0.3711(6)	0.0330
H(27)	0.9195(10)	0.4368(8)	0.3525(5)	0.0290
H(28)	0.9324(10)	0.6043(8)	0.2619(6)	0.0310
H(29)	0.8184(9)	0.6048(7)	0.1366(6)	0.0300
H(211)	0.6717(10)	0.4974(9)	0.0322(6)	0.0370
H(212)	0.5486(10)	0.3277(9)	-0.0006(6)	0.0360

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters (continued)
for: sil61a C18 H17 Cl N2 Pd

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang^2]
H(213)	0.5360(10)	0.1690(8)	0.0969(6)	0.0330
H(261)	1.3410(10)	0.2301(11)	0.2180(6)	0.0470
H(262)	1.3018(10)	0.0917(11)	0.2030(6)	0.0470
H(271)	1.0403(11)	0.0486(9)	0.1619(5)	0.0390
H(272)	0.9325(11)	0.1630(9)	0.1559(5)	0.0390
H(281)	1.167(8)	0.3309(18)	0.0689(16)	0.0650
H(282)	1.191(7)	0.3863(17)	0.157(3)	0.0650
H(283)	1.0336(17)	0.358(3)	0.128(4)	0.0650

==========

The Temperature Factor has the Form of Exp(-T) Where
T = 8*(Pi**2)*U*(Sin(Theta)/Lambda)**2 for Isotropic Atoms

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
Pd(1)	0.0196(3)	0.0195(3)	0.0224(4)	0.0009(3)	-0.0041(3)	-0.0030(3)
Cl(1)	0.0214(10)	0.0305(11)	0.0242(11)	0.0059(9)	0.0021(8)	-0.0028(8)
N(11)	0.015(3)	0.021(4)	0.023(4)	-0.009(3)	-0.001(3)	-0.002(3)
N(12)	0.022(4)	0.019(4)	0.031(4)	-0.005(3)	0.000(3)	0.001(3)
C(11)	0.021(4)	0.025(4)	0.016(4)	0.001(3)	0.001(3)	-0.004(3)
C(12)	0.026(5)	0.023(4)	0.021(4)	0.003(3)	-0.003(3)	0.002(3)
C(13)	0.015(4)	0.035(5)	0.027(5)	-0.006(4)	-0.002(3)	-0.005(4)
C(14)	0.025(5)	0.033(5)	0.028(5)	-0.001(4)	0.000(4)	-0.003(4)
C(15)	0.018(4)	0.024(4)	0.017(4)	-0.005(3)	0.007(3)	-0.003(3)
C(16)	0.019(4)	0.013(4)	0.034(5)	-0.001(3)	0.003(3)	-0.005(3)
C(17)	0.033(5)	0.031(5)	0.033(5)	0.008(4)	0.014(4)	0.006(4)
C(18)	0.044(6)	0.033(6)	0.049(7)	0.015(5)	0.025(5)	0.017(5)
C(19)	0.043(6)	0.033(5)	0.042(6)	0.020(5)	0.014(5)	0.013(5)
C(110)	0.024(5)	0.022(4)	0.036(5)	0.005(4)	0.003(4)	-0.006(4)
C(111)	0.034(5)	0.030(5)	0.026(5)	0.004(4)	0.000(4)	0.002(4)
C(112)	0.030(5)	0.031(5)	0.029(5)	-0.011(4)	0.007(4)	-0.007(4)
C(113)	0.024(5)	0.027(5)	0.034(5)	-0.015(4)	0.001(4)	-0.002(4)
C(114)	0.020(4)	0.020(4)	0.027(4)	0.000(3)	-0.001(3)	-0.003(3)
C(115)	0.033(5)	0.032(5)	0.027(5)	-0.011(4)	-0.008(4)	0.003(4)
C(116)	0.036(6)	0.030(5)	0.035(5)	-0.004(4)	-0.009(4)	-0.008(4)
C(117)	0.038(6)	0.048(7)	0.034(6)	-0.011(5)	-0.012(5)	0.008(5)
C(118)	0.035(6)	0.046(6)	0.027(5)	0.005(4)	-0.006(4)	0.009(5)
Pd(2)	0.0203(3)	0.0239(4)	0.0205(3)	-0.0016(3)	0.0008(3)	0.0041(3)
Cl(2)	0.0261(11)	0.0328(12)	0.0246(11)	0.0042(9)	-0.0035(9)	-0.0013(9)
N(21)	0.025(4)	0.016(3)	0.012(3)	-0.002(3)	-0.001(3)	0.000(3)
N(22)	0.022(4)	0.026(4)	0.024(4)	-0.003(3)	0.003(3)	-0.006(3)

