ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1998, 17(20), 4519-4522, DOI:10.1021/om980315b

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html

ACS Publications
MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1998 American Chemical Society

Tab. 1: Fractional atomic coordinates (e.s.d.'s in parentheses)

	x	y	z
Pd1	0.45153(5)	0.28200(4)	0.24854(3)
N2	0.4893(4)	0.3243(3)	0.4174(2)
C3	0.3916(5)	0.2728(4)	0.4606(3)
C4	0.4280(5)	0.3152(4)	0.5774(3)
C5	0.5736(5)	0.4128(4)	0.6483(3)
C6	0.6760(5)	0.4697(4)	0.6059(3)
C7	0.8255(7)	0.5750(5)	0.6741(4)
C8	0.9223(5)	0.6299(4)	0.6260(3)
C9	0.8786(5)	0.5853(4)	0.5078(3)
C10	0.9750(5)	0.6375(4)	0.4533(3)
C11	0.9269(5)	0.5868(4)	0.3375(3)
C12	0.7773(5)	0.4845(4)	0.2766(3)
N13	0.6867(3)	0.4343(3)	0.3243(2)
C14	0.7327(4)	0.4816(3)	0.4379(3)
C15	0.6307(4)	0.4244(3)	0.4875(3)
N16	0.4030(3)	0.2728(3)	0.0793(2)
C17	0.3080(5)	0.3196(4)	0.0316(3)
C18	0.2790(5)	0.3352(4)	-0.0777(3)
C19	0.3540(5)	0.3006(4)	-0.1357(3)
C20	0.4579(5)	0.2466(4)	-0.0869(3)
C21	0.5338(5)	0.2080(4)	-0.1452(3)
C22	0.6311(5)	0.1591(4)	-0.0969(3)
C23	0.6536(5)	0.1441(4)	0.0100(3)
C24	0.7509(5)	0.0928(4)	0.0616(3)
C25	0.7625(5)	0.0733(4)	0.1665(3)
C26	0.6792(5)	0.1134(4)	0.2194(3)
N27	0.5903(4)	0.1644(3)	0.1750(2)
C28	0.5772(5)	0.1800(4)	0.0721(3)
C29	0.4775(5)	0.2361(4)	0.0219(3)
C30	0.2354(5)	0.1495(4)	0.1923(3)
O31	0.1150(3)	0.1566(2)	0.1388(2)
O32	0.2347(3)	0.0481(2)	0.2166(2)
C33	0.0789(6)	-0.0555(5)	0.1784(4)
P34	1	0	0.5
F35	0.839(1)	-0.021(1)	0.448(1)
F36	0.932(2)	-0.113(1)	0.398(1)
F37	1.049(2)	0.089(1)	0.431(1)
P38	1	0.5	0
F39	1.025(2)	0.633(1)	0.034(1)
F40	0.905(1)	0.451(1)	0.069(1)
F41	0.837(2)	0.467(1)	-0.095(1)

Tab. 2: Fractional atomic coordinates for H atoms.

	x	y	z	U_{iso} (Å^2)
H1	0.2917	0.2020	0.4120	0.037
H2	0.3531	0.2787	0.6074	0.047
H3	0.6012	0.4403	0.7288	0.043
H4	0.8569	0.6086	0.7545	0.048
H5	1.0218	0.7015	0.6737	0.050
H6	1.0767	0.7080	0.4981	0.051
H7	0.9908	0.6215	0.2992	0.050
H8	0.7432	0.4500	0.1958	0.043
H9	0.2561	0.3443	0.0735	0.041
H10	0.2050	0.3662	-0.1114	0.049
H11	0.3400	0.3113	-0.2095	0.052
H12	0.5160	0.2142	-0.2208	0.048
H13	0.6780	0.1289	-0.1397	0.048
H14	0.8058	0.0673	0.0232	0.048
H15	0.8324	0.0412	0.2049	0.047
H16	0.6744	0.0898	0.2855	0.076
H17	0.0216	-0.0310	0.2150	0.052
H18	0.0201	-0.0808	0.0965	0.052
H19	0.0929	-0.1232	0.2003	0.052

