

Electronic Supplementary Information

A study of M–X–BR₃ (M = Pt, Pd or Rh; X = Cl or I) interactions in Square Planar Ambiphilic Ligand Complexes: Structural, Spectroscopic, Electrochemical and Computational Comparisons with Borane-Free Analogues

David J. H. Emslie,^{*a} Bradley E. Cowie,^a Simon R. Oakley,^a Natalie L. Huk,^a
Hilary A. Jenkins,^b Laura E. Harrington^b and James F. Britten^b

a) Department of Chemistry, McMaster University, 1280 Main Street West, Hamilton, ON, L8S 4M1, Canada. Fax: (905)-522-2509; Tel: (905)-525-9140 x 23307. E-mail: emslied@mcmaster.ca.

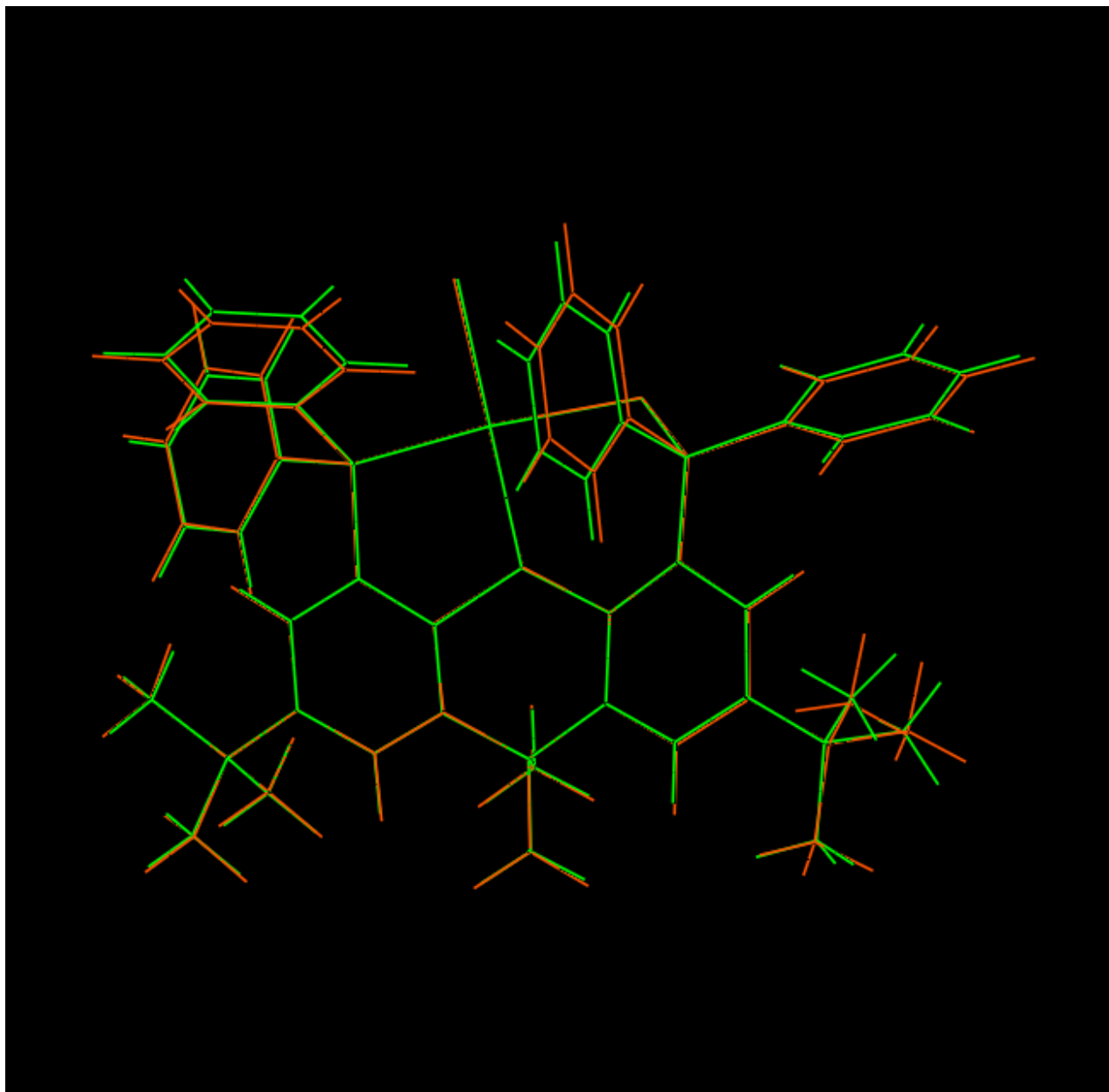
b) McMaster Analytical X-Ray Diffraction Facility, Department of Chemistry, McMaster University, 1280 Main Street West, Hamilton, ON, L8S 4M1, Canada.

Contents

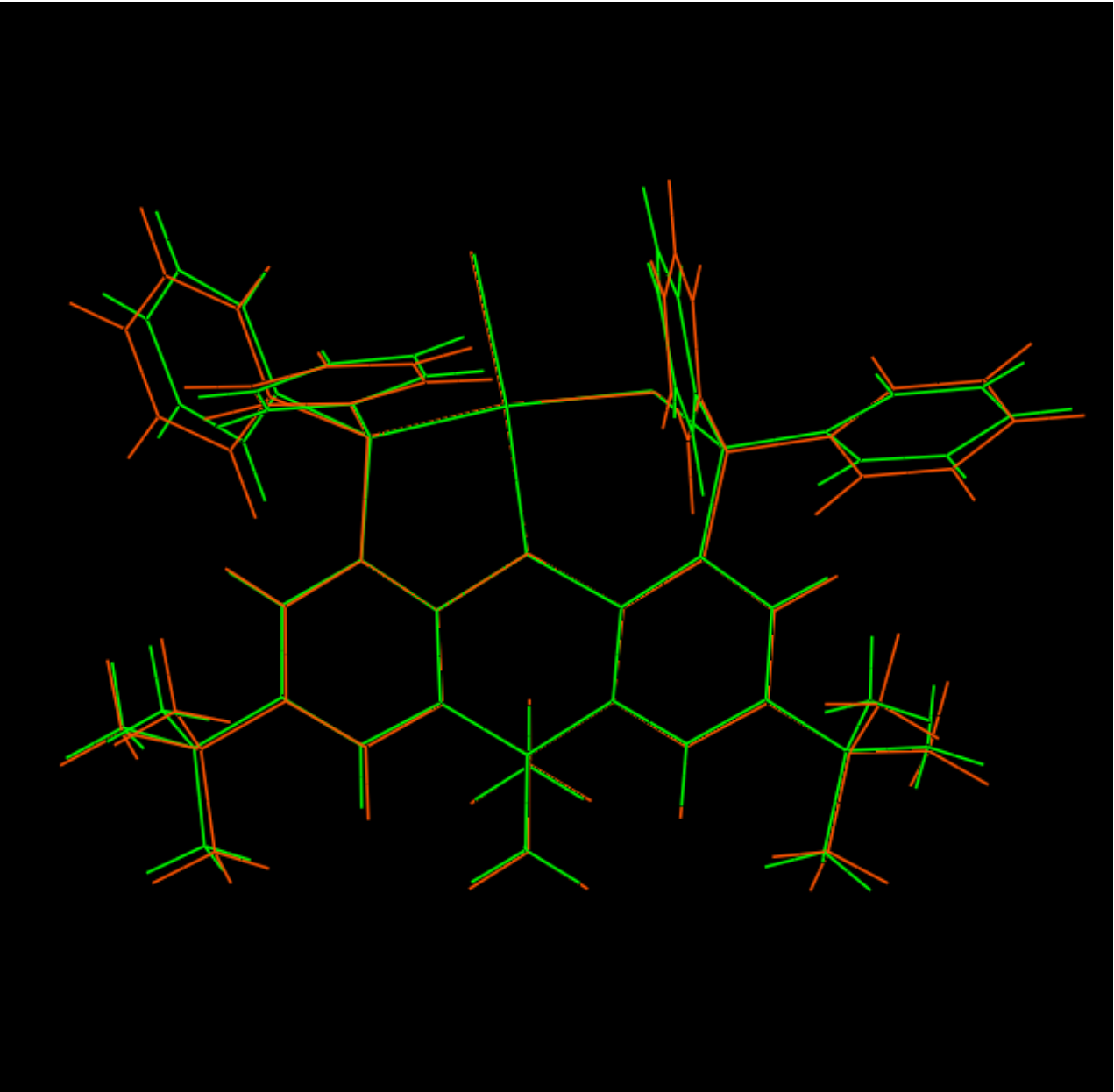
1.	Geometry Optimized Structures (ADF, all-electron, TZ2P, ZORA, VWN, PW91)	<i>page 2</i>
2.	Numbered ORTEP and Crystallographic Data for 1B ·2CH ₂ Cl ₂	<i>page 14</i>
3.	Numbered ORTEP and Crystallographic Data for 2B ·2CH ₂ Cl ₂	<i>page 29</i>
4.	Numbered ORTEP and Crystallographic Data for solvent-free 2B	<i>page 45</i>
5.	Numbered ORTEP and Crystallographic Data for 4B ·1.31CH ₂ Cl ₂	<i>page 59</i>
6.	Numbered ORTEP and Crystallographic Data for 2H ·2CH ₂ Cl ₂	<i>page 74</i>
7.	Numbered ORTEP and Crystallographic Data for 4H ·1.5CH ₂ Cl ₂	<i>page 89</i>

(1) Geometry Optimized Structures for **1B-5B**, **1H-5H**, the TXPB ligand, and [TXPB-I]⁻ (ADF 2010.2, all-electron, TZ2P, ZORA, VWN, PW91)

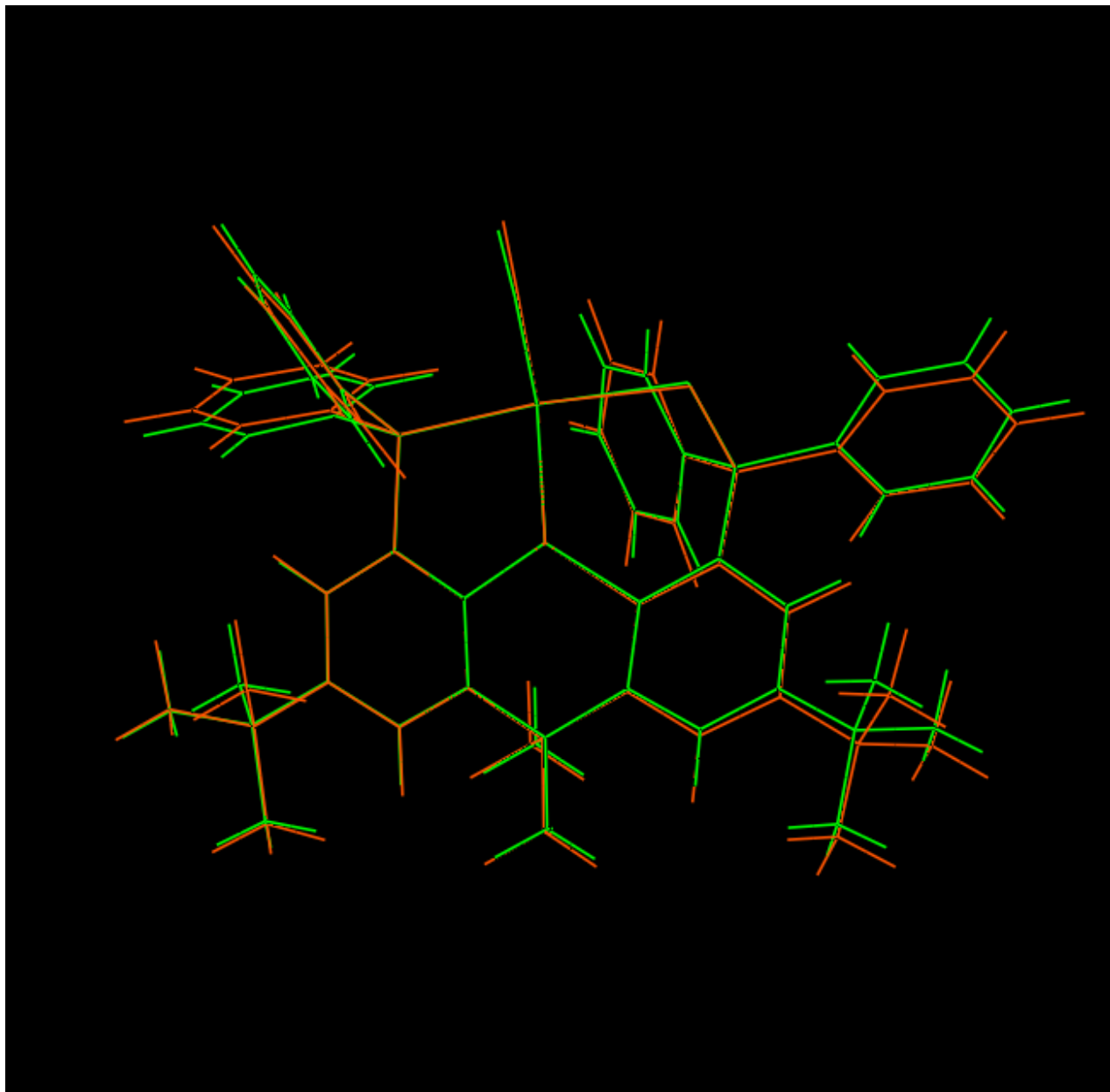
[PtCl₂(TXPB)] (**1B**) calculated (red) and experimental (green)



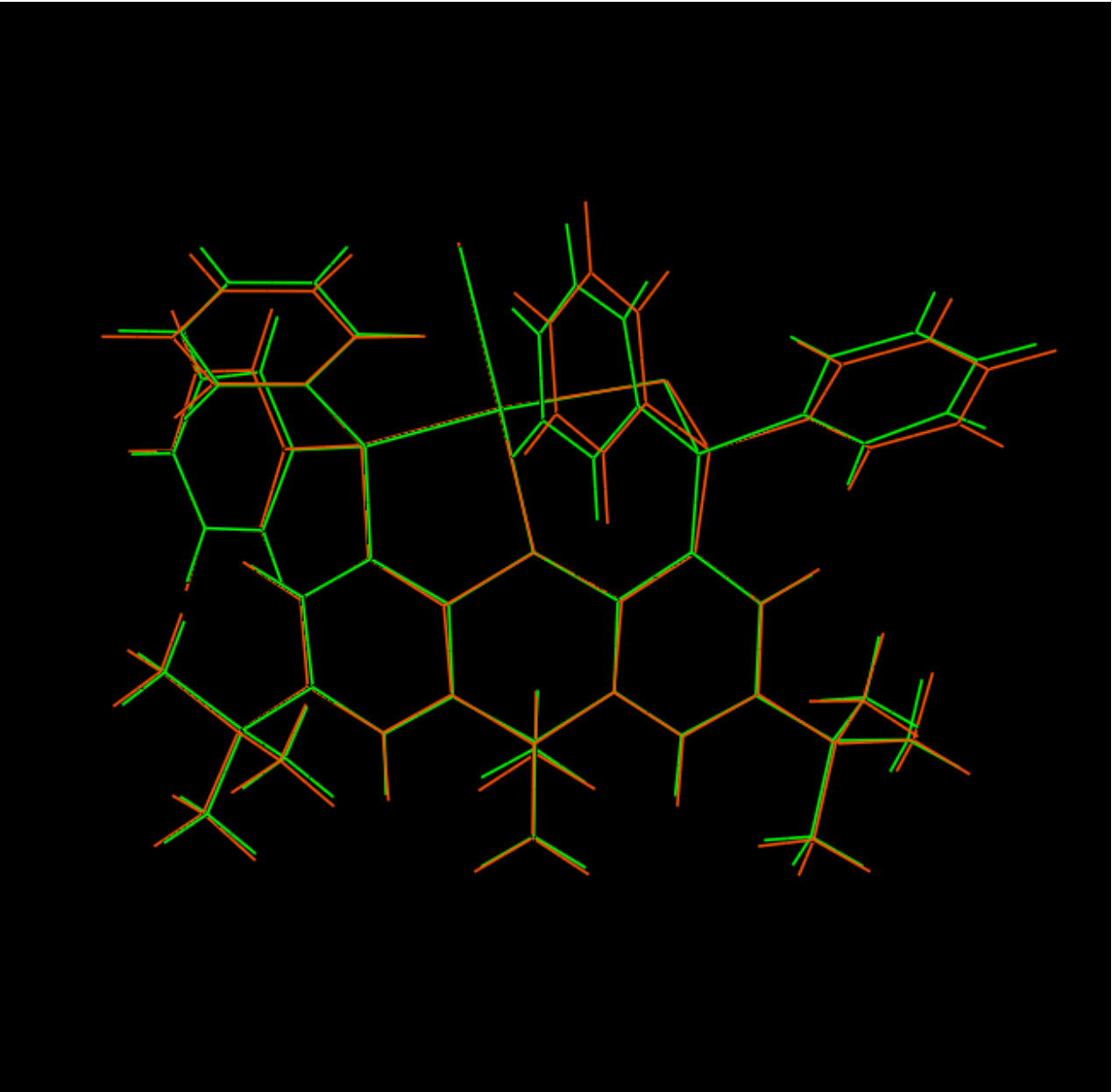
[PdCl₂(TXPB)] (**2B**) calculated (red) and experimental (green)