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
C(21)	0.029(5)	0.023(4)	0.024(5)	0.003(4)	-0.004(4)	0.002(
C(22)	0.044(6)	0.022(5)	0.028(5)	0.010(4)	-0.004(4)	-0.008(
C(23)	0.033(5)	0.040(6)	0.032(5)	-0.005(4)	0.011(4)	-0.011(
C(24)	0.023(5)	0.017(4)	0.041(5)	0.001(4)	0.006(4)	-0.002(
C(25)	0.023(4)	0.022(4)	0.016(4)	-0.004(3)	0.001(3)	-0.004(
C(26)	0.016(4)	0.020(4)	0.015(4)	-0.002(3)	0.003(3)	0.004(
C(27)	0.029(5)	0.021(4)	0.023(4)	0.002(3)	-0.004(4)	-0.007(
C(28)	0.028(5)	0.017(4)	0.032(5)	-0.002(4)	-0.003(4)	-0.013(
C(29)	0.027(5)	0.015(4)	0.034(5)	0.006(4)	0.000(4)	-0.004(
C(210)	0.017(4)	0.032(5)	0.018(4)	0.004(3)	0.003(3)	0.002(
C(211)	0.023(5)	0.039(6)	0.029(5)	0.003(4)	0.002(4)	0.002(
C(212)	0.023(5)	0.048(6)	0.020(4)	0.001(4)	-0.002(4)	-0.002(
C(213)	0.025(5)	0.028(5)	0.031(5)	-0.012(4)	0.003(4)	-0.008(
C(214)	0.014(4)	0.020(4)	0.027(4)	-0.005(3)	0.002(3)	0.002(
C(215)	0.029(5)	0.045(6)	0.019(4)	-0.001(4)	0.011(4)	0.010(
C(216)	0.022(5)	0.059(7)	0.036(6)	-0.016(5)	0.011(4)	0.012(
C(217)	0.037(5)	0.043(6)	0.019(4)	-0.019(4)	-0.002(4)	0.013(
C(218)	0.048(7)	0.051(7)	0.028(5)	0.009(5)	0.012(5)	0.005(

==========

The Temperature Factor has the Form of Exp(-T) Where
T = 8*(Pi**2)*U*(Sin(Theta)/Lambda)**2 for Isotropic Atoms
T = 2*(Pi**2)*Sumij(h(i)*h(j)*U(i,j)*Astar(i)*Astar(j)), for Anisotropic Atoms. Astar(i) are Reciprocal Axial Lengths and h(i) are the Reflection Indices.

Table S5 - Bond Distances (Angstrom)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Pd(1)	-Cl(1)	2.367(2)	C(14)	-H(14)	0.930(14)
Pd(1)	-N(11)	2.115(7)	C(17)	-H(17)	0.931(13)
Pd(1)	-C(115)	2.113(10)	C(18)	-H(18)	0.930(15)
Pd(1)	-C(116)	2.086(10)	C(19)	-H(19)	0.931(15)
Pd(1)	-C(117)	2.098(10)	C(111)	-H(111)	0.930(14)
N(11)	-C(11)	1.350(11)	C(112)	-H(112)	0.929(13)
N(11)	-C(15)	1.347(11)	C(113)	-H(113)	0.929(13)
N(12)	-C(113)	1.293(12)	C(116)	-H(161)	0.970(14)
N(12)	-C(114)	1.375(11)	C(116)	-H(162)	0.969(14)
C(11)	-C(12)	1.376(12)	C(117)	-H(171)	0.970(16)
C(12)	-C(13)	1.379(12)	C(117)	-H(172)	0.970(15)
C(13)	-C(14)	1.373(13)	C(118)	-H(181)	0.96(4)
C(14)	-C(15)	1.374(12)	C(118)	-H(182)	0.96(4)
C(15)	-C(16)	1.487(12)	C(118)	-H(183)	0.96(2)
C(16)	-C(17)	1.369(13)	Pd(2)	-Cl(2)	2.374(3)
C(16)	-C(114)	1.407(12)	Pd(2)	-N(21)	2.125(7)
C(17)	-C(18)	1.403(15)	Pd(2)	-C(215)	2.130(10)
C(18)	-C(19)	1.384(16)	Pd(2)	-C(216)	2.076(9)
C(19)	-C(110)	1.396(14)	Pd(2)	-C(217)	2.126(8)
C(110)	-C(111)	1.411(13)	N(21)	-C(21)	1.348(11)
C(110)	-C(114)	1.423(13)	N(21)	-C(25)	1.336(10)
C(111)	-C(112)	1.354(13)	N(22)	-C(213)	1.310(12)
C(112)	-C(113)	1.412(13)	N(22)	-C(214)	1.364(11)
C(115)	-C(116)	1.392(14)	C(21)	-C(22)	1.365(13)
C(115)	-C(117)	1.408(15)	C(22)	-C(23)	1.377(14)
C(115)	-C(118)	1.501(14)	C(23)	-C(24)	1.375(14)
C(11)	-H(11)	0.930(12)	C(24)	-C(25)	1.387(12)
C(12)	-H(12)	0.929(12)	C(25)	-C(26)	1.507(11)
C(13)	-H(13)	0.931(12)	C(26)	-C(27)	1.368(12)

Table S5 - Bond Distances (Angstrom) (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