Tab. 3: Anisotropic thermal parameters $U(I,J)\cdot 10^4$
$\exp(-2\cdot PI^2(U_{11}\cdot H^2\cdot(A^*)^2+\ldots+2\cdot U_{12}\cdot H\cdot K\cdot(A^*)\cdot(B^*)+\ldots)$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd1	312(2)	388(2)	267(1)	83(1)	108(1)	142(1)
N2	375(20)	431(20)	264(21)	91(20)	99(13)	131(21)
C3	433(30)	508(31)	331(23)	120(18)	171(19)	159(18)
C4	621(41)	612(42)	349(22)	170(22)	240(32)	240(33)
C5	631(41)	604(41)	292(18)	90(18)	169(21)	270(30)
C6	491(28)	460(29)	280(18)	21(21)	77(21)	224(21)
C7	488(30)	631(41)	372(30)	1(30)	78(20)	232(30)
C8	450(30)	555(37)	450(33)	-20(30)	41(30)	80(30)
C9	359(30)	424(30)	483(30)	54(22)	81(21)	106(20)
C10	422(30)	462(30)	660(42)	111(30)	138(32)	61(31)
C11	448(30)	500(30)	682(40)	217(30)	236(30)	113(30)
C12	467(30)	510(32)	461(31)	177(32)	213(24)	141(33)
N13	369(20)	401(20)	352(21)	101(20)	127(23)	148(23)
C14	342(20)	380(22)	374(22)	90(22)	100(22)	161(22)
C15	364(21)	377(22)	310(22)	72(21)	91(21)	163(21)
N16	383(22)	479(22)	322(21)	132(24)	163(21)	218(21)
C17	531(33)	663(40)	402(30)	215(31)	195(19)	384(34)
C18	712(41)	711(40)	441(32)	292(33)	249(35)	468(42)
C19	705(43)	739(42)	423(28)	323(26)	261(27)	410(39)
C20	610(41)	492(30)	365(23)	121(24)	256(20)	217(29)
C21	751(53)	622(40)	535(32)	210(32)	452(42)	292(38)
C22	530(26)	555(26)	538(26)	120(31)	341(31)	249(32)
C23	311(18)	412(26)	561(32)	23(20)	192(21)	130(21)
C24	350(30)	522(30)	690(41)	29(31)	189(32)	189(19)
C25	351(31)	522(31)	671(42)	62(31)	61(31)	201(32)
C26	380(21)	454(30)	482(30)	104(21)	62(20)	219(22)
N27	392(21)	427(21)	362(21)	66(22)	108(23)	179(22)
C28	300(21)	346(22)	396(22)	62(22)	142(22)	109(23)
C29	369(20)	360(23)	335(24)	81(22)	152(22)	127(22)
C30	330(25)	475(32)	322(21)	73(20)	131(23)	146(24)
O31	382(22)	744(32)	842(42)	283(32)	161(21)	225(22)
O32	367(21)	478(21)	658(32)	174(21)	172(21)	142(21)
C33	446(34)	490(33)	853(51)	111(33)	316(33)	134(33)
P34	510(15)	510(15)	520(14)	184(13)	250(12)	163(13)
F35	852(70)	3300(200)	4600(300)	2800(200)	90(100)	800(100)
F36	3400(200)	1030(60)	1130(70)	180(50)	1200(100)	660(90)
F37	1260(60)	1090(50)	960(50)	560(40)	470(40)	160(40)
P38	460(11)	551(12)	471(11)	162(12)	173(12)	261(12)
F39	1250(70)	670(40)	4400(200)	180(80)	1500(100)	360(50)
F40	1470(80)	1460(80)	1420(70)	320(60)	1050(70)	120(60)
F41	880(50)	1700(90)	1650(90)	920(70)	-429(50)	-19(50)

