© 1999 American Chemical Society, Organometallics, Allen om990014h Supporting Info Page 1

Table S1 - Final Coordinates and Isotropic Thermal Parameters for non-H atoms for **1c**

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
Pd1	0.25953(3)	0.15343(4)	0.70806(4)	0.0293(2)
Cl1	0.17386(10)	0.15597(13)	0.81630(12)	0.0371(7)
Cl2	0.32621(11)	0.29020(12)	0.77589(13)	0.0391(8)
P1	0.31887(10)	0.15534(14)	0.58780(12)	0.0277(7)
P2	0.14146(11)	0.12968(13)	0.48223(14)	0.0328(8)
N1	0.2359(4)	-0.2825(4)	0.8773(5)	0.048(3)
C1	0.1585(4)	0.0369(5)	0.5607(6)	0.026(3)
C2	0.2061(4)	0.0371(5)	0.6502(5)	0.029(3)
C3	0.2185(4)	-0.0460(5)	0.7058(5)	0.027(3)
C4	0.2558(4)	-0.0465(5)	0.8032(6)	0.035(3)
C5	0.2602(4)	-0.1232(5)	0.8601(6)	0.035(3)
C6	0.2295(4)	-0.2046(5)	0.8207(6)	0.034(3)
C7	0.1946(5)	-0.2093(5)	0.7219(6)	0.046(3)
C8	0.1892(4)	-0.1313(5)	0.6688(6)	0.042(3)
C9	0.2689(5)	-0.2759(5)	0.9772(6)	0.058(4)
C10	0.2039(4)	-0.3696(4)	0.8352(6)	0.058(4)
C11	0.0983(4)	0.0876(4)	0.3658(5)	0.0296(19)
C12	0.0222(4)	0.0439(5)	0.3495(6)	0.047(2)
C13	-0.0149(5)	0.0105(5)	0.2611(5)	0.047(2)
C14	0.0222(4)	0.0211(4)	0.1873(5)	0.042(2)
C15	0.0950(4)	0.0660(5)	0.2010(6)	0.047(2)
C16	0.1339(5)	0.0996(5)	0.2888(5)	0.042(2)
C17	0.0642(4)	0.2052(4)	0.5076(5)	0.0315(19)
C18	0.0269(4)	0.2696(4)	0.4424(5)	0.038(2)
C19	-0.0363(4)	0.3228(5)	0.4582(5)	0.045(2)
C20	-0.0606(4)	0.3131(5)	0.5418(5)	0.046(2)
C21	-0.0229(5)	0.2485(5)	0.6069(6)	0.056(3)
C22	0.0394(4)	0.1950(5)	0.5911(5)	0.040(2)
C23	0.2369(3)	0.1892(4)	0.4864(4)	0.028(3)
C24	0.3980(4)	0.2377(4)	0.5852(5)	0.030(2)
C25	0.3936(4)	0.3006(5)	0.5119(5)	0.039(2)
C26	0.4573(4)	0.3588(5)	0.5095(5)	0.049(2)
C27	0.5258(4)	0.3562(5)	0.5822(5)	0.054(2)
C28	0.5344(5)	0.2949(5)	0.6535(6)	0.053(2)
C29	0.4706(4)	0.2357(5)	0.6575(6)	0.048(2)
C30	0.3641(4)	0.0498(4)	0.5590(5)	0.0287(19)
C31	0.3670(4)	0.0269(5)	0.4668(5)	0.038(2)
C32	0.4073(4)	-0.0510(5)	0.4495(5)	0.041(2)
C33	0.4463(4)	-0.1055(5)	0.5238(5)	0.039(2)
C34	0.4435(4)	-0.0830(5)	0.6151(5)	0.041(2)
C35	0.4022(4)	-0.0071(4)	0.6315(5)	0.035(2)
Cl3	0.25210(16)	0.46722(19)	0.55230(19)	0.0995(12)
Cl4	0.3805(2)	0.5865(2)	0.6532(2)	0.1542(18)
C36	0.3350(6)	0.4848(6)	0.6510(7)	0.095(3)

Table S2 - Final Coordinates and Isotropic Thermal Parameters for H-atoms for **1c**