C(26)	-C(214)	1.412(11)	C(24)	-H(24)	0.930(13)
C(27)	-C(28)	1.410(13)	C(27)	-H(27)	0.931(12)
C(28)	-C(29)	1.357(13)	C(28)	-H(28)	0.930(13)
C(29)	-C(210)	1.405(12)	C(29)	-H(29)	0.930(12)
C(210)	-C(211)	1.412(12)	C(211)	-H(211)	0.930(14)
C(210)	-C(214)	1.420(12)	C(212)	-H(212)	0.931(13)
C(211)	-C(212)	1.357(14)	C(213)	-H(213)	0.930(13)
C(212)	-C(213)	1.418(14)	C(216)	-H(261)	0.970(15)
C(215)	-C(216)	1.409(13)	C(216)	-H(262)	0.971(17)
C(215)	-C(217)	1.410(14)	C(217)	-H(271)	0.969(14)
C(215)	-C(218)	1.514(15)	C(217)	-H(272)	0.970(14)
C(21)	-H(21)	0.930(13)	C(218)	-H(281)	0.96(4)
C(22)	-H(22)	0.929(13)	C(218)	-H(282)	0.97(5)
C(23)	-H(23)	0.930(14)	C(218)	-H(283)	0.96(2)

Table S6 - Bond Angles (Degrees)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Cl(1)	-Pd(1)	-N(11)	92.22(18)	C(111)	-C(110)	-C(114)	117.7(8)
Cl(1)	-Pd(1)	-C(115)	131.9(3)	C(110)	-C(111)	-C(112)	120.8(9)
Cl(1)	-Pd(1)	-C(116)	99.1(3)	C(111)	-C(112)	-C(113)	116.4(9)
Cl(1)	-Pd(1)	-C(117)	166.2(3)	N(12)	-C(113)	-C(112)	126.6(8)
N(11)	-Pd(1)	-C(115)	132.9(3)	N(12)	-C(114)	-C(16)	118.8(8)
N(11)	-Pd(1)	-C(116)	167.6(3)	N(12)	-C(114)	-C(110)	121.1(8)
N(11)	-Pd(1)	-C(117)	100.1(3)	C(16)	-C(114)	-C(110)	120.1(8)
C(115)	-Pd(1)	-C(116)	38.7(4)	Pd(1)	-C(115)	-C(116)	69.6(6)
C(115)	-Pd(1)	-C(117)	39.1(4)	Pd(1)	-C(115)	-C(117)	69.9(6)
C(116)	-Pd(1)	-C(117)	68.1(4)	Pd(1)	-C(115)	-C(118)	119.1(7)
Pd(1)	-N(11)	-C(11)	119.6(5)	C(116)	-C(115)	-C(117)	113.6(9)
Pd(1)	-N(11)	-C(15)	123.5(5)	C(116)	-C(115)	-C(118)	123.0(9)
C(11)	-N(11)	-C(15)	116.9(7)	C(117)	-C(115)	-C(118)	122.2(9)
C(113)	-N(12)	-C(114)	117.4(8)	Pd(1)	-C(116)	-C(115)	71.7(6)
N(11)	-C(11)	-C(12)	123.4(8)	Pd(1)	-C(117)	-C(115)	71.1(6)
C(11)	-C(12)	-C(13)	118.8(8)	N(11)	-C(11)	-H(11)	118.3(9)
C(12)	-C(13)	-C(14)	118.2(8)	C(12)	-C(11)	-H(11)	118.3(10)
C(13)	-C(14)	-C(15)	120.1(9)	C(11)	-C(12)	-H(12)	120.5(10)
N(11)	-C(15)	-C(14)	122.3(8)	C(13)	-C(12)	-H(12)	120.6(10)
N(11)	-C(15)	-C(16)	117.6(7)	C(12)	-C(13)	-H(13)	120.8(11)
C(14)	-C(15)	-C(16)	120.0(8)	C(14)	-C(13)	-H(13)	120.9(11)
C(15)	-C(16)	-C(17)	119.1(8)	C(13)	-C(14)	-H(14)	120.0(11)
C(15)	-C(16)	-C(114)	121.7(7)	C(15)	-C(14)	-H(14)	119.9(11)
C(17)	-C(16)	-C(114)	119.0(8)	C(16)	-C(17)	-H(17)	119.2(11)
C(16)	-C(17)	-C(18)	121.6(9)	C(18)	-C(17)	-H(17)	119.2(11)
C(17)	-C(18)	-C(19)	119.8(10)	C(17)	-C(18)	-H(18)	120.1(13)
C(18)	-C(19)	-C(110)	120.3(10)	C(19)	-C(18)	-H(18)	120.1(13)
C(19)	-C(110)	-C(111)	123.2(9)	C(18)	-C(19)	-H(19)	119.9(13)
C(19)	-C(110)	-C(114)	119.1(9)	C(110)	-C(19)	-H(19)	119.9(13)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