Tab. 4: Principal axes of the thermal ellipsoids, U_{eq} ($\cdot 10^4$, Å^2) and B_{eq} (Å^2)

	R1	R2	R3	U_{eq}	B_{eq}	R_{MAX}/R_{MIN}
Pd1	410(3)	330(3)	266(1)	335(1)	2.65(1)	1.54
N2	507(46)	394(26)	262(20)	388(18)	3.06(14)	1.94
C3	581(51)	423(24)	320(30)	441(22)	3.48(17)	1.82
C4	688(81)	591(33)	306(38)	528(33)	4.17(26)	2.25
C5	669(48)	628(65)	284(21)	527(30)	4.16(24)	2.35
C6	620(39)	457(55)	261(18)	446(24)	3.52(19)	2.37
C7	785(54)	555(66)	328(23)	556(28)	4.39(22)	2.39
C8	789(63)	717(66)	301(22)	603(28)	4.76(22)	2.62
C9	618(46)	528(52)	315(17)	487(26)	3.85(20)	1.96
C10	778(75)	671(62)	345(24)	598(33)	4.72(26)	2.26
C11	737(61)	622(53)	367(36)	575(28)	4.54(22)	2.01
C12	643(76)	470(22)	384(52)	499(29)	3.94(23)	1.68
N13	439(48)	402(31)	339(17)	393(19)	3.11(15)	1.30
C14	459(42)	382(39)	317(21)	386(20)	3.05(16)	1.45
C15	443(41)	382(44)	293(18)	373(20)	2.94(16)	1.52
N16	482(24)	357(38)	310(33)	383(20)	3.02(16)	1.56
C17	700(35)	431(62)	338(50)	490(31)	3.87(24)	2.07
C18	817(40)	531(89)	327(56)	558(35)	4.41(28)	2.50
C19	782(32)	628(91)	303(42)	571(33)	4.51(26)	2.58
C20	648(59)	498(30)	315(35)	487(27)	3.85(21)	2.06
C21	831(64)	621(44)	304(83)	585(39)	4.62(30)	2.73
C22	679(55)	550(23)	309(69)	513(24)	4.05(19)	2.20
C23	697(43)	373(30)	293(27)	454(21)	3.59(17)	2.38
C24	866(60)	467(36)	330(46)	554(27)	4.38(21)	2.62
C25	896(66)	513(49)	323(35)	577(30)	4.56(24)	2.78
C26	667(50)	442(32)	305(33)	471(24)	3.72(19)	2.18
N27	504(36)	420(52)	334(16)	419(20)	3.31(16)	1.51
C28	459(38)	357(50)	291(19)	369(19)	2.91(15)	1.58
C29	438(49)	351(40)	323(22)	371(22)	2.93(17)	1.35
C30	534(50)	341(48)	316(18)	397(23)	3.13(18)	1.69
O31	986(54)	719(52)	372(26)	692(26)	5.47(20)	2.65
O32	713(44)	524(43)	360(20)	533(23)	4.20(18)	1.98
C33	932(61)	555(72)	385(40)	624(32)	4.92(25)	2.42
P34	634(31)	529(11)	411(23)	524(13)	4.14(11)	1.54
F35	6237(307)	1556(364)	760(85)	2851(154)	22.51(122)	8.21
F36	3807(265)	1214(99)	736(96)	1919(109)	15.15(86)	5.17
F37	1974(113)	1069(33)	554(79)	1199(46)	9.47(37)	3.56
P38	560(15)	503(22)	411(19)	491(10)	3.88(8)	1.36
F39	4830(227)	896(115)	642(69)	2123(97)	16.76(76)	7.53
F40	2605(142)	1339(59)	609(139)	1518(68)	11.98(53)	4.28
F41	3893(108)	1192(90)	484(48)	1856(61)	14.66(48)	8.04

Tab. 5: Bond distances (Å, e.s.d.'s in parentheses)