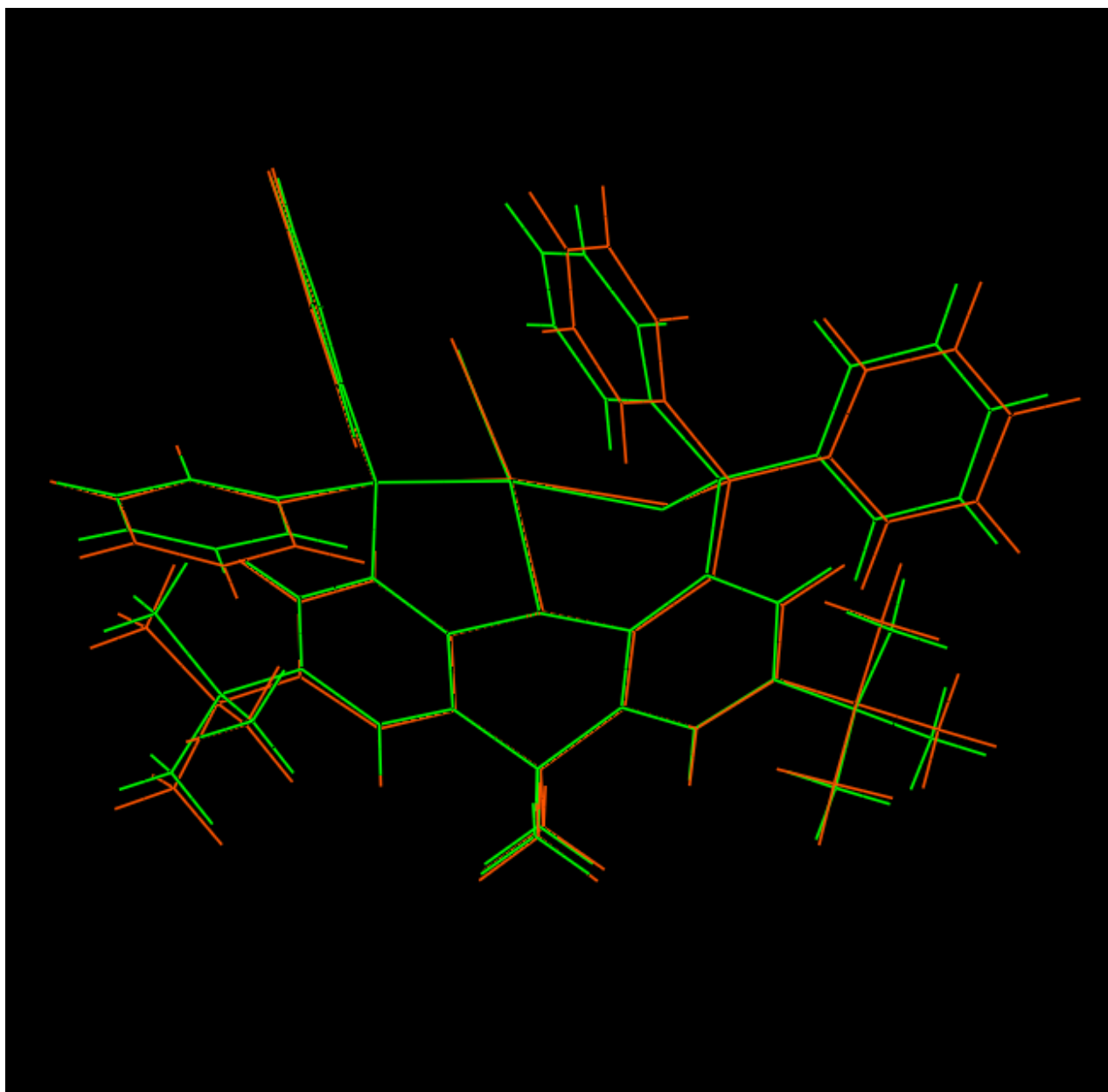
[RhCl(CO)(TXPB)] (**3B**) calculated (red) and experimental (green)



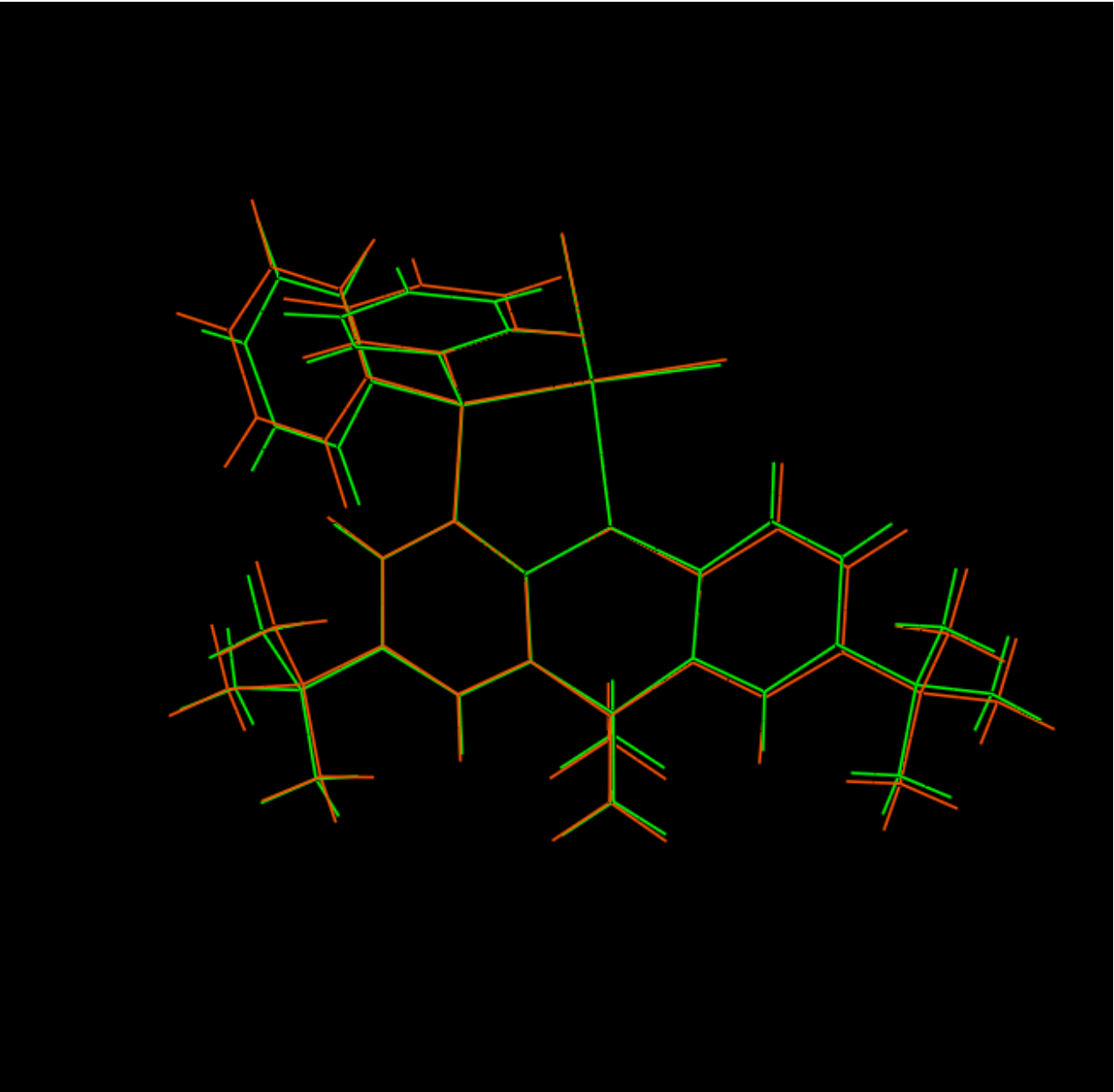
[PtI₂(TXPB)] (**4B**) calculated (red) and experimental (green)



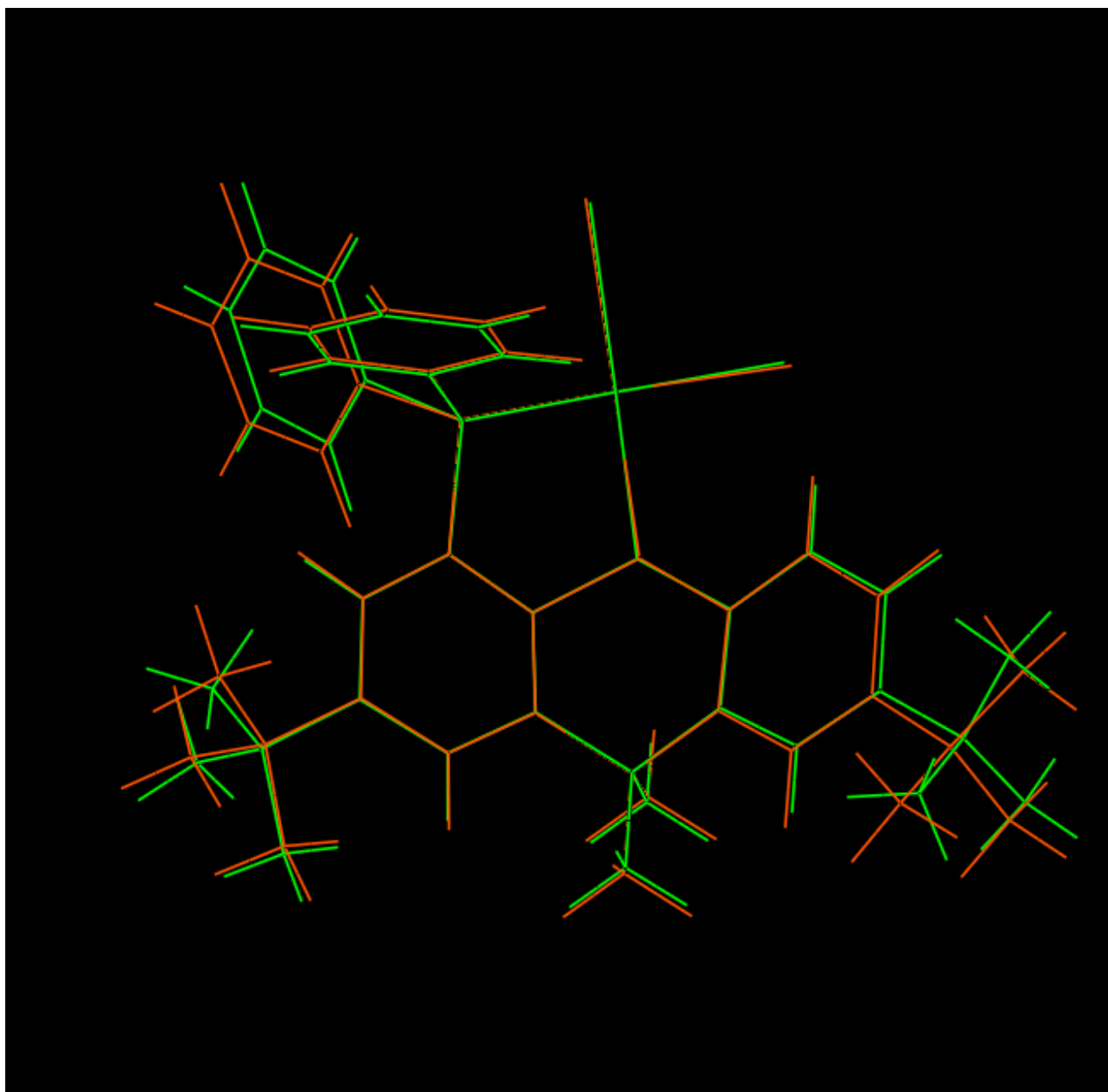
[RhI(CO)(TXPB)] (**5B**) calculated (red) and experimental (green)



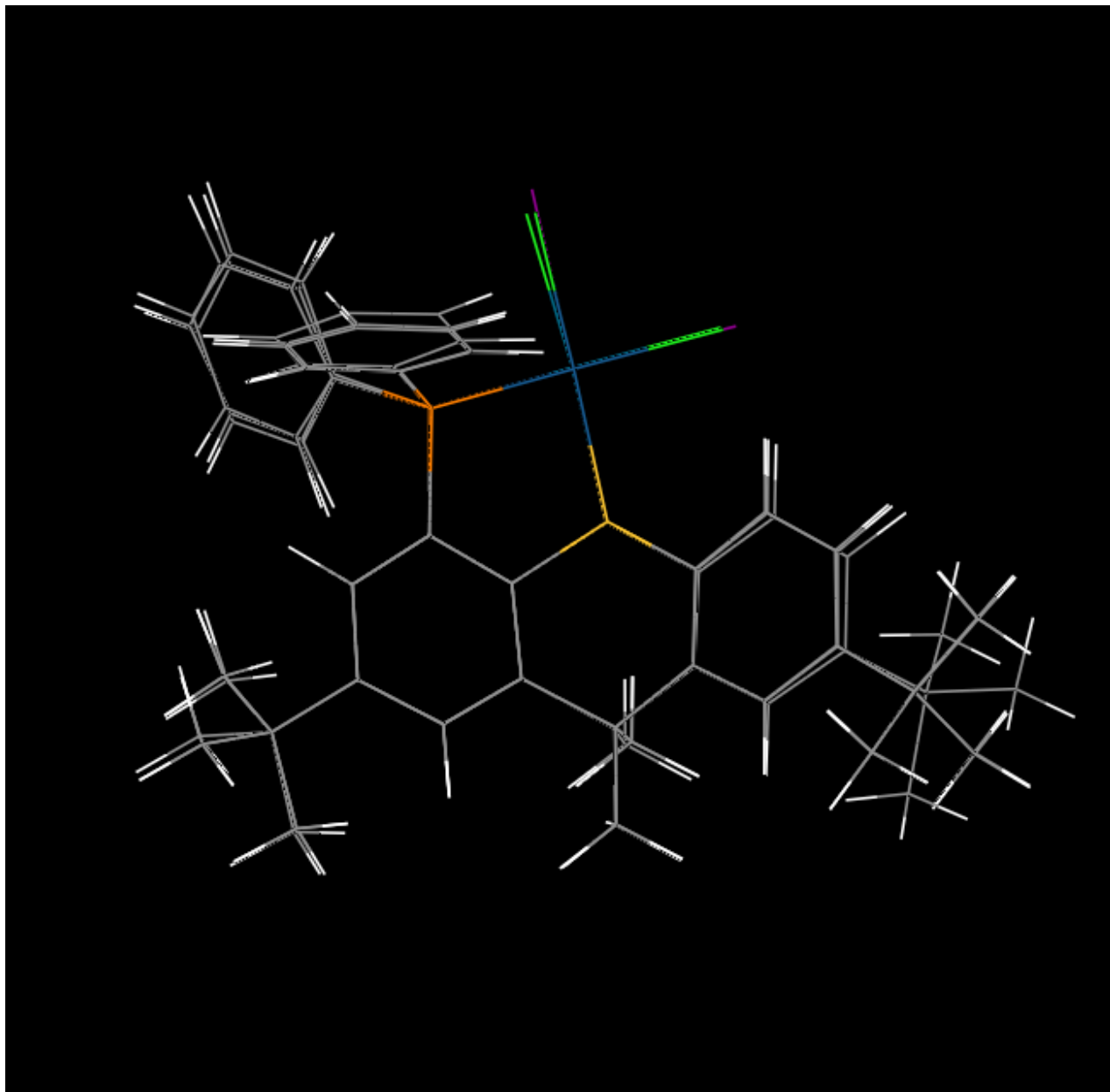
[PdCl₂(TXPH)] (**2H**) calculated (red) and experimental (green)