C(110)	-C(111)	-H(111)	119.6(11)	C(215)	-Pd(2)	-C(216)	39.1(4
C(112)	-C(111)	-H(111)	119.6(11)	C(215)	-Pd(2)	-C(217)	38.7(4
C(111)	-C(112)	-H(112)	121.8(11)	C(216)	-Pd(2)	-C(217)	68.6(4
C(113)	-C(112)	-H(112)	121.8(11)	Pd(2)	-N(21)	-C(21)	118.6(6
N(12)	-C(113)	-H(113)	116.8(11)	Pd(2)	-N(21)	-C(25)	124.2(5
C(112)	-C(113)	-H(113)	116.7(11)	C(21)	-N(21)	-C(25)	117.0(7
Pd(1)	-C(116)	-H(161)	116.4(10)	C(213)	-N(22)	-C(214)	117.8(8
Pd(1)	-C(116)	-H(162)	116.5(10)	N(21)	-C(21)	-C(22)	123.9(8
C(115)	-C(116)	-H(161)	116.4(11)	C(21)	-C(22)	-C(23)	118.9(9
C(115)	-C(116)	-H(162)	116.4(11)	C(22)	-C(23)	-C(24)	118.1(9
H(161)	-C(116)	-H(162)	113.4(13)	C(23)	-C(24)	-C(25)	120.0(9
Pd(1)	-C(117)	-H(171)	116.5(9)	N(21)	-C(25)	-C(24)	122.0(7
Pd(1)	-C(117)	-H(172)	116.5(10)	N(21)	-C(25)	-C(26)	116.7(7
C(115)	-C(117)	-H(171)	116.5(12)	C(24)	-C(25)	-C(26)	121.2(7
C(115)	-C(117)	-H(172)	116.5(12)	C(25)	-C(26)	-C(27)	119.3(7
H(171)	-C(117)	-H(172)	113.5(14)	C(25)	-C(26)	-C(214)	120.2(7
C(115)	-C(118)	-H(181)	109(2)	C(27)	-C(26)	-C(214)	120.4(7
C(115)	-C(118)	-H(182)	109.4(15)	C(26)	-C(27)	-C(28)	120.6(8
C(115)	-C(118)	-H(183)	110(3)	C(27)	-C(28)	-C(29)	120.0(8
H(181)	-C(118)	-H(182)	109(4)	C(28)	-C(29)	-C(210)	120.9(8
H(181)	-C(118)	-H(183)	110(4)	C(29)	-C(210)	-C(211)	122.7(8
H(182)	-C(118)	-H(183)	109(5)	C(29)	-C(210)	-C(214)	119.5(8
Cl(2)	-Pd(2)	-N(21)	93.71(18)	C(211)	-C(210)	-C(214)	117.8(8
Cl(2)	-Pd(2)	-C(215)	131.2(3)	C(210)	-C(211)	-C(212)	119.5(9
Cl(2)	-Pd(2)	-C(216)	96.7(3)	C(211)	-C(212)	-C(213)	118.5(9
Cl(2)	-Pd(2)	-C(217)	163.6(3)	N(22)	-C(213)	-C(212)	124.2(9
N(21)	-Pd(2)	-C(215)	133.1(3)	N(22)	-C(214)	-C(26)	119.4(7
N(21)	-Pd(2)	-C(216)	168.0(3)	N(22)	-C(214)	-C(210)	122.1(7
N(21)	-Pd(2)	-C(217)	100.3(3)	C(26)	-C(214)	-C(210)	118.5(7

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Pd(2)	-C(215)	-C(216)	68.4(5)	C(210)	-C(211)	-H(211)	120.2(11)
Pd(2)	-C(215)	-C(217)	70.5(5)	C(212)	-C(211)	-H(211)	120.3(11)
Pd(2)	-C(215)	-C(218)	118.4(7)	C(211)	-C(212)	-H(212)	120.7(12)
C(216)	-C(215)	-C(217)	114.2(9)	C(213)	-C(212)	-H(212)	120.8(11)
C(216)	-C(215)	-C(218)	122.1(9)	N(22)	-C(213)	-H(213)	117.9(11)
C(217)	-C(215)	-C(218)	122.1(9)	C(212)	-C(213)	-H(213)	117.9(11)
Pd(2)	-C(216)	-C(215)	72.5(6)	Pd(2)	-C(216)	-H(261)	116.4(10)
Pd(2)	-C(217)	-C(215)	70.8(5)	Pd(2)	-C(216)	-H(262)	116.3(10)
N(21)	-C(21)	-H(21)	118.0(10)	C(215)	-C(216)	-H(261)	116.3(12)
C(22)	-C(21)	-H(21)	118.1(10)	C(215)	-C(216)	-H(262)	116.2(11)
C(21)	-C(22)	-H(22)	120.5(12)	H(261)	-C(216)	-H(262)	113.4(13)
C(23)	-C(22)	-H(22)	120.5(12)	Pd(2)	-C(217)	-H(271)	116.5(8)
C(22)	-C(23)	-H(23)	121.0(12)	Pd(2)	-C(217)	-H(272)	116.5(9)
C(24)	-C(23)	-H(23)	120.9(12)	C(215)	-C(217)	-H(271)	116.6(11)
C(23)	-C(24)	-H(24)	120.0(11)	C(215)	-C(217)	-H(272)	116.5(11)
C(25)	-C(24)	-H(24)	120.0(11)	H(271)	-C(217)	-H(272)	113.5(13)
C(26)	-C(27)	-H(27)	119.7(10)	C(215)	-C(218)	-H(281)	109.4(18)
C(28)	-C(27)	-H(27)	119.7(10)	C(215)	-C(218)	-H(282)	109(2)
C(27)	-C(28)	-H(28)	120.0(11)	C(215)	-C(218)	-H(283)	110(3)
C(29)	-C(28)	-H(28)	120.0(11)	H(281)	-C(218)	-H(282)	110(5)
C(28)	-C(29)	-H(29)	119.6(10)	H(281)	-C(218)	-H(283)	110(6)
C(210)	-C(29)	-H(29)	119.6(10)	H(282)	-C(218)	-H(283)	109(4)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