Pd1	- N2	2.053(3)	Pd1	- N13	2.154(2)
Pd1	- N16	2.067(3)	Pd1	- N27	2.632(5)
Pd1	- C30	1.959(4)	N2	- C3	1.305(6)
N2	- C15	1.361(4)	C3	- C4	1.404(6)
C4	- C5	1.372(5)	C5	- C6	1.349(7)
C6	- C7	1.424(6)	C6	- C15	1.408(5)
C7	- C8	1.359(8)	C8	- C9	1.408(5)
C9	- C10	1.413(7)	C9	- C14	1.401(4)
C10	- C11	1.380(5)	C11	- C12	1.400(5)
C12	- N13	1.295(6)	N13	- C14	1.352(5)
C14	- C15	1.419(6)	N16	- C17	1.317(6)
N16	- C29	1.361(7)	C17	- C18	1.413(6)
C18	- C19	1.359(8)	C19	- C20	1.455(8)
C20	- C21	1.391(8)	C20	- C29	1.398(6)
C21	- C22	1.356(8)	C22	- C23	1.387(6)
C23	- C24	1.392(8)	C23	- C28	1.416(8)
C24	- C25	1.398(6)	C25	- C26	1.418(8)
C26	- N27	1.301(7)	N27	- C28	1.353(5)
C28	- C29	1.450(8)	C30	- O31	1.215(6)
C30	- O32	1.328(6)	O32	- C33	1.456(5)
P34	- F35	1.42(1)	P34	- F36	1.51(1)
P34	- F37	1.56(1)	P38	- F39	1.53(1)
P38	- F40	1.55(1)	P38	- F41	1.53(1)

Tab. 6: Bond angles (°, e.s.d.'s in parentheses)

N27 - Pd1 - C30	101.6(2)	N16 - Pd1 - C30	87.5(2)
N16 - Pd1 - N27	70.7(1)	N13 - Pd1 - C30	174.7(1)
N13 - Pd1 - N27	82.8(1)	N13 - Pd1 - N16	97.0(1)
N2 - Pd1 - C30	94.7(2)	N2 - Pd1 - N27	120.9(1)
N2 - Pd1 - N16	167.2(2)	N2 - Pd1 - N13	80.3(1)
Pd1 - N2 - C15	113.0(2)	Pd1 - N2 - C3	127.9(2)
C3 - N2 - C15	118.9(3)	N2 - C3 - C4	122.5(4)
C3 - C4 - C5	118.2(4)	C4 - C5 - C6	120.8(4)
C5 - C6 - C15	118.2(4)	C5 - C6 - C7	123.4(4)
C7 - C6 - C15	118.4(4)	C6 - C7 - C8	120.7(4)
C7 - C8 - C9	121.5(5)	C8 - C9 - C14	119.6(4)
C8 - C9 - C10	124.0(4)	C10 - C9 - C14	116.5(4)
C9 - C10 - C11	121.0(4)	C10 - C11 - C12	117.1(4)
C11 - C12 - N13	123.3(3)	Pd1 - N13 - C12	129.9(2)
C12 - N13 - C14	120.5(4)	Pd1 - N13 - C14	109.5(3)
C9 - C14 - N13	121.7(4)	N13 - C14 - C15	119.1(3)
C9 - C14 - C15	119.3(3)	C6 - C15 - C14	120.6(4)
N2 - C15 - C14	118.0(3)	N2 - C15 - C6	121.4(4)
Pd1 - N16 - C29	123.8(3)	Pd1 - N16 - C17	116.1(3)
C17 - N16 - C29	119.6(3)	N16 - C17 - C18	123.3(5)
C17 - C18 - C19	118.0(4)	C18 - C19 - C20	120.5(4)
C19 - C20 - C29	116.2(4)	C19 - C20 - C21	121.8(4)
C21 - C20 - C29	122.0(5)	C20 - C21 - C22	120.4(4)
C21 - C22 - C23	120.6(5)	C22 - C23 - C28	121.3(4)
C22 - C23 - C24	122.2(4)	C24 - C23 - C28	116.5(4)
C23 - C24 - C25	119.9(5)	C24 - C25 - C26	117.7(4)
C25 - C26 - N27	124.0(4)	Pd1 - N27 - C26	135.5(2)
C26 - N27 - C28	117.7(4)	Pd1 - N27 - C28	106.2(3)
C23 - C28 - N27	124.2(5)	N27 - C28 - C29	117.9(4)
C23 - C28 - C29	118.0(4)	C20 - C29 - C28	117.8(4)
N16 - C29 - C28	119.8(3)	N16 - C29 - C20	122.4(5)
Pd1 - C30 - O32	112.1(3)	Pd1 - C30 - O31	124.7(4)
O31 - C30 - O32	123.2(4)	C30 - O32 - C33	116.0(4)
F36 - P34 - F37	91.8(6)	F35 - P34 - F37	91.8(7)
F35 - P34 - F36	79.5(7)	F40 - P38 - F41	84.7(8)
F39 - P38 - F41	88.0(8)	F39 - P38 - F40	97.4(7)