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
H1	0.134(3)	-0.020(4)	0.525(4)	0.039(19)
H4	0.27910	0.00860	0.83160	0.0420
H5	0.28460	-0.11880	0.92630	0.0410
H7	0.17530	-0.26540	0.69280	0.0540
H8	0.16400	-0.13540	0.60300	0.0510
H9A	0.26950	-0.33630	1.00600	0.0880
H9B	0.23430	-0.23500	1.00430	0.0880
H9C	0.32480	-0.25170	0.99040	0.0880
H10A	0.21380	-0.41660	0.88430	0.0880
H10B	0.23120	-0.38630	0.78540	0.0880
H10C	0.14460	-0.36390	0.80760	0.0880
H12	-0.00410	0.03710	0.39960	0.0540
H13	-0.06630	-0.01990	0.25170	0.0610
H14	-0.00350	-0.00300	0.12670	0.0540
H15	0.11900	0.07410	0.14920	0.0550
H16	0.18440	0.13100	0.29720	0.0490
H18	0.04570	0.27780	0.38640	0.0480
H19	-0.06180	0.36510	0.41140	0.0550
H20	-0.10380	0.35040	0.55340	0.0580
H21	-0.04080	0.24040	0.66310	0.0670
H22	0.06560	0.15210	0.63750	0.0490
H23A	0.22790	0.25560	0.48980	0.0340
H23B	0.25460	0.17690	0.42740	0.0340
H25	0.34500	0.30230	0.46210	0.0480
H26	0.45190	0.39910	0.45750	0.0620
H27	0.56820	0.39890	0.58080	0.0680
H28	0.58410	0.29260	0.70080	0.0660
H29	0.47620	0.19480	0.70880	0.0560
H31	0.34130	0.06460	0.41570	0.0450
H32	0.40820	-0.06690	0.38660	0.0510
H33	0.47530	-0.15850	0.51300	0.0470
H34	0.47040	-0.12030	0.66710	0.0500
H35	0.39950	0.00690	0.69460	0.0430
H36A	0.31500	0.47810	0.70930	0.1140
H36B	0.37630	0.43660	0.65180	0.1140

Table S3. Anisotropic Thermal Parameters for **1c**

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
Pd1	0.0293(3)	0.0351(4)	0.0258(3)	-0.0013(4)	0.0111(3)	-0.0006(4)
Cl1	0.0349(11)	0.0464(13)	0.0349(12)	-0.0053(12)	0.0179(9)	-0.0068(11)
Cl2	0.0449(13)	0.0383(12)	0.0393(14)	-0.0064(10)	0.0203(10)	-0.0070(10)
P1	0.0277(11)	0.0317(12)	0.0254(12)	0.0003(12)	0.0096(9)	-0.0005(11)
P2	0.0283(12)	0.0395(15)	0.0306(13)	0.0017(10)	0.0074(10)	-0.0038(10)
N1	0.062(5)	0.038(5)	0.041(5)	0.012(4)	0.007(4)	-0.004(4)
C1	0.025(5)	0.017(5)	0.038(5)	-0.001(4)	0.009(4)	-0.008(4)
C2	0.029(5)	0.033(5)	0.027(5)	-0.005(4)	0.013(4)	-0.006(4)
C3	0.020(5)	0.036(5)	0.029(5)	0.004(4)	0.011(4)	0.004(4)
C4	0.034(5)	0.032(5)	0.036(6)	-0.008(5)	0.002(4)	-0.010(4)
C5	0.027(5)	0.037(6)	0.040(6)	-0.002(4)	0.008(4)	-0.004(4)
C6	0.024(5)	0.035(5)	0.045(6)	0.004(5)	0.010(4)	0.001(4)
C7	0.063(6)	0.037(6)	0.038(6)	0.000(5)	0.013(5)	0.003(5)
C8	0.046(5)	0.046(6)	0.034(5)	0.002(5)	0.007(4)	0.008(4)
C9	0.063(7)	0.058(7)	0.054(7)	0.029(5)	0.019(6)	0.019(5)
C10	0.046(6)	0.041(6)	0.076(7)	0.009(5)	-0.005(5)	0.000(4)
C23	0.027(4)	0.039(5)	0.021(4)	0.001(3)	0.014(4)	0.002(3)
Cl3	0.099(2)	0.118(2)	0.085(2)	0.0226(18)	0.0293(18)	-0.0084(18)
Cl4	0.239(4)	0.100(2)	0.098(3)	0.019(2)	-0.008(3)	-0.075(2)