Cl(1)	-Pd(1)	-N(11)	-C(11)	-64.3(6)
Cl(1)	-Pd(1)	-N(11)	-C(15)	115.8(6)
C(115)	-Pd(1)	-N(11)	-C(11)	133.9(6)
C(115)	-Pd(1)	-N(11)	-C(15)	-46.0(8)
C(117)	-Pd(1)	-N(11)	-C(11)	109.5(7)
C(117)	-Pd(1)	-N(11)	-C(15)	-70.4(7)
Cl(1)	-Pd(1)	-C(115)	-C(116)	38.4(7)
Cl(1)	-Pd(1)	-C(115)	-C(117)	164.7(5)
Cl(1)	-Pd(1)	-C(115)	-C(118)	-78.9(8)
N(11)	-Pd(1)	-C(115)	-C(116)	-166.4(5)
N(11)	-Pd(1)	-C(115)	-C(117)	-40.1(8)
N(11)	-Pd(1)	-C(115)	-C(118)	76.3(9)
C(116)	-Pd(1)	-C(115)	-C(117)	126.2(9)
C(116)	-Pd(1)	-C(115)	-C(118)	-117.3(10)
C(117)	-Pd(1)	-C(115)	-C(116)	-126.2(9)
C(117)	-Pd(1)	-C(115)	-C(118)	116.5(10)
Cl(1)	-Pd(1)	-C(116)	-C(115)	-152.1(5)
C(117)	-Pd(1)	-C(116)	-C(115)	33.2(6)
N(11)	-Pd(1)	-C(117)	-C(115)	151.4(6)
C(116)	-Pd(1)	-C(117)	-C(115)	-32.9(6)
Pd(1)	-N(11)	-C(11)	-C(12)	-178.8(7)
C(15)	-N(11)	-C(11)	-C(12)	1.2(12)
Pd(1)	-N(11)	-C(15)	-C(14)	177.1(7)
Pd(1)	-N(11)	-C(15)	-C(16)	-4.7(10)
C(11)	-N(11)	-C(15)	-C(14)	-2.8(12)
C(11)	-N(11)	-C(15)	-C(16)	175.4(7)
C(114)	-N(12)	-C(113)	-C(112)	-1.1(14)
C(113)	-N(12)	-C(114)	-C(16)	179.8(8)
C(113)	-N(12)	-C(114)	-C(110)	-0.3(14)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

N(11)	-C(11)	-C(12)	-C(13)	-1.8(13)
C(11)	-C(12)	-C(13)	-C(14)	3.9(13)
C(12)	-C(13)	-C(14)	-C(15)	-5.6(14)
C(13)	-C(14)	-C(15)	-N(11)	5.2(14)
C(13)	-C(14)	-C(15)	-C(16)	-173.0(8)
N(11)	-C(15)	-C(16)	-C(17)	-63.7(11)
N(11)	-C(15)	-C(16)	-C(114)	121.4(9)
C(14)	-C(15)	-C(16)	-C(17)	114.6(10)
C(14)	-C(15)	-C(16)	-C(114)	-60.4(12)
C(15)	-C(16)	-C(17)	-C(18)	-174.5(9)
C(114)	-C(16)	-C(17)	-C(18)	0.5(14)
C(15)	-C(16)	-C(114)	-N(12)	-6.9(12)
C(15)	-C(16)	-C(114)	-C(110)	173.2(8)
C(17)	-C(16)	-C(114)	-N(12)	178.2(8)
C(17)	-C(16)	-C(114)	-C(110)	-1.7(13)
C(16)	-C(17)	-C(18)	-C(19)	2.2(15)
C(17)	-C(18)	-C(19)	-C(110)	-3.8(16)
C(18)	-C(19)	-C(110)	-C(111)	-178.4(10)
C(18)	-C(19)	-C(110)	-C(114)	2.6(15)
C(19)	-C(110)	-C(111)	-C(112)	-179.7(10)
C(114)	-C(110)	-C(111)	-C(112)	-0.6(14)
C(19)	-C(110)	-C(114)	-N(12)	-179.7(10)
C(19)	-C(110)	-C(114)	-C(16)	0.2(16)
C(111)	-C(110)	-C(114)	-N(12)	1.2(13)
C(111)	-C(110)	-C(114)	-C(16)	-178.9(9)
C(110)	-C(111)	-C(112)	-C(113)	-0.7(14)
C(111)	-C(112)	-C(113)	-N(12)	1.7(14)
C(117)	-C(115)	-C(116)	-Pd(1)	-55.7(8)
C(118)	-C(115)	-C(116)	-Pd(1)	112.1(9)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