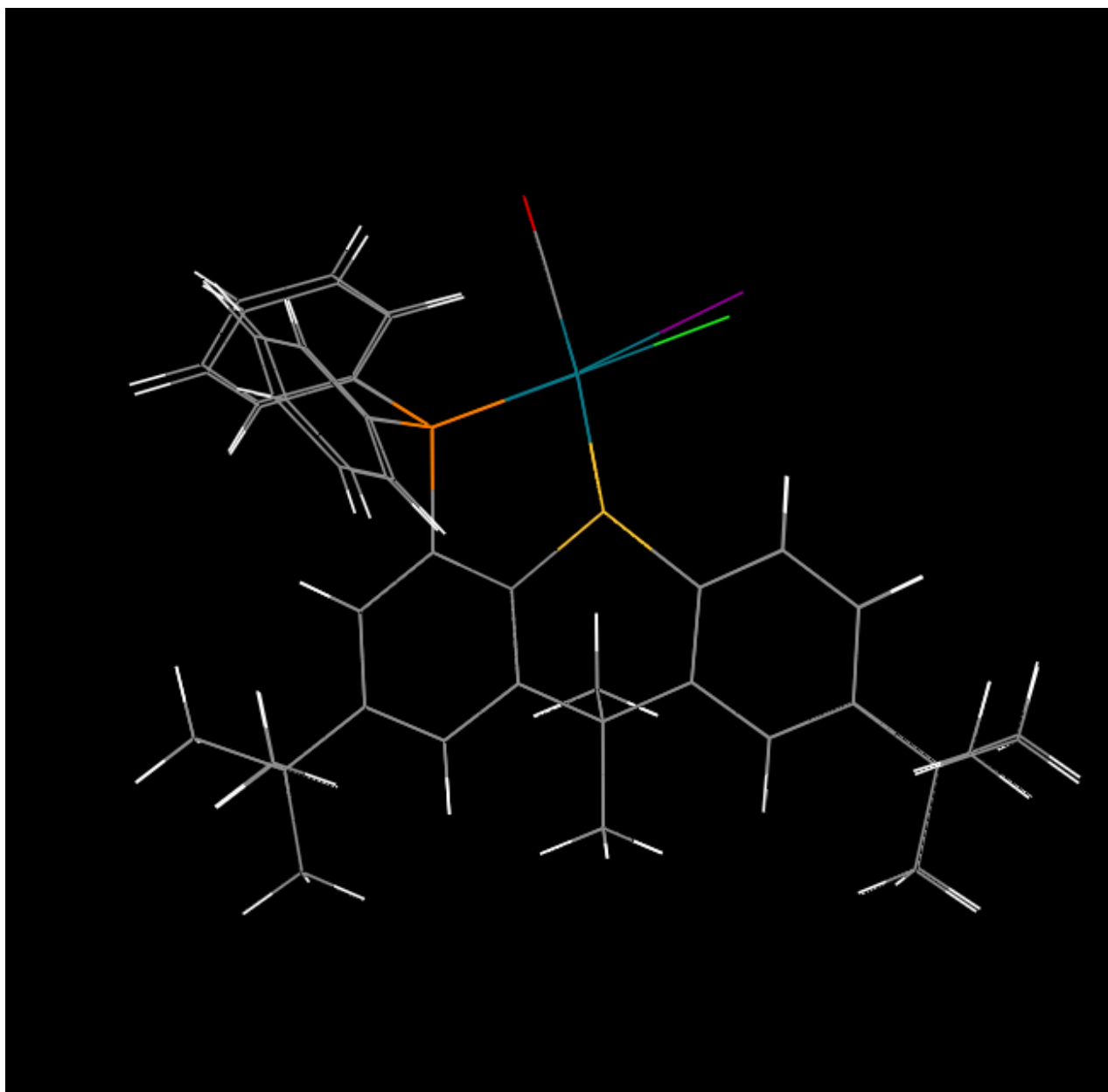
[PtI₂(TXPH)] (**4H**) calculated (red) and experimental (green)

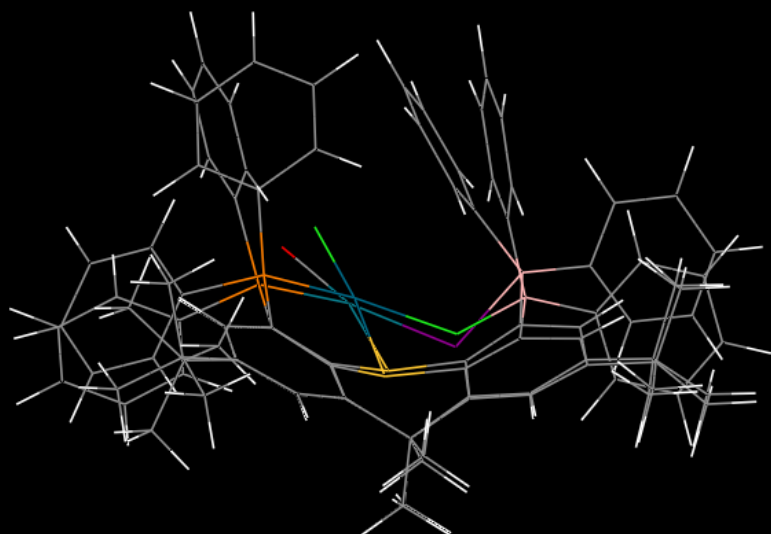


Calculated structures of [PtCl₂(TXPH)] (**1H**), [PdCl₂(TXPH)] (**2H**) and [PtI₂(TXPH)] (**4H**).

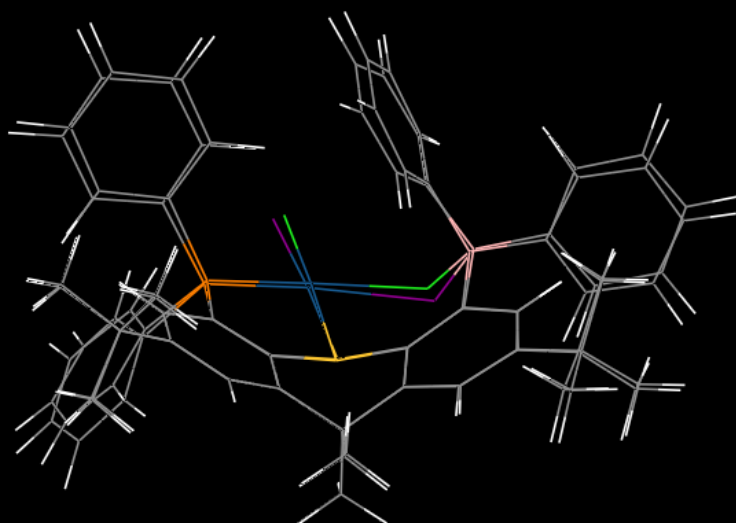


Calculated structures of $[\text{RhCl}(\text{CO})(\text{TXPH})]$ (**3H**) and $[\text{RhI}(\text{CO})(\text{TXPH})]$ (**5H**).

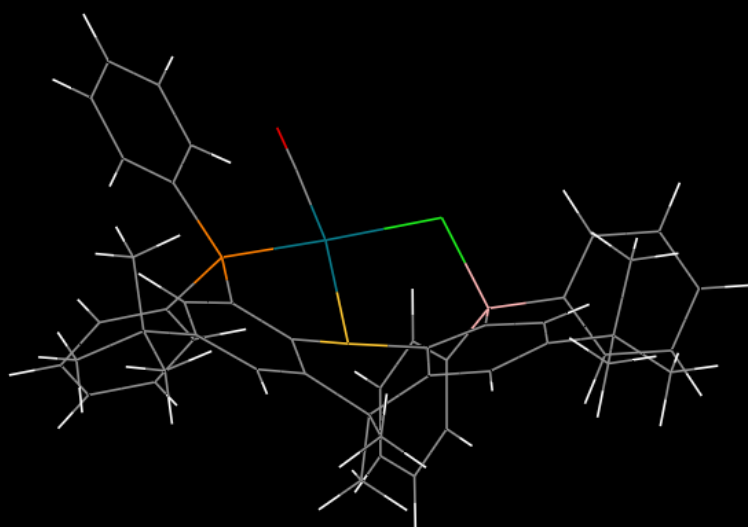




Calculated
[PdCl₂(TXPB)] (**2B**)
and
[RhI(CO)(TXPB)] (**5B**)

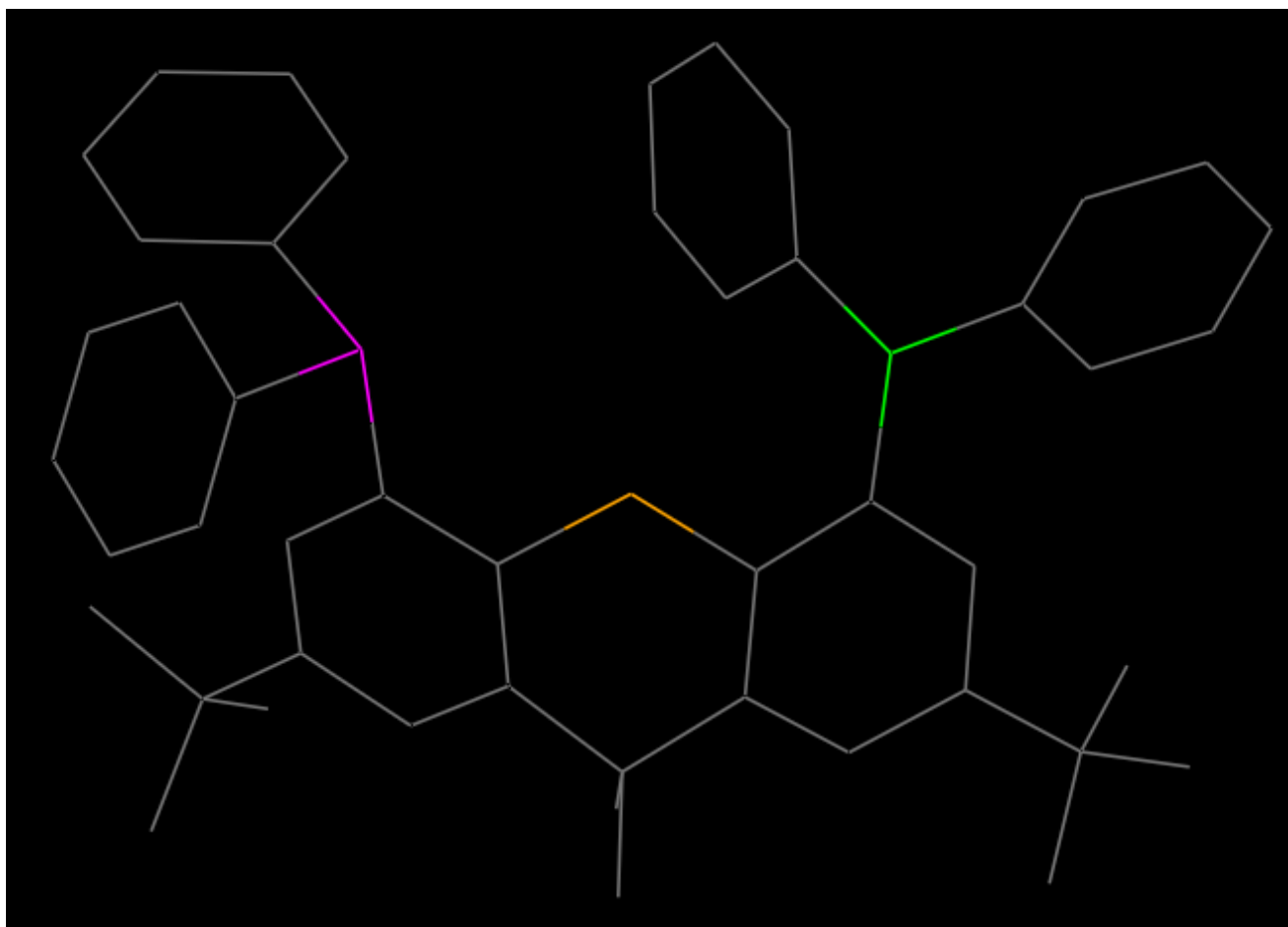


Calculated
[PtCl₂(TXPB)] (**1B**)
and
[PtI₂(TXPB)] (**4B**)



Calculated
[RhCl(CO)(TXPB)] (**3B**)

Calculated structure of the TXPB ligand.



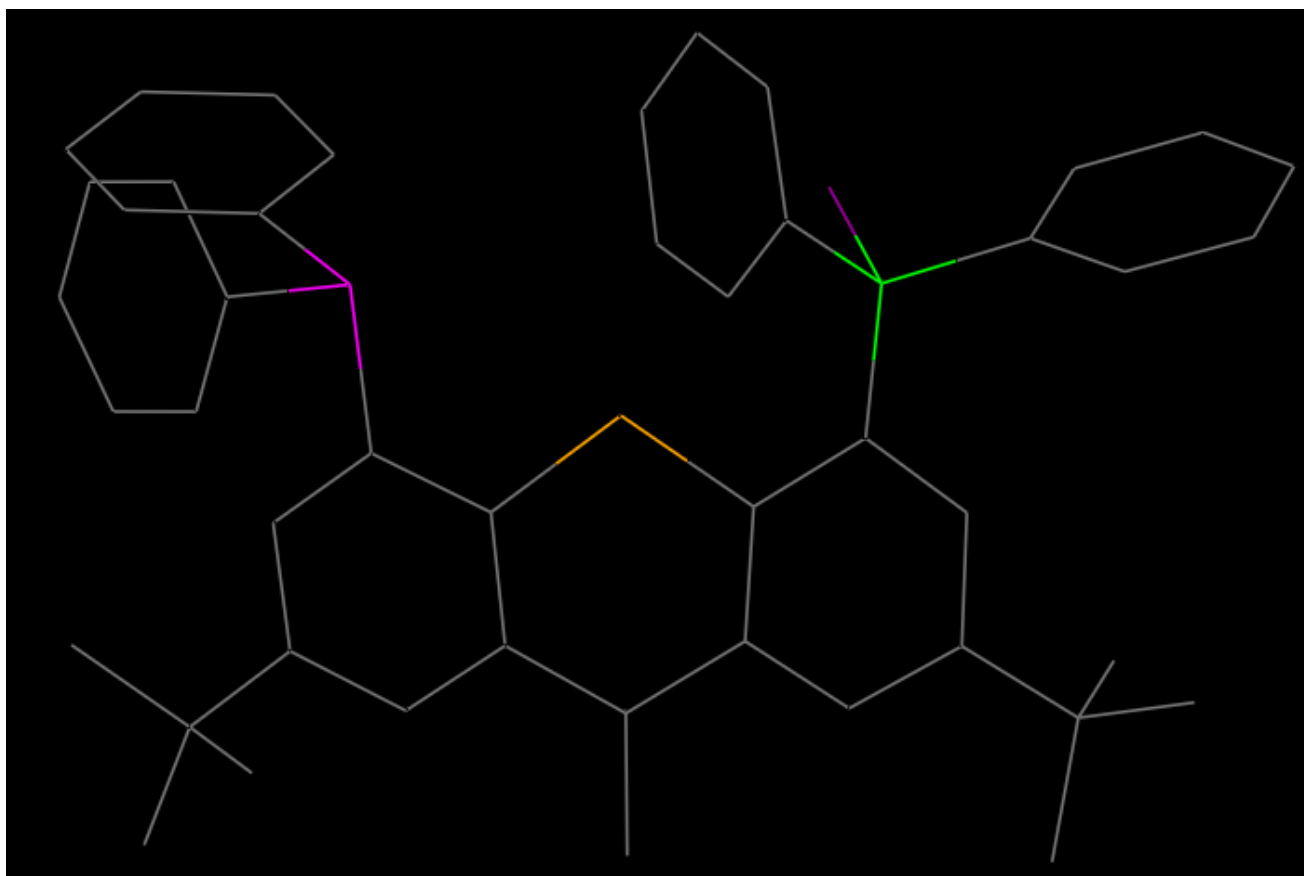
B–C distances = 1.563, 1.565, 1.566 Å

C–B–C angles = 117.87, 119.66, 121.08°

Distance from boron to the CCC plane = 0.107 Å

(CCC plane = plane of the three carbon atoms attached to boron)

Calculated structure of the [TXPB-I]⁻ anion.



B–I distance = 2.456 Å

B–C distances = 1.616, 1.620, 1.622 Å

C–B–C angles = 112.89, 113.09, 113.34°

Distance from boron to the CCC plane = 0.434 Å

(CCC plane = plane of the three carbon atoms attached to boron)

(2) Numbered ORTEP and Crystallographic Data for $1\mathbf{B} \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$ (de31a)

- Lattice solvent and hydrogen atoms are omitted for clarity.
- 50% probability ellipsoids.