Tab. 7: Torsion angles (°, e.s.d.'s in parentheses)

N27	-Pd1	-C30	-O31	-130.2(4)
N2	-Pd1	-C30	-O31	106.9(4)
N16	-Pd1	-C30	-O32	117.7(3)
N16	-Pd1	-N27	-C28	10.2(3)
N2	-Pd1	-N27	-C28	-163.9(3)
N16	-Pd1	-N27	-C26	179.7(5)
N2	-Pd1	-N27	-C26	5.6(5)
N2	-Pd1	-N16	-C17	-26.2(8)
N2	-Pd1	-N16	-C29	145.5(6)
N27	-Pd1	-N13	-C12	57.1(4)
N2	-Pd1	-N13	-C12	-179.8(4)
N13	-Pd1	-N2	-C3	178.0(4)
N16	-Pd1	-N2	-C3	99.3(7)
N27	-Pd1	-N2	-C3	-106.5(4)
C30	-Pd1	-N2	-C3	-0.0(4)
N27	-Pd1	-N13	-C14	-126.3(3)
N27	-Pd1	-N16	-C17	177.1(3)
C30	-Pd1	-N16	-C17	74.0(3)
Pd1	-N2	-C15	-C6	178.3(3)
Pd1	-N2	-C3	-C4	-176.1(3)
C3	-N2	-C15	-C14	-177.9(4)
N2	-C3	-C4	-C5	-1.5(7)
C4	-C5	-C6	-C7	176.9(5)
C5	-C6	-C15	-N2	-1.4(7)
C5	-C6	-C15	-C14	179.2(4)
C7	-C6	-C15	-C14	0.8(7)
C6	-C7	-C8	-C9	0.2(8)
C7	-C8	-C9	-C14	-0.4(7)
C8	-C9	-C14	-N13	-179.0(4)
C10	-C9	-C14	-C15	179.7(4)
C14	-C9	-C10	-C11	-0.8(7)
C10	-C11	-C12	-N13	-2.3(7)
C11	-C12	-N13	-C14	1.5(7)
C12	-N13	-C14	-C9	-0.2(6)
Pd1	-N13	-C14	-C15	3.0(4)
C9	-C14	-C15	-N2	179.6(4)
N13	-C14	-C15	-N2	-0.7(6)
Pd1	-N16	-C29	-C28	11.0(6)
C17	-N16	-C29	-C20	0.3(7)
C29	-N16	-C17	-C18	-0.5(7)
C17	-C18	-C19	-C20	1.4(7)
C18	-C19	-C20	-C29	-1.5(7)
C21	-C20	-C29	-N16	-179.6(4)
C19	-C20	-C21	-C22	179.4(5)
C29	-C20	-C21	-C22	-0.4(7)
C21	-C22	-C23	-C24	179.2(5)
C22	-C23	-C28	-C29	-1.6(7)
C22	-C23	-C24	-C25	-176.4(5)
C24	-C23	-C28	-N27	-1.8(7)
C23	-C24	-C25	-C26	-3.2(7)
C25	-C26	-N27	-Pd1	-168.7(3)
Pd1	-N27	-C28	-C23	171.9(4)
C26	-N27	-C28	-C29	179.6(4)
C23	-C28	-C29	-C20	2.6(7)
N27	-C28	-C29	-C20	-176.9(4)
Pd1	-C30	-O32	-C33	179.8(3)