C(116)	-C(115)	-C(117)	-Pd(1)	55.6(8)
C(118)	-C(115)	-C(117)	-Pd(1)	-112.4(9)
Cl(2)	-Pd(2)	-N(21)	-C(21)	-58.1(6)
Cl(2)	-Pd(2)	-N(21)	-C(25)	125.6(6)
C(215)	-Pd(2)	-N(21)	-C(21)	137.0(6)
C(215)	-Pd(2)	-N(21)	-C(25)	-39.3(8)
C(217)	-Pd(2)	-N(21)	-C(21)	113.4(6)
C(217)	-Pd(2)	-N(21)	-C(25)	-62.9(7)
Cl(2)	-Pd(2)	-C(215)	-C(216)	33.6(8)
Cl(2)	-Pd(2)	-C(215)	-C(217)	161.1(5)
Cl(2)	-Pd(2)	-C(215)	-C(218)	-82.2(8)
N(21)	-Pd(2)	-C(215)	-C(216)	-166.6(6)
N(21)	-Pd(2)	-C(215)	-C(217)	-39.1(7)
N(21)	-Pd(2)	-C(215)	-C(218)	77.6(9)
C(216)	-Pd(2)	-C(215)	-C(217)	127.5(9)
C(216)	-Pd(2)	-C(215)	-C(218)	-115.8(10)
C(217)	-Pd(2)	-C(215)	-C(216)	-127.5(9)
C(217)	-Pd(2)	-C(215)	-C(218)	116.7(10)
Cl(2)	-Pd(2)	-C(216)	-C(215)	-155.2(6)
C(217)	-Pd(2)	-C(216)	-C(215)	32.2(6)
N(21)	-Pd(2)	-C(217)	-C(215)	152.1(5)
C(216)	-Pd(2)	-C(217)	-C(215)	-32.5(6)
Pd(2)	-N(21)	-C(21)	-C(22)	-174.5(7)
C(25)	-N(21)	-C(21)	-C(22)	2.1(12)
Pd(2)	-N(21)	-C(25)	-C(24)	173.9(6)
Pd(2)	-N(21)	-C(25)	-C(26)	-8.9(10)
C(21)	-N(21)	-C(25)	-C(24)	-2.4(12)
C(21)	-N(21)	-C(25)	-C(26)	174.7(7)
C(214)	-N(22)	-C(213)	-C(212)	0.2(14)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

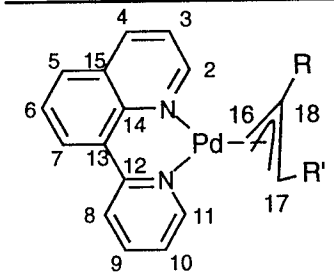
C(213)	-N(22)	-C(214)	-C(26)	179.9(10)
C(213)	-N(22)	-C(214)	-C(210)	0.6(12)
N(21)	-C(21)	-C(22)	-C(23)	-0.9(14)
C(21)	-C(22)	-C(23)	-C(24)	0(5)
C(22)	-C(23)	-C(24)	-C(25)	-0.4(15)
C(23)	-C(24)	-C(25)	-N(21)	1.7(13)
C(23)	-C(24)	-C(25)	-C(26)	-175.4(8)
N(21)	-C(25)	-C(26)	-C(27)	-70.7(10)
N(21)	-C(25)	-C(26)	-C(214)	113.5(8)
C(24)	-C(25)	-C(26)	-C(27)	106.5(10)
C(24)	-C(25)	-C(26)	-C(214)	-69.3(11)
C(25)	-C(26)	-C(27)	-C(28)	-173.4(8)
C(214)	-C(26)	-C(27)	-C(28)	2.5(13)
C(25)	-C(26)	-C(214)	-N(22)	-5.3(12)
C(25)	-C(26)	-C(214)	-C(210)	174.0(7)
C(27)	-C(26)	-C(214)	-N(22)	178.9(8)
C(27)	-C(26)	-C(214)	-C(210)	-1.8(12)
C(26)	-C(27)	-C(28)	-C(29)	-1.1(14)
C(27)	-C(28)	-C(29)	-C(210)	-0.9(14)
C(28)	-C(29)	-C(210)	-C(211)	-178.6(9)
C(28)	-C(29)	-C(210)	-C(214)	1.5(13)
C(29)	-C(210)	-C(211)	-C(212)	-179.9(10)
C(214)	-C(210)	-C(211)	-C(212)	0.0(16)
C(29)	-C(210)	-C(214)	-N(22)	179.2(8)
C(29)	-C(210)	-C(214)	-C(26)	-0.2(12)
C(211)	-C(210)	-C(214)	-N(22)	-0.7(12)
C(211)	-C(210)	-C(214)	-C(26)	179.9(12)
C(210)	-C(211)	-C(212)	-C(213)	0.7(14)
C(211)	-C(212)	-C(213)	-N(22)	-0.9(15)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: s1161a C18 H17 Cl N2 Pd

C(217)	-C(215)	-C(216)	-Pd(2)	-55.1(8)
C(218)	-C(215)	-C(216)	-Pd(2)	110.8(9)
C(216)	-C(215)	-C(217)	-Pd(2)	54.0(8)
C(218)	-C(215)	-C(217)	-Pd(2)	-112.0(9)