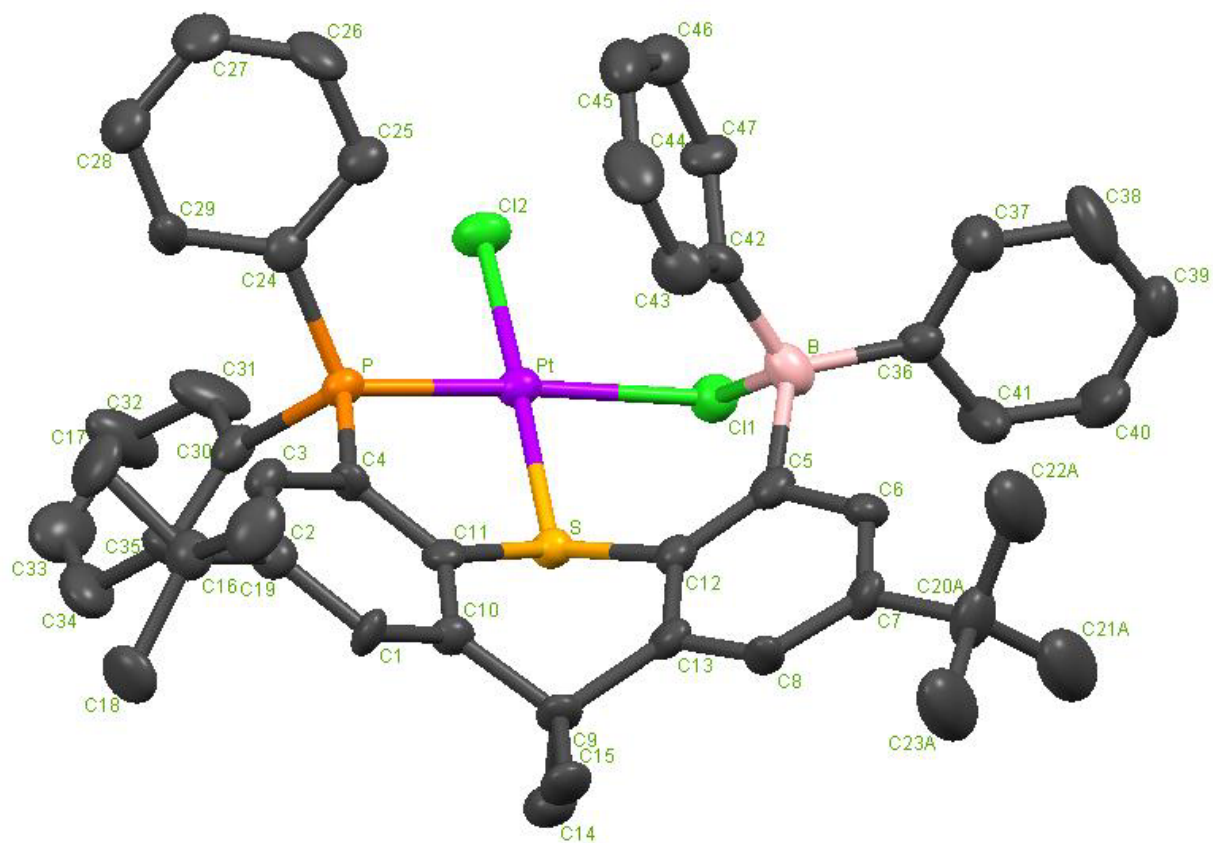


Table 1. Crystal data and structure refinement for de31a.

Identification code	de31a
Empirical formula	C ₄₉ H ₅₂ B Cl ₆ P Pt S
Formula weight	1122.54
Temperature	173(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Orthorhombic
Space group	<i>Pna</i> 2(1)
Unit cell dimensions	a = 21.373(2) Å α = 90°. b = 8.9593(9) Å β = 90°. c = 25.330(3) Å γ = 90°.
Volume	4850.4(8) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.537 Mg/m ³
Absorption coefficient	3.333 mm ⁻¹
F(000)	2248
Crystal size	0.24 x 0.18 x 0.01 mm ³
Theta range for data collection	2.07 to 26.48°.
Index ranges	-26 ≤ h ≤ 26, -10 ≤ k ≤ 11, -31 ≤ l ≤ 17
Reflections collected	27401
Independent reflections	6568 [R(int) = 0.0837]
Completeness to theta = 26.48°	99.3 %
Absorption correction	Numerical
Max. and min. transmission	0.9674 and 0.5018
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	6568 / 95 / 533
Goodness-of-fit on F ²	1.011
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0451, wR2 = 0.0927
R indices (all data)	R1 = 0.0716, wR2 = 0.1048
Absolute structure parameter	-0.009(8)
Largest diff. peak and hole	0.995 and -0.719 e.Å ⁻³

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for de31a. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Pt	4707(1)	6408(1)	7505(1)	25(1)
S	5517(1)	7804(3)	7776(1)	26(1)
P	5346(1)	5357(3)	6927(1)	25(1)
B	4600(6)	6692(18)	8829(5)	35(4)
Cl(2)	3830(1)	5208(3)	7171(1)	37(1)
Cl(1)	4099(1)	7614(3)	8173(1)	32(1)
C(1)	7296(4)	6559(11)	7553(5)	30(3)
C(2)	7262(4)	5356(12)	7195(4)	31(2)
C(3)	6661(4)	4964(12)	7003(3)	29(2)
C(4)	6131(4)	5769(12)	7172(3)	25(2)
C(5)	5273(5)	7567(12)	8856(4)	29(2)
C(6)	5476(5)	7797(13)	9380(4)	30(3)
C(7)	6067(4)	8290(12)	9507(4)	31(2)
C(8)	6483(4)	8497(12)	9099(4)	31(2)
C(9)	6809(4)	8628(12)	8134(4)	31(2)
C(10)	6781(4)	7366(12)	7722(3)	26(2)
C(11)	6203(4)	6897(10)	7546(5)	26(2)
C(12)	5708(5)	7857(12)	8469(3)	28(2)
C(13)	6328(4)	8307(11)	8582(4)	28(2)
C(14)	6652(5)	10142(14)	7859(4)	42(3)
C(15)	7462(5)	8852(14)	8351(4)	39(3)
C(16)	7850(5)	4485(13)	7048(4)	33(2)
C(17)	7717(5)	3194(14)	6682(4)	45(3)
C(18)	8326(5)	5538(14)	6774(4)	43(3)
C(19)	8140(5)	3856(13)	7556(6)	47(3)
C(20A)	6248(5)	8562(12)	10089(4)	47(3)
C(21A)	5861(9)	9870(20)	10295(7)	79(5)
C(22A)	6111(9)	7180(20)	10425(6)	79(5)
C(23A)	6945(7)	8930(20)	10140(7)	79(5)
C(20B)	6248(5)	8562(12)	10089(4)	47(3)
C(21B)	5667(8)	8610(30)	10445(8)	79(5)
C(22B)	6668(11)	7290(20)	10267(8)	79(5)
C(23B)	6596(12)	10050(20)	10140(8)	79(5)

C(30)	5310(5)	6124(12)	6262(4)	33(2)
C(31)	4758(6)	5989(19)	5980(6)	62(4)
C(32)	4736(6)	6509(18)	5460(5)	69(5)
C(33)	5226(7)	7172(17)	5232(5)	62(4)
C(34)	5783(8)	7372(16)	5516(4)	56(4)
C(35)	5809(5)	6811(13)	6023(4)	41(3)
C(24)	5273(4)	3359(11)	6842(4)	27(2)
C(25)	5003(5)	2506(13)	7251(4)	33(2)
C(26)	4939(5)	1004(14)	7170(5)	43(3)
C(27)	5143(5)	310(13)	6720(4)	41(3)
C(28)	5419(5)	1137(13)	6326(4)	40(3)
C(29)	5481(5)	2688(16)	6385(4)	35(3)
C(42)	4687(4)	4938(13)	8704(4)	31(2)
C(47)	4175(6)	3987(12)	8591(4)	39(3)
C(46)	4242(6)	2447(14)	8557(4)	44(3)
C(45)	4818(7)	1783(16)	8626(5)	54(4)
C(44)	5346(7)	2670(18)	8740(6)	54(4)
C(43)	5269(5)	4236(15)	8772(4)	41(3)
C(36)	4131(4)	7082(12)	9307(4)	30(2)
C(41)	3954(6)	8526(13)	9412(5)	50(3)
C(40)	3611(6)	8854(16)	9868(6)	61(4)
C(39)	3397(5)	7816(17)	10197(4)	46(3)
C(38)	3558(6)	6338(18)	10093(4)	62(4)
C(37)	3919(5)	5991(15)	9664(4)	48(3)
C(48A)	2557(14)	6010(30)	6290(12)	65(6)
Cl(3A)	1858(7)	5241(19)	6407(7)	80(1)
Cl(4A)	2603(6)	6973(14)	5677(4)	80(1)
C(48B)	2761(10)	5560(40)	6172(10)	65(6)
Cl(3B)	1980(9)	5480(20)	6401(9)	80(1)
Cl(4B)	2801(8)	6602(18)	5581(5)	80(1)
C(49A)	2918(11)	6490(40)	4277(13)	135(12)
Cl(5A)	2236(2)	7615(6)	4301(2)	114(2)
Cl(6A)	3009(3)	5618(9)	3693(3)	151(2)
C(49B)	2430(20)	5746(13)	4150(20)	135(12)
Cl(5B)	2236(2)	7615(6)	4301(2)	114(2)
Cl(6B)	3009(3)	5618(9)	3693(3)	151(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for de31a.

Pt-P	2.213(2)	C(14)-H(14B)	0.9800
Pt-S	2.243(2)	C(14)-H(14C)	0.9800
Pt-Cl(2)	2.321(2)	C(15)-H(15A)	0.9800
Pt-Cl(1)	2.391(2)	C(15)-H(15B)	0.9800
S-C(11)	1.775(10)	C(15)-H(15C)	0.9800
S-C(12)	1.805(9)	C(16)-C(17)	1.509(15)
P-C(24)	1.809(11)	C(16)-C(19)	1.537(16)
P-C(30)	1.820(10)	C(16)-C(18)	1.552(15)
P-C(4)	1.827(9)	C(17)-H(17A)	0.9800
B-C(36)	1.611(17)	C(17)-H(17B)	0.9800
B-C(42)	1.613(19)	C(17)-H(17C)	0.9800
B-C(5)	1.638(16)	C(18)-H(18A)	0.9800
B-Cl(1)	2.142(13)	C(18)-H(18B)	0.9800
C(1)-C(10)	1.384(13)	C(18)-H(18C)	0.9800
C(1)-C(2)	1.411(14)	C(19)-H(19A)	0.9800
C(1)-H(1A)	0.9500	C(19)-H(19B)	0.9800
C(2)-C(3)	1.419(13)	C(19)-H(19C)	0.9800
C(2)-C(16)	1.524(14)	C(20A)-C(21A)	1.524(12)
C(3)-C(4)	1.409(13)	C(20A)-C(22A)	1.531(12)
C(3)-H(3A)	0.9500	C(20A)-C(23A)	1.533(12)
C(4)-C(11)	1.395(14)	C(21A)-H(21A)	0.9800
C(5)-C(12)	1.376(13)	C(21A)-H(21B)	0.9800
C(5)-C(6)	1.413(13)	C(21A)-H(21C)	0.9800
C(6)-C(7)	1.377(14)	C(22A)-H(22A)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9500	C(22A)-H(22B)	0.9800
C(7)-C(8)	1.376(13)	C(22A)-H(22C)	0.9800
C(7)-C(20A)	1.544(13)	C(23A)-H(23A)	0.9800
C(8)-C(13)	1.361(13)	C(23A)-H(23B)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9500	C(23A)-H(23C)	0.9800
C(9)-C(15)	1.512(13)	C(21B)-H(21D)	0.9800
C(9)-C(10)	1.541(14)	C(21B)-H(21E)	0.9800
C(9)-C(13)	1.558(13)	C(21B)-H(21F)	0.9800
C(9)-C(14)	1.563(16)	C(22B)-H(22D)	0.9800
C(10)-C(11)	1.378(12)	C(22B)-H(22E)	0.9800
C(12)-C(13)	1.414(13)	C(22B)-H(22F)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800	C(23B)-H(23D)	0.9800

C(23B)-H(23E)	0.9800	C(41)-H(41A)	0.9500
C(23B)-H(23F)	0.9800	C(40)-C(39)	1.329(18)
C(30)-C(35)	1.372(15)	C(40)-H(40A)	0.9500
C(30)-C(31)	1.382(15)	C(39)-C(38)	1.393(18)
C(31)-C(32)	1.399(18)	C(39)-H(39A)	0.9500
C(31)-H(31A)	0.9500	C(38)-C(37)	1.368(16)
C(32)-C(33)	1.335(18)	C(38)-H(38A)	0.9500
C(32)-H(32A)	0.9500	C(37)-H(37A)	0.9500
C(33)-C(34)	1.403(19)	C(48A)-Cl(3A)	1.67(3)
C(33)-H(33A)	0.9500	C(48A)-Cl(4A)	1.78(3)
C(34)-C(35)	1.380(15)	C(48A)-H(48A)	0.9900
C(34)-H(34A)	0.9500	C(48A)-H(48B)	0.9900
C(35)-H(35A)	0.9500	C(48B)-Cl(4B)	1.767(5)
C(24)-C(29)	1.377(15)	C(48B)-Cl(3B)	1.770(5)
C(24)-C(25)	1.411(14)	C(48B)-H(48C)	0.9900
C(25)-C(26)	1.368(17)	C(48B)-H(48D)	0.9900
C(25)-H(25A)	0.9500	C(49A)-Cl(6A)	1.69(3)
C(26)-C(27)	1.370(16)	C(49A)-Cl(5A)	1.772(4)
C(26)-H(26A)	0.9500	C(49A)-H(49A)	0.9900
C(27)-C(28)	1.376(16)	C(49A)-H(49B)	0.9900
C(27)-H(27A)	0.9500	C(49B)-H(49C)	0.9900
C(28)-C(29)	1.404(17)	C(49B)-H(49D)	0.9900
C(28)-H(28A)	0.9500		
C(29)-H(29A)	0.9500	P-Pt-S	87.90(9)
C(42)-C(43)	1.405(14)	P-Pt-Cl(2)	93.45(9)
C(42)-C(47)	1.415(15)	S-Pt-Cl(2)	173.31(10)
C(47)-C(46)	1.390(16)	P-Pt-Cl(1)	174.75(9)
C(47)-H(47A)	0.9500	S-Pt-Cl(1)	87.16(9)
C(46)-C(45)	1.379(17)	Cl(2)-Pt-Cl(1)	91.66(9)
C(46)-H(46A)	0.9500	C(11)-S-C(12)	98.2(5)
C(45)-C(44)	1.41(2)	C(11)-S-Pt	106.4(3)
C(45)-H(45A)	0.9500	C(12)-S-Pt	119.2(3)
C(44)-C(43)	1.42(2)	C(24)-P-C(30)	105.1(5)
C(44)-H(44A)	0.9500	C(24)-P-C(4)	108.6(5)
C(43)-H(43A)	0.9500	C(30)-P-C(4)	106.1(5)
C(36)-C(41)	1.374(15)	C(24)-P-Pt	116.6(3)
C(36)-C(37)	1.407(16)	C(30)-P-Pt	115.1(4)
C(41)-C(40)	1.397(16)	C(4)-P-Pt	104.8(3)

C(36)-B-C(42)	115.4(10)	C(11)-C(10)-C(9)	118.5(8)
C(36)-B-C(5)	114.2(10)	C(1)-C(10)-C(9)	124.1(8)
C(42)-B-C(5)	111.9(10)	C(10)-C(11)-C(4)	122.6(9)
C(36)-B-Cl(1)	100.8(8)	C(10)-C(11)-S	119.8(8)
C(42)-B-Cl(1)	106.4(8)	C(4)-C(11)-S	117.5(7)
C(5)-B-Cl(1)	106.6(8)	C(5)-C(12)-C(13)	123.0(8)
B-Cl(1)-Pt	95.9(4)	C(5)-C(12)-S	122.3(7)
C(10)-C(1)-C(2)	123.8(9)	C(13)-C(12)-S	114.6(7)
C(10)-C(1)-H(1A)	118.1	C(8)-C(13)-C(12)	117.3(9)
C(2)-C(1)-H(1A)	118.1	C(8)-C(13)-C(9)	121.1(8)
C(1)-C(2)-C(3)	117.1(9)	C(12)-C(13)-C(9)	121.6(8)
C(1)-C(2)-C(16)	120.4(9)	C(9)-C(14)-H(14A)	109.5
C(3)-C(2)-C(16)	122.4(9)	C(9)-C(14)-H(14B)	109.5
C(4)-C(3)-C(2)	119.8(9)	H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5
C(4)-C(3)-H(3A)	120.1	C(9)-C(14)-H(14C)	109.5
C(2)-C(3)-H(3A)	120.1	H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
C(11)-C(4)-C(3)	119.2(8)	H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
C(11)-C(4)-P	118.6(7)	C(9)-C(15)-H(15A)	109.5
C(3)-C(4)-P	122.1(7)	C(9)-C(15)-H(15B)	109.5
C(12)-C(5)-C(6)	115.6(9)	H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
C(12)-C(5)-B	130.9(9)	C(9)-C(15)-H(15C)	109.5
C(6)-C(5)-B	112.3(9)	H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
C(7)-C(6)-C(5)	123.3(9)	H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
C(7)-C(6)-H(6A)	118.4	C(17)-C(16)-C(2)	112.8(9)
C(5)-C(6)-H(6A)	118.4	C(17)-C(16)-C(19)	108.1(10)
C(8)-C(7)-C(6)	117.5(9)	C(2)-C(16)-C(19)	108.4(8)
C(8)-C(7)-C(20A)	122.4(8)	C(17)-C(16)-C(18)	108.3(9)
C(6)-C(7)-C(20A)	120.2(9)	C(2)-C(16)-C(18)	109.7(9)
C(13)-C(8)-C(7)	123.2(9)	C(19)-C(16)-C(18)	109.4(9)
C(13)-C(8)-H(8A)	118.4	C(16)-C(17)-H(17A)	109.5
C(7)-C(8)-H(8A)	118.4	C(16)-C(17)-H(17B)	109.5
C(15)-C(9)-C(10)	112.3(8)	H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(15)-C(9)-C(13)	111.7(8)	C(16)-C(17)-H(17C)	109.5
C(10)-C(9)-C(13)	109.4(8)	H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
C(15)-C(9)-C(14)	104.2(8)	H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
C(10)-C(9)-C(14)	109.0(8)	C(16)-C(18)-H(18A)	109.5
C(13)-C(9)-C(14)	110.1(8)	C(16)-C(18)-H(18B)	109.5
C(11)-C(10)-C(1)	117.1(9)	H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5