N16	-Pd1	-C30	-O31	-60.5(4)
N27	-Pd1	-C30	-O32	48.0(3)
N2	-Pd1	-C30	-O32	-74.9(3)
N13	-Pd1	-N27	-C28	-89.8(3)
C30	-Pd1	-N27	-C26	-97.2(4)
N13	-Pd1	-N27	-C26	79.7(4)
N13	-Pd1	-N16	-C17	-103.1(3)
N13	-Pd1	-N16	-C29	68.7(3)
N2	-Pd1	-N13	-C14	-3.2(3)
N16	-Pd1	-N13	-C12	-12.4(4)
N13	-Pd1	-N2	-C15	2.9(3)
N16	-Pd1	-N2	-C15	-75.8(7)
N27	-Pd1	-N2	-C15	78.4(3)
C30	-Pd1	-N2	-C15	-175.1(3)
N16	-Pd1	-N13	-C14	164.2(3)
N27	-Pd1	-N16	-C29	-11.1(3)
C30	-Pd1	-N16	-C29	-114.3(4)
C30	-Pd1	-N27	-C28	93.3(3)
Pd1	-N2	-C15	-C14	-2.3(5)
C3	-N2	-C15	-C6	2.7(6)
C15	-N2	-C3	-C4	-1.2(7)
C3	-C4	-C5	-C6	2.8(7)
C4	-C5	-C6	-C15	-1.4(7)
C7	-C6	-C15	-N2	-179.8(4)
C5	-C6	-C7	-C8	-178.7(5)
C15	-C6	-C7	-C8	-0.4(8)
C7	-C8	-C9	-C10	-179.2(5)
C8	-C9	-C14	-C15	0.8(6)
C8	-C9	-C10	-C11	178.0(5)
C10	-C9	-C14	-N13	-0.1(6)
C9	-C10	-C11	-C12	1.9(7)
C11	-C12	-N13	-Pd1	177.8(3)
Pd1	-N13	-C14	-C9	-177.2(3)
C12	-N13	-C14	-C15	-180.0(4)
C9	-C14	-C15	-C6	-1.0(6)
N13	-C14	-C15	-C6	178.8(4)
Pd1	-N16	-C29	-C20	-171.2(3)
Pd1	-N16	-C17	-C18	171.6(4)
C17	-N16	-C29	-C28	-177.6(4)
N16	-C17	-C18	-C19	-0.4(7)
C18	-C19	-C20	-C21	178.7(5)
C19	-C20	-C29	-N16	0.7(7)
C19	-C20	-C29	-C28	178.6(4)
C21	-C20	-C29	-C28	-1.7(7)
C20	-C21	-C22	-C23	1.5(7)
C21	-C22	-C23	-C28	-0.5(7)
C22	-C23	-C28	-N27	177.9(4)
C24	-C23	-C28	-C29	178.8(4)
C28	-C23	-C24	-C25	3.3(7)
C24	-C25	-C26	-N27	1.6(7)
C25	-C26	-N27	-C28	-0.1(7)
C26	-N27	-C28	-C23	0.2(7)
Pd1	-N27	-C28	-C29	-8.7(5)
C23	-C28	-C29	-N16	-179.5(4)
N27	-C28	-C29	-N16	1.0(7)
O31	-C30	-O32	-C33	-1.9(6)