Table S8: ^{13}C NMR data for the allyl complexes (8-PQ)Pd(η^3-allyl)X.[a]

	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C18	R
1a	152.5	122.1	137.1	130.0	127.0	132.9	128.5	136.9	124.0	151.5	159.2	139.9	145.7	128.8	59.6	59.6	128.2	Me: 22.6
1b	151.1	121.8	136.9	*b*	126.9	132.9	129.9	136.5	123.6	151.2	158.5	139.5	145.7	128.6	*b*	*b*	124.5	Me: 24.0 [c]
2a	*b*	121.7	136.8	129.7	126.8	132.6	128.2	136.5	123.6	151.2	*b*	139.6	145.6	128.6	*b*	*b*	127.5	Me: 22.4
2b	149.5	*b*	135.3	*b*	125.3	131.2	128.3	134.8	*b*	149.0	*b*	137.8	144.2	127.1	*b*	*b*	122.7	Me: [b,d]
3a	151.8	122.3	137.4	130.6	126.7	132.3	128.6	137.1	124.2	152.3	159.1	139.7	145.7	128.9	58.6	58.6	118.3	Me: 26.2 [e]
3b	151.5	122.2	137.0	130.3	126.8	132.3	*b*	137.2	124.1	*b*	*b*	139.9	145.8	128.9	*b*	*b*	114.5	Me: 26.0 [f]
4a	152.0	122.3	137.5	132.4	127.0	133.9	128.8	137.3	124.4	152.5	159.4	139.7	146.0	129.1	60.3	60.3	121.3	Ph [g]
5a	151.9	122.5	138.0	130.9	127.1	132.4	128.2	137.7	124.4	152.0	*b*	135.5	145.5	129.0	58.9	58.9	117.5	*i*-Pr [h]
12	158.2	122.0	140.9	132.0	127.8	134.5	127.9	140.4	124.9	154.3	153.1	132.9	142.2	129.8	63.6	63.6	120.7	-
13	158.2	122.1	140.8	132.0	127.8	134.5	127.8	140.3	124.9	154.2	153.3	137.5	142.4	129.7	62.6	62.6	133.0	Me: 23.2
14	154.9	122.7	141.1	132.5	128.4	135.0	128.5	140.6	125.4	150.8	154.4	134.2	143.2	130.2	62.8	62.8	130.2	Me: 23.7



a: Recorded at 75.48 MHz in $CDCl_3$ at 21 °C; *b*: not observed; *c*: *n*-Butyl: 31.1, 29.3, 22.7 (CH_2), 14.3 (CH_3); *d*: *n*-Butyl: 31.6, 29.8, 21.2, (CH_2), 12.8 (CH_3); *e*: C(O)Me: 195.3; *f*: *n*-Butyl: 32.6, 30.2, 22.5 (CH_2), 14.2 (CH_3), 165.4 (C(O)Me); *g*: Ph: 130.5 (C_{ortho}), 129.0 (C_{meta}), 133.9 (C_{para}), C_q: 136.0; 191.9 (C(O)Me), *h*: *i*-Pr: 36.0 (CH), 20.1(CH_3), C(O)Me: 202.3.

Table S9: Observed reaction rates for the reaction of (N∩N)Pd(R)X (1-3, 6-8,10) with 1,2-heptadiene (with Esd's in Parentheses)[a].

Compound	solvent	T (K)	[1,2-heptadiene] *10^2 (M)[b]	k_{obs} *10^2 (s^{-1})[c]
(8-PQ)Pd(Me)Cl	CH_2Cl_2	303.0	2.638	0.53(1)
(1)			5.270	0.98(2)
			7.916	1.59(3)
			10.55	2.22(4)
		298.0	2.638	0.376(7)
			5.270	0.68(1)
			7.916	1.00(2)
			10.55	1.52(3)
			13.19	1.83(4)
			15.83	2.29(4)
		293.0	2.638	0.262(5)
			5.270	0.394(8)
			7.916	0.61(1)
			10.55	0.84(2)
			13.19	1.10(2)
			15.83	1.32(3)
			18.47	1.51(3)
		288.0	5.270	0.231(5)
			7.916	0.340(7)
			10.55	0.452(9)
			13.19	0.56(1)
			15.83	0.72(1)
		285.0	5.270	0.167(3)
			7.916	0.237(5)
			10.55	0.318(6)
			13.19	0.405(8)
			15.83	0.52(1)

Table S9: Observed reaction rates for the reaction of (N⌒N)Pd(R)X (1-3, 6-8,10) with 1,2-heptadiene (with Esd's in Parentheses). (Continued)