C(16)-C(18)-H(18C)	109.5	H(22E)-C(22B)-H(22F)	109.5
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5	H(23D)-C(23B)-H(23E)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5	H(23D)-C(23B)-H(23F)	109.5
C(16)-C(19)-H(19A)	109.5	H(23E)-C(23B)-H(23F)	109.5
C(16)-C(19)-H(19B)	109.5	C(35)-C(30)-C(31)	118.3(10)
H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5	C(35)-C(30)-P	122.9(8)
C(16)-C(19)-H(19C)	109.5	C(31)-C(30)-P	118.7(9)
H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5	C(30)-C(31)-C(32)	119.1(12)
H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5	C(30)-C(31)-H(31A)	120.4
C(21A)-C(20A)-C(22A)	109.2(6)	C(32)-C(31)-H(31A)	120.4
C(21A)-C(20A)-C(23A)	109.3(6)	C(33)-C(32)-C(31)	122.0(12)
C(22A)-C(20A)-C(23A)	108.4(6)	C(33)-C(32)-H(32A)	119.0
C(21A)-C(20A)-C(7)	108.2(10)	C(31)-C(32)-H(32A)	119.0
C(22A)-C(20A)-C(7)	110.8(10)	C(32)-C(33)-C(34)	120.0(12)
C(23A)-C(20A)-C(7)	110.9(10)	C(32)-C(33)-H(33A)	120.0
C(20A)-C(21A)-H(21A)	109.5	C(34)-C(33)-H(33A)	120.0
C(20A)-C(21A)-H(21B)	109.5	C(35)-C(34)-C(33)	117.8(13)
H(21A)-C(21A)-H(21B)	109.5	C(35)-C(34)-H(34A)	121.1
C(20A)-C(21A)-H(21C)	109.5	C(33)-C(34)-H(34A)	121.1
H(21A)-C(21A)-H(21C)	109.5	C(30)-C(35)-C(34)	122.8(11)
H(21B)-C(21A)-H(21C)	109.5	C(30)-C(35)-H(35A)	118.6
C(20A)-C(22A)-H(22A)	109.5	C(34)-C(35)-H(35A)	118.6
C(20A)-C(22A)-H(22B)	109.5	C(29)-C(24)-C(25)	120.8(10)
H(22A)-C(22A)-H(22B)	109.5	C(29)-C(24)-P	120.3(9)
C(20A)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(25)-C(24)-P	118.9(8)
H(22A)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(26)-C(25)-C(24)	117.6(10)
H(22B)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(26)-C(25)-H(25A)	121.2
C(20A)-C(23A)-H(23A)	109.5	C(24)-C(25)-H(25A)	121.2
C(20A)-C(23A)-H(23B)	109.5	C(25)-C(26)-C(27)	122.6(11)
H(23A)-C(23A)-H(23B)	109.5	C(25)-C(26)-H(26A)	118.7
C(20A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(27)-C(26)-H(26A)	118.7
H(23A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(26)-C(27)-C(28)	119.8(11)
H(23B)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(26)-C(27)-H(27A)	120.1
H(21D)-C(21B)-H(21E)	109.5	C(28)-C(27)-H(27A)	120.1
H(21D)-C(21B)-H(21F)	109.5	C(27)-C(28)-C(29)	119.7(11)
H(21E)-C(21B)-H(21F)	109.5	C(27)-C(28)-H(28A)	120.1
H(22D)-C(22B)-H(22E)	109.5	C(29)-C(28)-H(28A)	120.1
H(22D)-C(22B)-H(22F)	109.5	C(24)-C(29)-C(28)	119.5(11)

C(24)-C(29)-H(29A)	120.3	C(40)-C(39)-C(38)	117.5(11)
C(28)-C(29)-H(29A)	120.3	C(40)-C(39)-H(39A)	121.3
C(43)-C(42)-C(47)	116.1(11)	C(38)-C(39)-H(39A)	121.3
C(43)-C(42)-B	120.9(10)	C(37)-C(38)-C(39)	120.3(12)
C(47)-C(42)-B	122.5(10)	C(37)-C(38)-H(38A)	119.8
C(46)-C(47)-C(42)	122.1(11)	C(39)-C(38)-H(38A)	119.8
C(46)-C(47)-H(47A)	119.0	C(38)-C(37)-C(36)	122.3(13)
C(42)-C(47)-H(47A)	119.0	C(38)-C(37)-H(37A)	118.9
C(45)-C(46)-C(47)	120.8(12)	C(36)-C(37)-H(37A)	118.9
C(45)-C(46)-H(46A)	119.6	Cl(3A)-C(48A)-Cl(4A)	113.8(16)
C(47)-C(46)-H(46A)	119.6	Cl(3A)-C(48A)-H(48A)	108.8
C(46)-C(45)-C(44)	119.9(14)	Cl(4A)-C(48A)-H(48A)	108.8
C(46)-C(45)-H(45A)	120.1	Cl(3A)-C(48A)-H(48B)	108.8
C(44)-C(45)-H(45A)	120.1	Cl(4A)-C(48A)-H(48B)	108.8
C(45)-C(44)-C(43)	118.5(13)	H(48A)-C(48A)-H(48B)	107.7
C(45)-C(44)-H(44A)	120.7	Cl(4B)-C(48B)-Cl(3B)	110.1(11)
C(43)-C(44)-H(44A)	120.7	Cl(4B)-C(48B)-H(48C)	109.6
C(42)-C(43)-C(44)	122.7(12)	Cl(3B)-C(48B)-H(48C)	109.6
C(42)-C(43)-H(43A)	118.7	Cl(4B)-C(48B)-H(48D)	109.6
C(44)-C(43)-H(43A)	118.7	Cl(3B)-C(48B)-H(48D)	109.6
C(41)-C(36)-C(37)	116.1(10)	H(48C)-C(48B)-H(48D)	108.2
C(41)-C(36)-B	121.5(10)	Cl(6A)-C(49A)-Cl(5A)	112.9(14)
C(37)-C(36)-B	122.2(11)	Cl(6A)-C(49A)-H(49A)	109.0
C(36)-C(41)-C(40)	120.2(11)	Cl(5A)-C(49A)-H(49A)	109.0
C(36)-C(41)-H(41A)	119.9	Cl(6A)-C(49A)-H(49B)	109.0
C(40)-C(41)-H(41A)	119.9	Cl(5A)-C(49A)-H(49B)	109.0
C(39)-C(40)-C(41)	123.4(13)	H(49A)-C(49A)-H(49B)	107.8
C(39)-C(40)-H(40A)	118.3	H(49C)-C(49B)-H(49D)	107.8
C(41)-C(40)-H(40A)	118.3		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for de31a. 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
Pt	23(1)	23(1)	29(1)	0(1)	-4(1)	0(1)
S	24(1)	25(2)	28(1)	-2(1)	0(1)	-2(1)
P	26(1)	24(2)	26(1)	-3(1)	-4(1)	-4(1)
B	28(7)	47(10)	32(6)	8(6)	0(5)	0(6)
Cl(2)	28(1)	34(2)	48(1)	-2(1)	-10(1)	-5(1)
Cl(1)	26(1)	33(2)	38(1)	-3(1)	-1(1)	3(1)
C(1)	31(4)	32(6)	27(6)	-17(5)	1(5)	-2(4)
C(2)	31(6)	28(7)	34(5)	-1(5)	2(4)	2(5)
C(3)	38(6)	24(6)	24(5)	-3(4)	-4(4)	0(5)
C(4)	15(4)	33(6)	27(5)	-3(4)	4(4)	-6(4)
C(5)	36(6)	20(6)	33(5)	-5(4)	-3(4)	2(5)
C(6)	36(6)	27(7)	28(5)	0(5)	3(4)	-12(5)
C(7)	25(5)	33(7)	35(5)	-16(5)	4(4)	3(5)
C(8)	21(5)	38(7)	33(5)	-12(5)	6(4)	-15(5)
C(9)	23(5)	35(7)	35(5)	-9(5)	0(4)	-13(5)
C(10)	24(5)	28(6)	26(4)	-1(4)	-4(4)	-5(4)
C(11)	31(4)	16(5)	30(6)	2(5)	2(5)	-4(3)
C(12)	34(6)	22(6)	26(5)	-3(4)	0(4)	-2(5)
C(13)	24(5)	22(6)	37(5)	-12(4)	1(4)	1(4)
C(14)	48(7)	35(8)	44(6)	-7(5)	3(5)	-12(6)
C(15)	35(6)	43(9)	41(6)	-14(5)	-3(5)	-18(5)
C(16)	29(5)	35(7)	37(5)	-2(5)	0(4)	5(5)
C(17)	43(7)	39(8)	52(7)	-19(5)	-2(5)	19(5)
C(18)	20(5)	57(9)	53(6)	1(6)	10(5)	2(5)
C(19)	44(6)	46(7)	52(8)	-6(7)	-16(7)	19(5)
C(20A)	45(7)	64(10)	34(5)	-20(6)	-5(5)	-4(6)
C(21A)	81(9)	119(14)	37(5)	-8(7)	-2(6)	-39(8)
C(22A)	81(9)	119(14)	37(5)	-8(7)	-2(6)	-39(8)
C(23A)	81(9)	119(14)	37(5)	-8(7)	-2(6)	-39(8)
C(20B)	45(7)	64(10)	34(5)	-20(6)	-5(5)	-4(6)
C(21B)	81(9)	119(14)	37(5)	-8(7)	-2(6)	-39(8)
C(22B)	81(9)	119(14)	37(5)	-8(7)	-2(6)	-39(8)
C(23B)	81(9)	119(14)	37(5)	-8(7)	-2(6)	-39(8)

C(30)	47(6)	25(7)	27(5)	-5(4)	-8(5)	4(5)
C(31)	62(10)	66(11)	57(9)	41(8)	-18(7)	-26(8)
C(32)	67(9)	101(14)	38(6)	24(7)	-16(6)	-44(9)
C(33)	93(11)	53(10)	41(7)	13(6)	-16(7)	-9(8)
C(34)	85(11)	44(10)	39(7)	12(6)	14(7)	-6(8)
C(35)	43(7)	40(8)	38(5)	11(5)	-2(5)	-15(6)
C(24)	24(5)	30(7)	26(4)	0(4)	-7(4)	3(5)
C(25)	34(5)	29(7)	37(5)	-1(5)	-5(4)	4(5)
C(26)	45(7)	35(8)	49(6)	22(5)	9(5)	3(5)
C(27)	52(7)	23(7)	49(6)	4(5)	-1(5)	6(5)
C(28)	44(7)	33(8)	42(6)	-5(5)	1(5)	8(5)
C(29)	37(6)	42(8)	25(5)	-8(5)	6(5)	-18(6)
C(42)	30(5)	35(7)	28(5)	4(4)	1(4)	-9(5)
C(47)	53(7)	22(7)	42(6)	5(5)	-5(5)	-3(5)
C(46)	60(8)	38(8)	35(5)	6(5)	-3(5)	-3(6)
C(45)	84(11)	38(8)	40(6)	0(5)	14(6)	-1(7)
C(44)	67(10)	42(10)	53(8)	20(7)	9(7)	21(8)
C(43)	26(5)	44(8)	51(6)	4(6)	-1(5)	5(5)
C(36)	26(5)	26(6)	39(5)	-4(5)	2(4)	-2(5)
C(41)	58(8)	30(7)	63(7)	-2(6)	30(6)	-3(6)
C(40)	58(8)	43(10)	82(9)	-26(7)	26(7)	-7(7)
C(39)	34(6)	63(10)	41(6)	-18(6)	8(5)	-3(6)
C(38)	48(7)	104(14)	34(6)	11(7)	11(5)	5(8)
C(37)	53(7)	49(9)	42(6)	-4(6)	4(5)	-3(6)
C(48A)	64(8)	59(9)	71(8)	7(6)	-9(6)	2(6)
Cl(3A)	82(4)	75(3)	82(2)	9(2)	4(2)	15(2)
Cl(4A)	82(4)	75(3)	82(2)	9(2)	4(2)	15(2)
C(48B)	64(8)	59(9)	71(8)	7(6)	-9(6)	2(6)
Cl(3B)	82(4)	75(3)	82(2)	9(2)	4(2)	15(2)
Cl(4B)	82(4)	75(3)	82(2)	9(2)	4(2)	15(2)
Cl(5A)	133(4)	104(4)	106(3)	17(3)	-8(3)	21(3)
Cl(6A)	140(4)	160(5)	154(4)	-16(4)	9(4)	36(4)
Cl(5B)	133(4)	104(4)	106(3)	17(3)	-8(3)	21(3)
Cl(6B)	140(4)	160(5)	154(4)	-16(4)	9(4)	36(4)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for de31a.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	7696	6831	7687	36
H(3A)	6615	4161	6761	34
H(6A)	5191	7602	9659	36
H(8A)	6899	8787	9182	37
H(14A)	6957	10336	7578	63
H(14B)	6668	10950	8119	63
H(14C)	6231	10090	7706	63
H(15A)	7597	7945	8535	59
H(15B)	7461	9693	8599	59
H(15C)	7751	9065	8060	59
H(17A)	7420	2511	6850	67
H(17B)	8107	2662	6606	67
H(17C)	7538	3572	6352	67
H(18A)	8140	5945	6451	65
H(18B)	8705	4977	6685	65
H(18C)	8434	6358	7014	65
H(19A)	7843	3176	7726	71
H(19B)	8239	4678	7797	71
H(19C)	8525	3311	7469	71
H(21A)	5947	10757	10081	119
H(21B)	5973	10067	10664	119
H(21C)	5416	9621	10273	119
H(22A)	6358	6336	10294	119
H(22B)	5664	6935	10402	119
H(22C)	6221	7381	10793	119
H(23A)	7194	8096	10008	119
H(23B)	7047	9115	10512	119
H(23C)	7039	9830	9933	119
H(21D)	5396	9439	10335	119
H(21E)	5797	8765	10813	119
H(21F)	5438	7670	10416	119
H(22D)	6439	6341	10239	119
H(22E)	6794	7446	10635	119

H(22F)	7041	7249	10043	119
H(23D)	6324	10861	10022	119
H(23E)	6974	10020	9921	119
H(23F)	6714	10206	10510	119
H(31A)	4400	5550	6138	74
H(32A)	4361	6387	5263	82
H(33A)	5197	7508	4877	75
H(34A)	6130	7877	5365	67
H(35A)	6189	6904	6215	49
H(25A)	4870	2959	7571	40
H(26A)	4745	419	7437	52
H(27A)	5094	-737	6680	50
H(28A)	5567	660	6015	48
H(29A)	5665	3270	6112	42
H(47A)	3774	4416	8536	47
H(46A)	3886	1845	8486	53
H(45A)	4860	731	8597	65
H(44A)	5745	2226	8793	65
H(43A)	5626	4837	8842	49
H(41A)	4064	9304	9175	60
H(40A)	3526	9871	9946	74
H(39A)	3144	8073	10491	55
H(38A)	3416	5568	10321	75
H(37A)	4030	4978	9605	57
H(48A)	2879	5214	6295	78
H(48B)	2655	6716	6579	78
H(48C)	3030	6029	6443	78
H(48D)	2918	4535	6108	78
H(49A)	3288	7129	4345	161
H(49B)	2896	5737	4562	161
H(49C)	2568	5229	4472	161
H(49D)	2058	5228	4010	161

Table 6. Torsion angles [°] for de31a.