Table S4 - Bond Distances (Angstrom) and Distances (deg.) for **1c**

Pd1	-Cl1	2.3785(18)	C14	-C15	1.361(10)
Pd1	-Cl2	2.3937(19)	C15	-C16	1.376(11)
Pd1	-P1	2.2146(18)	C17	-C22	1.385(10)
Pd1	-C2	2.017(7)	C17	-C18	1.377(9)
Cl3	-C36	1.757(10)	C18	-C19	1.382(10)
Cl4	-C36	1.676(10)	C19	-C20	1.381(10)
P1	-C24	1.805(7)	C20	-C21	1.380(11)
P1	-C23	1.823(6)	C21	-C22	1.373(11)
P1	-C30	1.821(7)	C24	-C25	1.399(10)
P2	-C11	1.781(7)	C24	-C29	1.402(11)
P2	-C1	1.756(8)	C25	-C26	1.377(10)
P2	-C23	1.814(6)	C26	-C27	1.359(10)
P2	-C17	1.813(7)	C27	-C28	1.354(11)
N1	-C9	1.426(11)	C28	-C29	1.393(11)
N1	-C6	1.399(10)	C30	-C31	1.394(10)
N1	-C10	1.464(9)	C30	-C35	1.375(9)
C1	-C2	1.350(11)	C31	-C32	1.384(10)
C2	-C3	1.452(10)	C32	-C33	1.375(10)
C3	-C8	1.405(10)	C33	-C34	1.380(10)
C3	-C4	1.401(11)	C34	-C35	1.365(10)
C4	-C5	1.390(11)	C1	-H1	0.96(5)
C5	-C6	1.372(11)	C4	-H4	0.9509
C6	-C7	1.414(12)	C5	-H5	0.9505
C7	-C8	1.373(11)	C7	-H7	0.9498
C11	-C12	1.398(10)	C8	-H8	0.9494
C11	-C16	1.403(10)	C9	-H9B	0.9803
C12	-C13	1.375(11)	C9	-H9C	0.9789
C13	-C14	1.375(10)	C9	-H9A	0.9799
C10	-H10C	0.9789	C23	-H23A	0.9902
C10	-H10A	0.9801	C25	-H25	0.9501
C10	-H10B	0.9800	C26	-H26	0.9498
C12	-H12	0.9509	C27	-H27	0.9510
C13	-H13	0.9496	C28	-H28	0.9501
C14	-H14	0.9498	C29	-H29	0.9505
C15	-H15	0.9494	C31	-H31	0.9498
C16	-H16	0.9505	C32	-H32	0.9496
C18	-H18	0.9500	C33	-H33	0.9509
C19	-H19	0.9508	C34	-H34	0.9505
C20	-H20	0.9506	C35	-H35	0.9487
C21	-H21	0.9508	C36	-H36A	0.9897
C22	-H22	0.9499	C36	-H36B	0.9911
C23	-H23B	0.9899			

Cl1	-Pd1	-Cl2	90.69(7)	C3	-C4	-C5	123.5(7)
Cl1	-Pd1	-P1	169.82(7)	C4	-C5	-C6	120.0(8)
Cl1	-Pd1	-C2	90.6(2)	N1	-C6	-C5	120.1(7)
Cl2	-Pd1	-P1	93.38(7)	N1	-C6	-C7	120.7(7)
Cl2	-Pd1	-C2	178.5(2)	C5	-C6	-C7	119.1(7)
P1	-Pd1	-C2	85.5(2)	C6	-C7	-C8	119.0(7)
Pd1	-P1	-C23	104.19(19)	C3	-C8	-C7	124.2(8)
Pd1	-P1	-C24	120.1(2)	P2	-C11	-C12	117.6(6)
Pd1	-P1	-C30	117.7(2)	P2	-C11	-C16	124.1(5)
C23	-P1	-C24	102.4(3)	C12	-C11	-C16	118.2(7)
C23	-P1	-C30	108.8(3)	C11	-C12	-C13	120.6(7)
C24	-P1	-C30	102.5(3)	C12	-C13	-C14	120.0(7)
C1	-P2	-C11	108.1(3)	C13	-C14	-C15	120.2(7)