	THF	293.0	2.638	0.225(4)
			5.270	0.373(7)
			7.916	0.54(1)
			10.55	0.69(1)
			13.19	0.86(2)
			15.83	1.04(2)
			18.47	1.27(3)
	CH_3CN	293.0	2.638	0.320(6)
			5.270	0.61(1)
			7.916	0.92(2)
			10.55	1.28(3)
			13.19	1.67(3)
			15.83	2.02(4)
			18.47	2.41(5)
(8-PQ)Pd(Me)Br	CH_2Cl_2	303.0	2.638	1.20(2)
(**2**)			5.270	2.20(4)
			7.916	3.22(6)
			10.55	4.26(8)
		298.0	2.638	0.61(1)
			5.270	1.29(2)
			7.916	1.97(4)
			10.55	2.58(5)
			13.19	3.13(6)
		293.0	2.638	0.49)1)
			5.270	0.99(2)
			7.916	1.49(3)
			10.55	1.97(4)
			13.19	2.49(5)
			15.83	2.82(6)
			18.47	3.50(7)
		288.0	2.638	0.334(6)
			5.270	0.63(1)
			7.916	0.95(2)
			10.55	1.22(2)
			13.19	1.53(3)

Table S9: Observed reaction rates for the reaction of (N⌒N)Pd(R)X (1-3, 6-8,10) with 1,2-heptadiene (with Esd's in Parentheses). (Continued)

		283.0	2.638	0.175(3)
			5.270	0.368(7)
			7.916	0.54(1)
			10.55	0.70(1)
			13.19	0.90(2)
(8-PQ)Pd(C(O)Me)Cl	CH_2Cl_2	294.0	1.319	5.1(1)
(3)			2.638	9.4(2)
			3.957	15.4(3)
			5.270	19.1(4)
			6.589	24.1(5)
		288.0	1.319	3.81(8)
			2.638	7.2(1)
			3.957	10.6(2)
			5.270	14.5(3)
			6.589	18.9(4)
		283.0	1.319	2.71(6)
			2.638	5.0(1)
			3.957	7.5(2)
			5.270	9.9(2)
			6.589	12.5(2)
			7.916	15.0(3)
		278.0	1.319	1.92(4)
			2.638	3.61(7)
			3.957	5.2(1)
			5.270	7.3(1)
			6.589	8.5(2)
			7.916	10.3(2)
		273.0	1.319	1.34(3)
			2.638	2.71(5)
			3.957	4.31(9)
			5.270	5.5(1)
			6.589	6.8(1)
			7.916	7.8(2)

Table S9: Observed reaction rates for the reaction of (N⌒N)Pd(R)X (1-3, 6-8,10) with 1,2-heptadiene (with Esd's in Parentheses). (Continued)

(*p*-An-BIAN)Pd(C(O)Me)Cl (**6**)	CH_2Cl_2	295.0	2.638	1.28(3)
			5.270	2.36(5)
			7.916	3.62(7)
			10.55	4.44(9)
			13.19	6.5(1)
		288.0	2.638	0.82(2)
			5.270	1.59(3)
			7.916	2.31(5)
			10.55	3.14(6)
			13.19	4.10(8)
			15.83	4.8(1)
		283.0	2.638	0.71(1)
			5.270	1.23(2)
			7.916	1.90(4)
			10.55	2.36(5)
			13.19	3.19(6)
		278.0	2.638	0.46(1)
			5.270	0.89(2)
			7.916	1.35(3)
			10.55	1.76(4)
			13.19	2.18(4)
(*p*-An-BIAN)Pd(C(O)Ph)Cl (**7**)	CH_2Cl_2	305.0	5.270	0.241(5)
			7.916	0.334(7)
			10.55	0.48(1)
			13.19	0.51(1)
			15.83	0.57(1)
			18.47	0.69(1)
		300.0	5.270	0.216(4)
			7.916	0.276(5)
			10.55	0.369(7)
			13.19	0.433(9)
			15.83	0.47(1)
			18.47	0.52(1)

Table S9: Observed reaction rates for the reaction of (N⌒N)Pd(R)X (1-3, 6-8,10) with 1,2-heptadiene (with Esd's in Parentheses). (Continued)

		295.0	5.270	0.141(3)
			7.916	0.191(4)
			10.55	0.237(5)
			13.19	0.281(6)
			15.83	0.339(7)
			18.47	0.364(7)
		290.0	5.270	0.086(2)
			7.916	0.137(3)
			10.55	0.177(4)
			13.19	0.222(4)
			15.83	0.253(5)
			18.47	0.281(6)
(*i*-Pr-DAB)Pd(C(O)Me)Cl (**8**)	CH_2Cl_2	288.0	1.319	6.7(1)
			2.638	12.0(2)
			3.958	15.8(3)
			5.270	20.7(4)
		283.0	1.319	4.50(9)
			2.638	9.3(2)
			3.957	12.3(2)
			5.270	16.0(3)
			6.589	20.6(4)
		278.0	1.319	3.25(7)
			2.638	5.9(1)
			3.957	9.4(2)
			5.270	11.6(2)
			6.589	13.9(3)
		274.0	1.319	2.46(5)
			2.638	4.8(1)
			3.957	7.4(1)
			5.270	9.1(2)
			6.589	11.5(2)
(*i*-Pr-PyCa)Pd(C(O)Me)Cl (**10**)	CH_2Cl_2	288.0	7.916	0.266(5)
			10.55	0.318(6)
			13.19	0.422(8)
			15.83	0.52(1)
			18.47	0.60(1)

a: [Pd] = 1.38 mM, b: accuracy in temperature is 0.5 ° C, c: the standard deviation in the k_{obs} is 2%.