P-Pt-S-C(11)	-18.1(4)	C(5)-C(6)-C(7)-C(20A)	178.1(10)
Cl(1)-Pt-S-C(11)	160.2(4)	C(6)-C(7)-C(8)-C(13)	3.2(17)
P-Pt-S-C(12)	-127.6(4)	C(20A)-C(7)-C(8)-C(13)	-178.0(10)
Cl(1)-Pt-S-C(12)	50.6(4)	C(2)-C(1)-C(10)-C(11)	3.6(17)
S-Pt-P-C(24)	138.6(3)	C(2)-C(1)-C(10)-C(9)	176.7(10)
Cl(2)-Pt-P-C(24)	-48.0(3)	C(15)-C(9)-C(10)-C(11)	170.9(10)
S-Pt-P-C(30)	-97.7(4)	C(13)-C(9)-C(10)-C(11)	46.3(13)
Cl(2)-Pt-P-C(30)	75.8(4)	C(14)-C(9)-C(10)-C(11)	-74.1(12)
S-Pt-P-C(4)	18.5(3)	C(15)-C(9)-C(10)-C(1)	-2.1(15)
Cl(2)-Pt-P-C(4)	-168.1(4)	C(13)-C(9)-C(10)-C(1)	-126.7(11)
C(36)-B-Cl(1)-Pt	-166.3(7)	C(14)-C(9)-C(10)-C(1)	112.9(11)
C(42)-B-Cl(1)-Pt	-45.4(7)	C(1)-C(10)-C(11)-C(4)	-6.8(16)
C(5)-B-Cl(1)-Pt	74.2(8)	C(9)-C(10)-C(11)-C(4)	179.7(10)
S-Pt-Cl(1)-B	-66.1(4)	C(1)-C(10)-C(11)-S	176.3(9)
Cl(2)-Pt-Cl(1)-B	120.5(4)	C(9)-C(10)-C(11)-S	2.8(14)
C(10)-C(1)-C(2)-C(3)	-0.3(17)	C(3)-C(4)-C(11)-C(10)	6.7(17)
C(10)-C(1)-C(2)-C(16)	-177.4(11)	P-C(4)-C(11)-C(10)	-174.6(8)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	0.1(15)	C(3)-C(4)-C(11)-S	-176.3(8)
C(16)-C(2)-C(3)-C(4)	177.1(9)	P-C(4)-C(11)-S	2.3(13)
C(2)-C(3)-C(4)-C(11)	-3.1(15)	C(12)-S-C(11)-C(10)	-46.1(10)
C(2)-C(3)-C(4)-P	178.3(7)	Pt-S-C(11)-C(10)	-169.9(8)
C(24)-P-C(4)-C(11)	-141.9(9)	C(12)-S-C(11)-C(4)	136.9(10)
C(30)-P-C(4)-C(11)	105.6(9)	Pt-S-C(11)-C(4)	13.1(10)
Pt-P-C(4)-C(11)	-16.6(9)	C(6)-C(5)-C(12)-C(13)	2.1(15)
C(24)-P-C(4)-C(3)	36.7(9)	B-C(5)-C(12)-C(13)	-164.3(11)
C(30)-P-C(4)-C(3)	-75.7(9)	C(6)-C(5)-C(12)-S	-173.9(8)
Pt-P-C(4)-C(3)	162.0(7)	B-C(5)-C(12)-S	19.8(17)
C(36)-B-C(5)-C(12)	-159.7(11)	C(11)-S-C(12)-C(5)	-138.8(9)
C(42)-B-C(5)-C(12)	66.7(15)	Pt-S-C(12)-C(5)	-24.7(10)
Cl(1)-B-C(5)-C(12)	-49.2(15)	C(11)-S-C(12)-C(13)	44.9(8)
C(36)-B-C(5)-C(6)	33.6(14)	Pt-S-C(12)-C(13)	159.0(6)
C(42)-B-C(5)-C(6)	-100.0(11)	C(7)-C(8)-C(13)-C(12)	-0.8(16)
Cl(1)-B-C(5)-C(6)	144.1(8)	C(7)-C(8)-C(13)-C(9)	177.1(10)
C(12)-C(5)-C(6)-C(7)	0.5(16)	C(5)-C(12)-C(13)-C(8)	-2.0(16)
B-C(5)-C(6)-C(7)	169.4(11)	S-C(12)-C(13)-C(8)	174.3(8)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	-3.1(17)	C(5)-C(12)-C(13)-C(9)	-179.9(10)

S-C(12)-C(13)-C(9)	-3.7(13)	C(4)-P-C(24)-C(29)	-84.2(9)
C(15)-C(9)-C(13)-C(8)	11.1(14)	Pt-P-C(24)-C(29)	157.8(7)
C(10)-C(9)-C(13)-C(8)	136.1(10)	C(30)-P-C(24)-C(25)	-151.1(8)
C(14)-C(9)-C(13)-C(8)	-104.1(11)	C(4)-P-C(24)-C(25)	95.7(8)
C(15)-C(9)-C(13)-C(12)	-171.0(10)	Pt-P-C(24)-C(25)	-22.3(8)
C(10)-C(9)-C(13)-C(12)	-46.1(13)	C(29)-C(24)-C(25)-C(26)	-1.8(15)
C(14)-C(9)-C(13)-C(12)	73.7(11)	P-C(24)-C(25)-C(26)	178.3(8)
C(1)-C(2)-C(16)-C(17)	177.2(10)	C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	2.0(16)
C(3)-C(2)-C(16)-C(17)	0.2(14)	C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	-0.6(18)
C(1)-C(2)-C(16)-C(19)	57.5(13)	C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	-0.9(17)
C(3)-C(2)-C(16)-C(19)	-119.4(10)	C(25)-C(24)-C(29)-C(28)	0.3(16)
C(1)-C(2)-C(16)-C(18)	-61.9(13)	P-C(24)-C(29)-C(28)	-179.8(8)
C(3)-C(2)-C(16)-C(18)	121.1(10)	C(27)-C(28)-C(29)-C(24)	1.1(17)
C(8)-C(7)-C(20A)-C(21A)	114.8(12)	C(36)-B-C(42)-C(43)	-115.7(11)
C(6)-C(7)-C(20A)-C(21A)	-66.5(13)	C(5)-B-C(42)-C(43)	17.2(14)
C(8)-C(7)-C(20A)-C(22A)	-125.6(12)	Cl(1)-B-C(42)-C(43)	133.3(9)
C(6)-C(7)-C(20A)-C(22A)	53.2(13)	C(36)-B-C(42)-C(47)	55.8(13)
C(8)-C(7)-C(20A)-C(23A)	-5.2(14)	C(5)-B-C(42)-C(47)	-171.2(9)
C(6)-C(7)-C(20A)-C(23A)	173.6(11)	Cl(1)-B-C(42)-C(47)	-55.1(11)
C(24)-P-C(30)-C(35)	-113.0(10)	B-C(42)-C(47)-C(46)	-170.8(10)
C(4)-P-C(30)-C(35)	1.9(11)	C(47)-C(46)-C(45)-C(44)	1.0(17)
Pt-P-C(30)-C(35)	117.4(9)	C(46)-C(45)-C(44)-C(43)	-1.0(18)
C(24)-P-C(30)-C(31)	65.9(12)	C(47)-C(42)-C(43)-C(44)	-1.2(15)
C(4)-P-C(30)-C(31)	-179.2(11)	B-C(42)-C(43)-C(44)	170.9(10)
Pt-P-C(30)-C(31)	-63.7(12)	C(45)-C(44)-C(43)-C(42)	1.1(17)
C(35)-C(30)-C(31)-C(32)	2(2)	C(42)-B-C(36)-C(41)	-171.8(10)
P-C(30)-C(31)-C(32)	-176.8(13)	C(5)-B-C(36)-C(41)	56.3(14)
C(30)-C(31)-C(32)-C(33)	-2(3)	Cl(1)-B-C(36)-C(41)	-57.6(12)
C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	0(3)	C(42)-B-C(36)-C(37)	13.3(15)
C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	3(2)	C(5)-B-C(36)-C(37)	-118.6(12)
C(31)-C(30)-C(35)-C(34)	0(2)	Cl(1)-B-C(36)-C(37)	127.4(9)
P-C(30)-C(35)-C(34)	179.0(10)	B-C(36)-C(41)-C(40)	-171.9(11)
C(33)-C(34)-C(35)-C(30)	-2(2)	C(40)-C(39)-C(38)-C(37)	-0.5(19)
C(30)-P-C(24)-C(29)	29.0(10)	B-C(36)-C(37)-C(38)	175.1(11)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

(3) Numbered ORTEP and Crystallographic Data for $2\mathbf{B} \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$ (pdcl2_0m)

- Lattice solvent and hydrogen atoms are omitted for clarity.
- 50% probability ellipsoids.

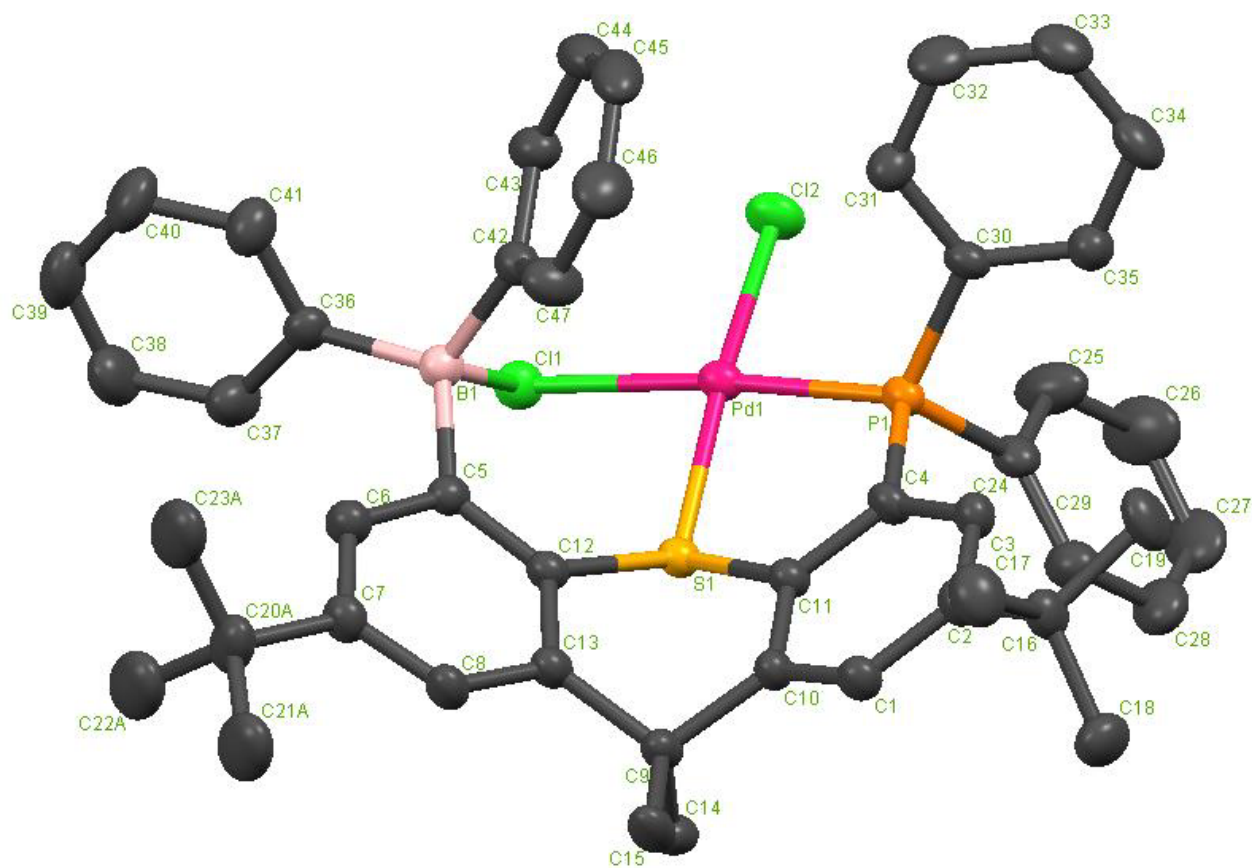


Table 1. Crystal data and structure refinement for pdcl2_0m.

Identification code	brad01	
Empirical formula	C49 H52 B Cl6 P Pd S	
Formula weight	1033.85	
Temperature	173(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	P n a 21	
Unit cell dimensions	a = 21.3801(14) Å	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 8.9678(6) Å	$\beta = 90^\circ$.
	c = 25.2512(17) Å	$\gamma = 90^\circ$.
Volume	4841.5(6) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.418 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.824 mm ⁻¹	
F(000)	2120	
Crystal size	0.316 x 0.284 x 0.118 mm ³	
Theta range for data collection	1.61 to 30.67°.	
Index ranges	-30<=h<=29, -12<=k<=5, -36<=l<=36	
Reflections collected	72714	
Independent reflections	14333 [R(int) = 0.0497]	
Completeness to theta = 30.67°	99.5 %	
Absorption correction	Numerical	
Max. and min. transmission	0.9076 and 0.7785	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	14333 / 31 / 538	
Goodness-of-fit on F ²	1.031	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0421, wR2 = 0.1048	
R indices (all data)	R1 = 0.0514, wR2 = 0.1118	
Absolute structure parameter	-0.02(2)	
Largest diff. peak and hole	1.031 and -0.672 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for pdcl2_0m . $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(20A)	6245(2)	3618(4)	-1419(2)	43(1)
C(21A)	6926(3)	4070(12)	-1493(3)	63(1)
C(22A)	5853(3)	4978(8)	-1604(3)	63(1)
C(23A)	6053(4)	2372(8)	-1787(3)	63(1)
C(20B)	6245(2)	3618(4)	-1419(2)	43(1)
C(21B)	6665(6)	4959(12)	-1499(5)	63(1)
C(22B)	5718(5)	3568(14)	-1820(4)	63(1)
C(23B)	6620(5)	2187(9)	-1535(5)	63(1)
Pd(1)	4697(1)	1376(1)	1151(1)	24(1)
Cl(2)	3840(1)	181(1)	1514(1)	36(1)
S(1)	5513(1)	2789(1)	887(1)	24(1)
Cl(1)	4102(1)	2662(1)	489(1)	30(1)
P(1)	5346(1)	327(1)	1731(1)	24(1)
C(1)	7298(1)	1554(3)	1110(2)	27(1)
C(25)	4771(2)	874(6)	2696(2)	54(1)
C(17)	8146(2)	-1156(4)	1105(2)	45(1)
C(15)	7473(2)	3827(4)	321(2)	37(1)
C(2)	7255(2)	347(3)	1462(1)	29(1)
C(6)	5463(2)	2859(4)	-717(1)	31(1)
C(29)	5810(2)	1839(4)	2621(2)	38(1)
C(7)	6068(2)	3344(4)	-847(1)	30(1)
C(10)	6780(1)	2355(3)	935(1)	25(1)
C(24)	5311(2)	1095(4)	2395(1)	31(1)
C(18)	8319(2)	522(4)	1882(2)	43(1)
C(36)	4128(2)	2107(3)	-634(1)	29(1)
C(37)	3943(2)	3567(4)	-759(2)	46(1)
C(44)	4245(2)	-2504(4)	118(2)	42(1)
C(14)	6649(2)	5138(4)	826(2)	39(1)
C(16)	7847(2)	-523(4)	1612(1)	31(1)
C(28)	5779(3)	2376(5)	3134(2)	50(1)
C(5)	5261(1)	2611(3)	-197(1)	24(1)
C(27)	5252(3)	2164(5)	3428(2)	60(1)
C(9)	6808(2)	3655(3)	542(1)	29(1)

C(33)	5132(2)	-4710(4)	1941(2)	40(1)
C(45)	4824(2)	-3146(4)	32(2)	47(1)
C(35)	5478(2)	-2357(4)	2278(2)	34(1)
C(46)	5335(2)	-2253(4)	-74(2)	47(1)
C(3)	6665(2)	-50(4)	1657(1)	28(1)
C(41)	3927(2)	1001(5)	-990(2)	41(1)
B(1)	4598(2)	1741(4)	-152(2)	27(1)
C(42)	4683(2)	-27(3)	-27(1)	28(1)
C(31)	5000(2)	-2503(4)	1414(1)	32(1)
C(8)	6486(2)	3559(3)	-435(1)	30(1)
C(4)	6129(2)	723(3)	1488(1)	26(1)
C(11)	6193(1)	1878(3)	1121(2)	24(1)
C(12)	5708(1)	2882(3)	196(1)	23(1)
C(40)	3572(2)	1330(5)	-1435(2)	50(1)
C(47)	5267(2)	-705(4)	-106(2)	42(1)
C(13)	6327(2)	3353(3)	96(1)	27(1)
C(43)	4175(2)	-960(4)	91(2)	35(1)
C(30)	5273(1)	-1665(3)	1816(1)	25(1)
C(39)	3415(2)	2789(5)	-1546(2)	51(1)
C(38)	3595(2)	3912(5)	-1203(2)	55(1)
C(34)	5413(2)	-3887(4)	2338(2)	40(1)
C(26)	4745(3)	1395(6)	3214(2)	68(2)
C(32)	4928(2)	-4038(4)	1481(2)	41(1)
C(19)	7703(2)	-1848(4)	1978(2)	44(1)
C(48A)	2704(4)	550(30)	2503(9)	102(5)
Cl(3A)	1931(1)	370(2)	2271(1)	91(1)
Cl(4A)	2719(1)	1778(3)	3050(1)	125(1)
C(48B)	2691(5)	970(40)	2433(8)	102(5)
Cl(3B)	1931(1)	370(2)	2271(1)	91(1)
Cl(4B)	2719(1)	1778(3)	3050(1)	125(1)
C(49A)	2141(8)	6340(20)	9334(3)	123(5)
Cl(5A)	1970(1)	5631(4)	9971(1)	148(1)
Cl(6A)	2785(1)	7574(2)	9374(1)	102(1)
C(49B)	2624(5)	5680(20)	9553(6)	123(5)
Cl(5B)	1970(1)	5631(4)	9971(1)	148(1)
Cl(6B)	2785(1)	7574(2)	9374(1)	102(1)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for pdcl2_0m.