C1	-P2	-C17	110.8(3)	C14	-C15	-C16	121.1(7)
C1	-P2	-C23	110.5(3)	C11	-C16	-C15	119.8(7)
C11	-P2	-C17	105.1(3)	P2	-C17	-C18	120.6(5)
C11	-P2	-C23	110.5(3)	P2	-C17	-C22	119.7(5)
C17	-P2	-C23	111.6(3)	C18	-C17	-C22	119.6(6)
C6	-N1	-C9	119.9(6)	C17	-C18	-C19	120.9(7)
C6	-N1	-C10	120.2(7)	C18	-C19	-C20	119.5(7)
C9	-N1	-C10	119.8(6)	C19	-C20	-C21	119.3(7)
P2	-C1	-C2	126.0(6)	C20	-C21	-C22	121.3(7)
Pd1	-C2	-C1	120.1(5)	C17	-C22	-C21	119.3(7)
Pd1	-C2	-C3	119.5(5)	P1	-C23	-P2	112.4(3)
C1	-C2	-C3	120.3(7)	P1	-C24	-C25	123.9(5)
C2	-C3	-C4	122.3(7)	P1	-C24	-C29	118.7(5)
C2	-C3	-C8	123.3(7)	C25	-C24	-C29	117.3(6)
C4	-C3	-C8	114.2(7)	C24	-C25	-C26	122.2(7)
C25	-C26	-C27	118.6(7)	N1	-C10	-H10A	109.46
C26	-C27	-C28	121.7(7)	N1	-C10	-H10B	109.49
C27	-C28	-C29	120.6(8)	N1	-C10	-H10C	109.43
C24	-C29	-C28	119.5(7)	H10A	-C10	-H10B	109.49
P1	-C30	-C31	122.8(5)	H10A	-C10	-H10C	109.45
P1	-C30	-C35	119.0(5)	H10B	-C10	-H10C	109.50
C31	-C30	-C35	118.1(6)	C11	-C12	-H12	119.68
C30	-C31	-C32	120.5(6)	C13	-C12	-H12	119.71
C31	-C32	-C33	120.0(7)	C12	-C13	-H13	120.00
C32	-C33	-C34	119.6(7)	C14	-C13	-H13	119.95
C33	-C34	-C35	120.2(7)	C13	-C14	-H14	119.76
C30	-C35	-C34	121.6(7)	C15	-C14	-H14	120.01
P2	-C1	-H1	110(3)	C14	-C15	-H15	119.41
C2	-C1	-H1	124(3)	C16	-C15	-H15	119.54
C3	-C4	-H4	118.31	C11	-C16	-H16	120.09
C5	-C4	-H4	118.24	C15	-C16	-H16	120.13
C4	-C5	-H5	120.07	C17	-C18	-H18	119.62
C6	-C5	-H5	119.96	C19	-C18	-H18	119.51
C6	-C7	-H7	120.56	C18	-C19	-H19	120.18
C8	-C7	-H7	120.48	C20	-C19	-H19	120.34
C3	-C8	-H8	117.88	C19	-C20	-H20	120.31
C7	-C8	-H8	117.96	C21	-C20	-H20	120.37
N1	-C9	-H9A	109.49	C20	-C21	-H21	119.29
N1	-C9	-H9B	109.44	C22	-C21	-H21	119.37
N1	-C9	-H9C	109.52	C17	-C22	-H22	120.46
H9A	-C9	-H9B	109.50	C21	-C22	-H22	120.21
H9A	-C9	-H9C	109.47	P1	-C23	-H23A	109.06
H9B	-C9	-H9C	109.41	P1	-C23	-H23B	109.07
P2	-C23	-H23A	109.14	C31	-C32	-H32	120.09
P2	-C23	-H23B	109.17	C33	-C32	-H32	119.95
H23A	-C23	-H23B	107.88	C32	-C33	-H33	120.17
C24	-C25	-H25	118.84	C34	-C33	-H33	120.23
C26	-C25	-H25	118.92	C33	-C34	-H34	119.94
C25	-C26	-H26	120.79	C35	-C34	-H34	119.91
C27	-C26	-H26	120.66	C30	-C35	-H35	119.25
C26	-C27	-H27	119.14	C34	-C35	-H35	119.11
C28	-C27	-H27	119.17	Cl3	-C36	-Cl4	114.4(5)
C27	-C28	-H28	119.74	Cl3	-C36	-H36A	108.69
C29	-C28	-H28	119.68	Cl3	-C36	-H36B	108.61
C24	-C29	-H29	120.23	Cl4	-C36	-H36A	108.65
C28	-C29	-H29	120.26	Cl4	-C36	-H36B	108.68
C30	-C31	-H31	119.67	H36A	-C36	-H36B	107.58
C32	-C31	-H31	119.79				