C(20A)-C(23A)	1.510(5)	C(1)-H(1A)	0.9300
C(20A)-C(7)	1.514(5)	C(25)-C(26)	1.391(7)
C(20A)-C(21A)	1.521(5)	C(25)-C(24)	1.398(6)
C(20A)-C(22A)	1.551(5)	C(25)-H(25A)	0.9300
C(21A)-H(21A)	0.9600	C(17)-C(16)	1.540(6)
C(21A)-H(21B)	0.9600	C(17)-H(17A)	0.9600
C(21A)-H(21C)	0.9600	C(17)-H(17B)	0.9600
C(22A)-H(22A)	0.9600	C(17)-H(17C)	0.9600
C(22A)-H(22B)	0.9600	C(15)-C(9)	1.535(5)
C(22A)-H(22C)	0.9600	C(15)-H(15A)	0.9600
C(23A)-H(23A)	0.9600	C(15)-H(15B)	0.9600
C(23A)-H(23B)	0.9600	C(15)-H(15C)	0.9600
C(23A)-H(23C)	0.9600	C(2)-C(3)	1.401(5)
C(21B)-H(21D)	0.9600	C(2)-C(16)	1.533(4)
C(21B)-H(21E)	0.9600	C(6)-C(5)	1.401(5)
C(21B)-H(21F)	0.9600	C(6)-C(7)	1.403(5)
C(22B)-H(22D)	0.9600	C(6)-H(6A)	0.9300
C(22B)-H(22E)	0.9600	C(29)-C(24)	1.382(5)
C(22B)-H(22F)	0.9600	C(29)-C(28)	1.384(6)
C(23B)-H(23D)	0.9600	C(29)-H(29A)	0.9300
C(23B)-H(23E)	0.9600	C(7)-C(8)	1.384(5)
C(23B)-H(23F)	0.9600	C(10)-C(11)	1.406(4)
Pd(1)-P(1)	2.2264(8)	C(10)-C(9)	1.534(4)
Pd(1)-S(1)	2.2563(7)	C(18)-C(16)	1.538(5)
Pd(1)-Cl(2)	2.3135(8)	C(18)-H(18A)	0.9600
Pd(1)-Cl(1)	2.3961(8)	C(18)-H(18B)	0.9600
Pd(1)-B(1)	3.311(4)	C(18)-H(18C)	0.9600
S(1)-C(11)	1.770(3)	C(36)-C(37)	1.403(5)
S(1)-C(12)	1.795(3)	C(36)-C(41)	1.405(5)
S(1)-C(9)	3.005(3)	C(36)-B(1)	1.613(5)
Cl(1)-B(1)	2.101(4)	C(37)-C(38)	1.380(6)
P(1)-C(30)	1.806(3)	C(37)-H(37A)	0.9300
P(1)-C(24)	1.812(4)	C(44)-C(45)	1.383(7)
P(1)-C(4)	1.819(3)	C(44)-C(43)	1.394(5)
C(1)-C(10)	1.393(4)	C(44)-H(44A)	0.9300
C(1)-C(2)	1.403(4)	C(14)-C(9)	1.549(5)

C(14)-H(14A)	0.9600	C(43)-H(43A)	0.9300
C(14)-H(14B)	0.9600	C(39)-C(38)	1.382(7)
C(14)-H(14C)	0.9600	C(39)-H(39A)	0.9300
C(16)-C(19)	1.536(5)	C(38)-H(38A)	0.9300
C(28)-C(27)	1.363(7)	C(34)-H(34A)	0.9300
C(28)-H(28A)	0.9300	C(26)-H(26A)	0.9300
C(5)-C(12)	1.400(4)	C(32)-H(32A)	0.9300
C(5)-B(1)	1.622(5)	C(19)-H(19A)	0.9600
C(27)-C(26)	1.395(8)	C(19)-H(19B)	0.9600
C(27)-H(27A)	0.9300	C(19)-H(19C)	0.9600
C(9)-C(13)	1.547(5)	C(48A)-Cl(3A)	1.763(5)
C(33)-C(32)	1.379(6)	C(48A)-Cl(4A)	1.767(5)
C(33)-C(34)	1.382(6)	C(48A)-H(48A)	0.9700
C(33)-H(33A)	0.9300	C(48A)-H(48B)	0.9700
C(45)-C(46)	1.381(7)	C(48B)-H(48C)	0.9700
C(45)-H(45A)	0.9300	C(48B)-H(48D)	0.9700
C(35)-C(34)	1.387(5)	C(49A)-Cl(5A)	1.766(5)
C(35)-C(30)	1.392(5)	C(49A)-Cl(6A)	1.771(5)
C(35)-H(35A)	0.9300	C(49A)-H(49A)	0.9700
C(46)-C(47)	1.398(6)	C(49A)-H(49B)	0.9700
C(46)-H(46A)	0.9300	C(49B)-H(49C)	0.9700
C(3)-C(4)	1.406(4)	C(49B)-H(49D)	0.9700
C(3)-H(3A)	0.9300		
C(41)-C(40)	1.388(6)	C(23A)-C(20A)-C(7)	113.5(4)
C(41)-H(41A)	0.9300	C(23A)-C(20A)-C(21A)	112.4(5)
B(1)-C(42)	1.627(5)	C(7)-C(20A)-C(21A)	113.6(4)
C(42)-C(47)	1.402(5)	C(23A)-C(20A)-C(22A)	104.5(5)
C(42)-C(43)	1.404(5)	C(7)-C(20A)-C(22A)	106.2(4)
C(31)-C(30)	1.391(5)	C(21A)-C(20A)-C(22A)	105.7(5)
C(31)-C(32)	1.395(5)	C(20A)-C(21A)-H(21A)	109.5
C(31)-H(31A)	0.9300	C(20A)-C(21A)-H(21B)	109.5
C(8)-C(13)	1.397(5)	H(21A)-C(21A)-H(21B)	109.5
C(8)-H(8A)	0.9300	C(20A)-C(21A)-H(21C)	109.5
C(4)-C(11)	1.396(4)	H(21A)-C(21A)-H(21C)	109.5
C(12)-C(13)	1.413(4)	H(21B)-C(21A)-H(21C)	109.5
C(40)-C(39)	1.379(6)	C(20A)-C(22A)-H(22A)	109.5
C(40)-H(40A)	0.9300	C(20A)-C(22A)-H(22B)	109.5
C(47)-H(47A)	0.9300	H(22A)-C(22A)-H(22B)	109.5

C(20A)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(30)-P(1)-Pd(1)	116.25(11)
H(22A)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(24)-P(1)-Pd(1)	115.01(12)
H(22B)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(4)-P(1)-Pd(1)	105.58(11)
C(20A)-C(23A)-H(23A)	109.5	C(10)-C(1)-C(2)	123.1(3)
C(20A)-C(23A)-H(23B)	109.5	C(10)-C(1)-H(1A)	118.4
H(23A)-C(23A)-H(23B)	109.5	C(2)-C(1)-H(1A)	118.4
C(20A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(26)-C(25)-C(24)	119.8(4)
H(23A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(26)-C(25)-H(25A)	120.1
H(23B)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(24)-C(25)-H(25A)	120.1
H(21D)-C(21B)-H(21E)	109.5	C(16)-C(17)-H(17A)	109.5
H(21D)-C(21B)-H(21F)	109.5	C(16)-C(17)-H(17B)	109.5
H(21E)-C(21B)-H(21F)	109.5	H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
H(22D)-C(22B)-H(22E)	109.5	C(16)-C(17)-H(17C)	109.5
H(22D)-C(22B)-H(22F)	109.5	H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(22E)-C(22B)-H(22F)	109.5	H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
H(23D)-C(23B)-H(23E)	109.5	C(9)-C(15)-H(15A)	109.5
H(23D)-C(23B)-H(23F)	109.5	C(9)-C(15)-H(15B)	109.5
H(23E)-C(23B)-H(23F)	109.5	H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
P(1)-Pd(1)-S(1)	87.13(3)	C(9)-C(15)-H(15C)	109.5
P(1)-Pd(1)-Cl(2)	92.09(3)	H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
S(1)-Pd(1)-Cl(2)	171.82(3)	H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
P(1)-Pd(1)-Cl(1)	173.35(3)	C(3)-C(2)-C(1)	118.5(3)
S(1)-Pd(1)-Cl(1)	86.24(3)	C(3)-C(2)-C(16)	121.8(3)
Cl(2)-Pd(1)-Cl(1)	94.55(3)	C(1)-C(2)-C(16)	119.7(3)
P(1)-Pd(1)-B(1)	137.36(7)	C(5)-C(6)-C(7)	123.6(3)
S(1)-Pd(1)-B(1)	72.61(7)	C(5)-C(6)-H(6A)	118.2
Cl(2)-Pd(1)-B(1)	112.89(7)	C(7)-C(6)-H(6A)	118.2
Cl(1)-Pd(1)-B(1)	39.23(7)	C(24)-C(29)-C(28)	121.2(4)
C(11)-S(1)-C(12)	98.98(16)	C(24)-C(29)-H(29A)	119.4
C(11)-S(1)-Pd(1)	106.13(9)	C(28)-C(29)-H(29A)	119.4
C(12)-S(1)-Pd(1)	119.47(10)	C(8)-C(7)-C(6)	117.6(3)
C(11)-S(1)-C(9)	57.27(11)	C(8)-C(7)-C(20A)	122.2(3)
C(12)-S(1)-C(9)	59.49(12)	C(6)-C(7)-C(20A)	120.2(3)
Pd(1)-S(1)-C(9)	160.59(6)	C(1)-C(10)-C(11)	116.5(3)
B(1)-Cl(1)-Pd(1)	94.61(11)	C(1)-C(10)-C(9)	124.5(3)
C(30)-P(1)-C(24)	105.26(16)	C(11)-C(10)-C(9)	118.9(3)
C(30)-P(1)-C(4)	108.18(14)	C(29)-C(24)-C(25)	118.8(4)
C(24)-P(1)-C(4)	105.98(16)	C(29)-C(24)-P(1)	122.3(3)

C(25)-C(24)-P(1)	118.8(3)	C(10)-C(9)-C(13)	108.1(2)
C(16)-C(18)-H(18A)	109.5	C(15)-C(9)-C(13)	111.7(3)
C(16)-C(18)-H(18B)	109.5	C(10)-C(9)-C(14)	110.1(3)
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5	C(15)-C(9)-C(14)	106.6(3)
C(16)-C(18)-H(18C)	109.5	C(13)-C(9)-C(14)	110.0(3)
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5	C(10)-C(9)-S(1)	65.08(16)
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5	C(15)-C(9)-S(1)	170.0(2)
C(37)-C(36)-C(41)	115.4(3)	C(13)-C(9)-S(1)	63.51(16)
C(37)-C(36)-B(1)	122.3(3)	C(14)-C(9)-S(1)	83.40(19)
C(41)-C(36)-B(1)	122.0(3)	C(32)-C(33)-C(34)	120.9(3)
C(38)-C(37)-C(36)	122.9(4)	C(32)-C(33)-H(33A)	119.5
C(38)-C(37)-H(37A)	118.6	C(34)-C(33)-H(33A)	119.5
C(36)-C(37)-H(37A)	118.6	C(46)-C(45)-C(44)	119.8(3)
C(45)-C(44)-C(43)	120.2(4)	C(46)-C(45)-H(45A)	120.1
C(45)-C(44)-H(44A)	119.9	C(44)-C(45)-H(45A)	120.1
C(43)-C(44)-H(44A)	119.9	C(34)-C(35)-C(30)	120.1(4)
C(9)-C(14)-H(14A)	109.5	C(34)-C(35)-H(35A)	120.0
C(9)-C(14)-H(14B)	109.5	C(30)-C(35)-H(35A)	119.9
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5	C(45)-C(46)-C(47)	120.3(4)
C(9)-C(14)-H(14C)	109.5	C(45)-C(46)-H(46A)	119.8
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5	C(47)-C(46)-H(46A)	119.8
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5	C(2)-C(3)-C(4)	120.1(3)
C(2)-C(16)-C(19)	112.2(3)	C(2)-C(3)-H(3A)	119.9
C(2)-C(16)-C(18)	109.9(3)	C(4)-C(3)-H(3A)	119.9
C(19)-C(16)-C(18)	109.7(3)	C(40)-C(41)-C(36)	122.3(4)
C(2)-C(16)-C(17)	109.0(3)	C(40)-C(41)-H(41A)	118.9
C(19)-C(16)-C(17)	107.3(3)	C(36)-C(41)-H(41A)	118.9
C(18)-C(16)-C(17)	108.7(3)	C(36)-B(1)-C(5)	113.1(3)
C(27)-C(28)-C(29)	120.2(4)	C(36)-B(1)-C(42)	114.5(3)
C(27)-C(28)-H(28A)	119.9	C(5)-B(1)-C(42)	112.6(3)
C(29)-C(28)-H(28A)	119.9	C(36)-B(1)-Cl(1)	100.8(2)
C(12)-C(5)-C(6)	115.2(3)	C(5)-B(1)-Cl(1)	107.8(2)
C(12)-C(5)-B(1)	129.0(3)	C(42)-B(1)-Cl(1)	106.9(2)
C(6)-C(5)-B(1)	114.4(3)	C(36)-B(1)-Pd(1)	144.1(2)
C(28)-C(27)-C(26)	120.0(4)	C(5)-B(1)-Pd(1)	93.6(2)
C(28)-C(27)-H(27A)	120.0	C(42)-B(1)-Pd(1)	72.79(18)
C(26)-C(27)-H(27A)	120.0	Cl(1)-B(1)-Pd(1)	46.16(8)
C(10)-C(9)-C(15)	110.4(3)	C(47)-C(42)-C(43)	117.5(3)

C(47)-C(42)-B(1)	119.7(3)	C(38)-C(39)-H(39A)	120.1
C(43)-C(42)-B(1)	122.3(3)	C(37)-C(38)-C(39)	119.7(4)
C(30)-C(31)-C(32)	119.3(3)	C(37)-C(38)-H(38A)	120.1
C(30)-C(31)-H(31A)	120.3	C(39)-C(38)-H(38A)	120.1
C(32)-C(31)-H(31A)	120.3	C(33)-C(34)-C(35)	119.5(4)
C(7)-C(8)-C(13)	123.1(3)	C(33)-C(34)-H(34A)	120.2
C(7)-C(8)-H(8A)	118.5	C(35)-C(34)-H(34A)	120.2
C(13)-C(8)-H(8A)	118.5	C(25)-C(26)-C(27)	120.0(5)
C(11)-C(4)-C(3)	119.2(3)	C(25)-C(26)-H(26A)	120.0
C(11)-C(4)-P(1)	117.3(2)	C(27)-C(26)-H(26A)	120.0
C(3)-C(4)-P(1)	123.5(2)	C(33)-C(32)-C(31)	119.9(4)
C(4)-C(11)-C(10)	122.4(3)	C(33)-C(32)-H(32A)	120.0
C(4)-C(11)-S(1)	118.9(2)	C(31)-C(32)-H(32A)	120.0
C(10)-C(11)-S(1)	118.7(2)	C(16)-C(19)-H(19A)	109.5
C(5)-C(12)-C(13)	124.4(3)	C(16)-C(19)-H(19B)	109.5
C(5)-C(12)-S(1)	121.6(2)	H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5
C(13)-C(12)-S(1)	113.9(2)	C(16)-C(19)-H(19C)	109.5
C(39)-C(40)-C(41)	119.9(4)	H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5
C(39)-C(40)-H(40A)	120.0	H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5
C(41)-C(40)-H(40A)	120.0	Cl(3A)-C(48A)-Cl(4A)	109.5(4)
C(46)-C(47)-C(42)	121.0(4)	Cl(3A)-C(48A)-H(48A)	109.8
C(46)-C(47)-H(47A)	119.5	Cl(4A)-C(48A)-H(48A)	109.8
C(42)-C(47)-H(47A)	119.5	Cl(3A)-C(48A)-H(48B)	109.8
C(8)-C(13)-C(12)	116.1(3)	Cl(4A)-C(48A)-H(48B)	109.8
C(8)-C(13)-C(9)	120.9(3)	H(48A)-C(48A)-H(48B)	108.2
C(12)-C(13)-C(9)	123.0(3)	H(48C)-C(48B)-H(48D)	107.9
C(44)-C(43)-C(42)	121.2(4)	Cl(5A)-C(49A)-Cl(6A)	109.5(4)
C(44)-C(43)-H(43A)	119.4	Cl(5A)-C(49A)-H(49A)	109.8
C(42)-C(43)-H(43A)	119.4	Cl(6A)-C(49A)-H(49A)	109.8
C(31)-C(30)-C(35)	120.2(3)	Cl(5A)-C(49A)-H(49B)	109.8
C(31)-C(30)-P(1)	119.0(3)	Cl(6A)-C(49A)-H(49B)	109.8
C(35)-C(30)-P(1)	120.9(3)	H(49A)-C(49A)-H(49B)	108.2
C(40)-C(39)-C(38)	119.7(4)	H(49C)-C(49B)-H(49D)	108.2
C(40)-C(39)-H(39A)	120.1		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for pdcl2_0m. 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
C(20A)	36(2)	66(3)	26(2)	9(2)	0(2)	-12(2)
C(21A)	64(3)	93(3)	33(2)	14(2)	6(2)	-23(2)
C(22A)	64(3)	93(3)	33(2)	14(2)	6(2)	-23(2)
C(23A)	64(3)	93(3)	33(2)	14(2)	6(2)	-23(2)
C(20B)	36(2)	66(3)	26(2)	9(2)	0(2)	-12(2)
C(21B)	64(3)	93(3)	33(2)	14(2)	6(2)	-23(2)
C(22B)	64(3)	93(3)	33(2)	14(2)	6(2)	-23(2)
C(23B)	64(3)	93(3)	33(2)	14(2)	6(2)	-23(2)
Pd(1)	21(1)	23(1)	27(1)	0(1)	4(1)	0(1)
Cl(2)	26(1)	36(1)	45(1)	3(1)	11(1)	-4(1)
S(1)	23(1)	22(1)	26(1)	1(1)	1(1)	-1(1)
Cl(1)	22(1)	31(1)	36(1)	1(1)	1(1)	4(1)
P(1)	26(1)	24(1)	23(1)	1(1)	3(1)	-2(1)
C(1)	23(1)	31(1)	28(2)	4(1)	3(2)	-2(1)
C(25)	53(3)	60(3)	48(3)	-19(2)	16(2)	-20(2)
C(17)	44(2)	42(2)	47(2)	3(2)	4(2)	12(1)
C(15)	24(2)	46(2)	42(2)	18(2)	-3(1)	-12(1)
C(2)	28(2)	30(1)	29(2)	4(1)	-1(1)	1(1)
C(6)	29(2)	35(2)	30(2)	3(1)	-1(1)	-5(1)
C(29)	42(2)	38(2)	35(2)	-4(1)	2(2)	-9(2)
C(7)	27(2)	35(2)	27(2)	5(1)	3(1)	-2(1)
C(10)	23(1)	26(1)	25(1)	5(1)	-3(1)	-2(1)
C(24)	41(2)	23(1)	29(2)	-2(1)	1(1)	-4(1)
C(18)	33(2)	47(2)	49(2)	2(2)	-12(2)	-3(2)
C(36)	21(2)	33(2)	33(2)	2(1)	-2(1)	-2(1)
C(37)	41(2)	40(2)	59(3)	7(2)	-19(2)	-4(2)
C(44)	59(3)	31(2)	37(2)	-1(1)	-2(2)	-12(2)
C(14)	41(2)	30(2)	44(2)	5(1)	-9(2)	-11(1)
C(16)	25(2)	34(2)	35(2)	10(1)	-3(1)	3(1)
C(28)	71(3)	45(2)	35(2)	-9(2)	-7(2)	-8(2)
C(5)	23(2)	22(1)	29(2)	2(1)	-2(1)	-1(1)
C(27)	97(4)	52(3)	31(2)	-16(2)	5(2)	-10(2)
C(9)	23(2)	30(1)	32(2)	9(1)	-5(1)	-6(1)

C(33)	43(2)	24(2)	53(2)	-1(1)	6(2)	2(1)
C(45)	79(3)	24(2)	39(2)	-4(1)	-12(2)	1(2)
C(35)	35(2)	33(2)	32(2)	3(1)	-4(2)	-5(1)
C(46)	52(3)	30(2)	58(3)	-5(2)	-8(2)	12(2)
C(3)	27(2)	31(1)	26(2)	5(1)	-2(1)	0(1)
C(41)	39(2)	45(2)	38(2)	-2(2)	-6(2)	6(2)
B(1)	24(2)	27(2)	31(2)	2(1)	-2(1)	0(1)
C(42)	30(2)	26(1)	28(2)	0(1)	1(1)	-1(1)
C(31)	31(2)	30(1)	33(2)	-4(1)	-3(1)	3(1)
C(8)	23(2)	36(2)	30(2)	9(1)	0(1)	-5(1)
C(4)	27(2)	25(1)	26(2)	4(1)	4(1)	-3(1)
C(11)	22(1)	22(1)	26(1)	3(1)	0(1)	-1(1)
C(12)	22(1)	22(1)	26(2)	2(1)	1(1)	-1(1)
C(40)	49(3)	65(3)	35(2)	-7(2)	-13(2)	1(2)
C(47)	35(2)	28(2)	62(3)	3(2)	-2(2)	2(1)
C(13)	25(2)	27(1)	30(2)	6(1)	-2(1)	-3(1)
C(43)	37(2)	32(2)	36(2)	-1(1)	0(2)	-6(1)
C(30)	25(2)	21(1)	29(2)	2(1)	4(1)	-3(1)
C(39)	38(2)	77(3)	39(2)	14(2)	-12(2)	-3(2)
C(38)	49(3)	50(2)	65(3)	22(2)	-19(2)	-2(2)
C(34)	45(2)	30(2)	45(2)	13(1)	4(2)	6(1)
C(26)	76(4)	84(4)	45(3)	-18(2)	30(3)	-19(3)
C(32)	41(2)	28(1)	53(2)	-13(2)	-2(2)	4(1)
C(19)	40(2)	44(2)	50(2)	21(2)	0(2)	9(2)
C(48A)	130(7)	39(9)	138(8)	-35(7)	91(6)	-33(5)
Cl(3A)	107(1)	91(1)	74(1)	-6(1)	1(1)	52(1)
Cl(4A)	153(2)	108(1)	114(2)	-43(1)	37(2)	-45(1)
C(48B)	130(7)	39(9)	138(8)	-35(7)	91(6)	-33(5)
Cl(3B)	107(1)	91(1)	74(1)	-6(1)	1(1)	52(1)
Cl(4B)	153(2)	108(1)	114(2)	-43(1)	37(2)	-45(1)
C(49A)	99(10)	170(13)	100(10)	-23(9)	1(7)	-28(9)
Cl(5A)	132(2)	176(2)	136(2)	20(2)	3(2)	-47(2)
Cl(6A)	127(2)	79(1)	102(1)	-18(1)	-12(1)	-21(1)
C(49B)	99(10)	170(13)	100(10)	-23(9)	1(7)	-28(9)
Cl(5B)	132(2)	176(2)	136(2)	20(2)	3(2)	-47(2)
Cl(6B)	127(2)	79(1)	102(1)	-18(1)	-12(1)	-21(1)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)
for pdcl2_0m.

	x	y	z	U(eq)
H(21A)	7008	4221	-1863	95
H(21B)	7193	3297	-1360	95
H(21C)	7005	4979	-1304	95
H(22A)	5416	4755	-1567	95
H(22B)	5946	5192	-1968	95
H(22C)	5956	5829	-1390	95
H(23A)	5629	2091	-1714	95
H(23B)	6323	1529	-1733	95
H(23C)	6086	2704	-2147	95
H(21D)	6766	5054	-1868	95
H(21E)	7043	4832	-1299	95
H(21F)	6452	5842	-1382	95
H(22D)	5472	2687	-1764	95
H(22E)	5890	3549	-2172	95
H(22F)	5459	4434	-1780	95
H(23D)	6360	1332	-1472	95
H(23E)	6979	2147	-1308	95
H(23F)	6753	2191	-1898	95
H(1A)	7692	1832	988	33
H(25A)	4429	380	2550	65
H(17A)	7855	-1809	932	67
H(17B)	8517	-1703	1195	67
H(17C)	8253	-352	871	67
H(15A)	7484	4645	76	56
H(15B)	7593	2926	142	56
H(15C)	7758	4017	607	56
H(6A)	5182	2694	-992	38
H(29A)	6174	1980	2425	46
H(18A)	8689	-29	1973	64
H(18B)	8136	933	2197	64
H(18C)	8428	1315	1643	64
H(37A)	4059	4336	-532	56

H(44A)	3901	-3103	194	51
H(14A)	6669	5945	577	58
H(14B)	6945	5309	1106	58
H(14C)	6235	5079	972	58
H(28A)	6118	2884	3278	60
H(27A)	5231	2532	3772	72
H(33A)	5079	-5732	1985	48
H(45A)	4869	-4177	45	57
H(35A)	5658	-1793	2546	40
H(46A)	5726	-2683	-125	56
H(3A)	6628	-826	1899	34
H(41A)	4035	13	-924	49
H(31A)	4867	-2045	1103	38
H(8A)	6892	3855	-517	35
H(40A)	3440	568	-1658	60
H(47A)	5614	-116	-181	50
H(43A)	3784	-540	153	42
H(39A)	3189	3017	-1850	61
H(38A)	3483	4895	-1271	66
H(34A)	5558	-4355	2642	48
H(26A)	4389	1231	3418	82
H(32A)	4744	-4607	1216	49
H(19A)	7407	-2496	1809	67
H(19B)	7531	-1487	2305	67
H(19C)	8082	-2388	2048	67
H(48A)	2970	930	2223	123
H(48B)	2863	-421	2609	123
H(48C)	2973	121	2425	123
H(48D)	2833	1682	2171	123
H(49A)	1779	6860	9195	147
H(49B)	2239	5522	9096	147
H(49C)	2543	5099	9237	147
H(49D)	2983	5257	9733	147

Table 6. Torsion angles [°] for pdcl2_0m.

P(1)-Pd(1)-S(1)-C(11)	17.89(12)	C(30)-P(1)-C(24)-C(29)	115.8(3)
Cl(1)-Pd(1)-S(1)-C(11)	-161.61(12)	C(4)-P(1)-C(24)-C(29)	1.3(3)
B(1)-Pd(1)-S(1)-C(11)	-124.06(14)	Pd(1)-P(1)-C(24)-C(29)	-115.0(3)
P(1)-Pd(1)-S(1)-C(12)	128.39(11)	C(30)-P(1)-C(24)-C(25)	-61.6(4)
Cl(1)-Pd(1)-S(1)-C(12)	-51.12(11)	C(4)-P(1)-C(24)-C(25)	-176.1(4)
B(1)-Pd(1)-S(1)-C(12)	-13.57(13)	Pd(1)-P(1)-C(24)-C(25)	67.7(4)
P(1)-Pd(1)-S(1)-C(9)	47.1(2)	C(41)-C(36)-C(37)-C(38)	-0.9(7)
Cl(1)-Pd(1)-S(1)-C(9)	-132.4(2)	B(1)-C(36)-C(37)-C(38)	172.9(4)
B(1)-Pd(1)-S(1)-C(9)	-94.9(2)	C(3)-C(2)-C(16)-C(19)	1.3(5)
S(1)-Pd(1)-Cl(1)-B(1)	66.87(10)	C(1)-C(2)-C(16)-C(19)	-177.1(3)
Cl(2)-Pd(1)-Cl(1)-B(1)	-121.30(10)	C(3)-C(2)-C(16)-C(18)	-121.0(4)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(30)	-139.27(12)	C(1)-C(2)-C(16)-C(18)	60.5(4)
Cl(2)-Pd(1)-P(1)-C(30)	48.88(12)	C(3)-C(2)-C(16)-C(17)	120.0(4)
B(1)-Pd(1)-P(1)-C(30)	-79.01(15)	C(1)-C(2)-C(16)-C(17)	-58.4(4)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(24)	97.09(12)	C(24)-C(29)-C(28)-C(27)	0.7(7)
Cl(2)-Pd(1)-P(1)-C(24)	-74.76(12)	C(7)-C(6)-C(5)-C(12)	0.1(5)
B(1)-Pd(1)-P(1)-C(24)	157.35(15)	C(7)-C(6)-C(5)-B(1)	-168.1(3)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(4)	-19.36(10)	C(29)-C(28)-C(27)-C(26)	0.4(8)
Cl(2)-Pd(1)-P(1)-C(4)	168.79(11)	C(1)-C(10)-C(9)-C(15)	6.5(5)
B(1)-Pd(1)-P(1)-C(4)	40.90(14)	C(11)-C(10)-C(9)-C(15)	-170.8(3)
C(10)-C(1)-C(2)-C(3)	-1.6(5)	C(1)-C(10)-C(9)-C(13)	128.9(3)
C(10)-C(1)-C(2)-C(16)	176.9(3)	C(11)-C(10)-C(9)-C(13)	-48.4(4)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	1.2(5)	C(1)-C(10)-C(9)-C(14)	-110.9(4)
C(5)-C(6)-C(7)-C(20A)	-178.6(3)	C(11)-C(10)-C(9)-C(14)	71.8(4)
C(23A)-C(20A)-C(7)-C(8)	132.9(5)	C(1)-C(10)-C(9)-S(1)	176.9(4)
C(21A)-C(20A)-C(7)-C(8)	2.9(6)	C(11)-C(10)-C(9)-S(1)	-0.4(2)
C(22A)-C(20A)-C(7)-C(8)	-112.9(4)	C(11)-S(1)-C(9)-C(10)	0.3(2)
C(23A)-C(20A)-C(7)-C(6)	-47.3(6)	C(12)-S(1)-C(9)-C(10)	-126.1(2)
C(21A)-C(20A)-C(7)-C(6)	-177.4(5)	Pd(1)-S(1)-C(9)-C(10)	-33.5(3)
C(22A)-C(20A)-C(7)-C(6)	66.9(5)	C(11)-S(1)-C(9)-C(13)	128.3(2)
C(2)-C(1)-C(10)-C(11)	-1.2(5)	C(12)-S(1)-C(9)-C(13)	1.84(17)
C(2)-C(1)-C(10)-C(9)	-178.6(3)	Pd(1)-S(1)-C(9)-C(13)	94.5(3)
C(28)-C(29)-C(24)-C(25)	-0.8(6)	C(11)-S(1)-C(9)-C(14)	-115.5(2)
C(28)-C(29)-C(24)-P(1)	-178.1(3)	C(12)-S(1)-C(9)-C(14)	118.1(2)
C(26)-C(25)-C(24)-C(29)	-0.3(7)	Pd(1)-S(1)-C(9)-C(14)	-149.3(2)
C(26)-C(25)-C(24)-P(1)	177.1(4)	C(43)-C(44)-C(45)-C(46)	0.8(6)

C(44)-C(45)-C(46)-C(47)	-1.4(7)	Cl(2)-Pd(1)-B(1)-Cl(1)	67.60(10)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	2.0(5)	C(36)-B(1)-C(42)-C(47)	114.6(4)
C(16)-C(2)-C(3)-C(4)	-176.5(3)	C(5)-B(1)-C(42)-C(47)	-16.5(5)
C(37)-C(36)-C(41)-C(40)	0.3(6)	Cl(1)-B(1)-C(42)-C(47)	-134.7(3)
B(1)-C(36)-C(41)-C(40)	-173.6(4)	Pd(1)-B(1)-C(42)-C(47)	-103.1(3)
C(37)-C(36)-B(1)-C(5)	-56.5(5)	C(36)-B(1)-C(42)-C(43)	-56.7(5)
C(41)-C(36)-B(1)-C(5)	116.9(4)	C(5)-B(1)-C(42)-C(43)	172.3(3)
C(37)-C(36)-B(1)-C(42)	172.7(4)	Cl(1)-B(1)-C(42)-C(43)	54.0(4)
C(41)-C(36)-B(1)-C(42)	-13.9(5)	Pd(1)-B(1)-C(42)-C(43)	85.6(3)
C(37)-C(36)-B(1)-Cl(1)	58.3(4)	C(6)-C(7)-C(8)-C(13)	-1.6(5)
C(41)-C(36)-B(1)-Cl(1)	-128.2(3)	C(20A)-C(7)-C(8)-C(13)	178.1(3)
C(37)-C(36)-B(1)-Pd(1)	78.4(5)	C(2)-C(3)-C(4)-C(11)	0.4(5)
C(41)-C(36)-B(1)-Pd(1)	-108.2(4)	C(2)-C(3)-C(4)-P(1)	-178.3(3)
C(12)-C(5)-B(1)-C(36)	161.8(3)	C(30)-P(1)-C(4)-C(11)	143.4(3)
C(6)-C(5)-B(1)-C(36)	-32.0(4)	C(24)-P(1)-C(4)-C(11)	-104.1(3)
C(12)-C(5)-B(1)-C(42)	-66.4(4)	Pd(1)-P(1)-C(4)-C(11)	18.3(3)
C(6)-C(5)-B(1)-C(42)	99.8(3)	C(30)-P(1)-C(4)-C(3)	-37.9(3)
C(12)-C(5)-B(1)-Cl(1)	51.2(4)	C(24)-P(1)-C(4)-C(3)	74.6(3)
C(6)-C(5)-B(1)-Cl(1)	-142.6(2)	Pd(1)-P(1)-C(4)-C(3)	-162.9(3)
C(12)-C(5)-B(1)-Pd(1)	6.4(3)	C(3)-C(4)-C(11)-C(10)	-3.5(5)
C(6)-C(5)-B(1)-Pd(1)	172.6(2)	P(1)-C(4)-C(11)-C(10)	175.3(3)
Pd(1)-Cl(1)-B(1)-C(36)	163.83(18)	C(3)-C(4)-C(11)-S(1)	177.1(2)
Pd(1)-Cl(1)-B(1)-C(5)	-77.4(2)	P(1)-C(4)-C(11)-S(1)	-4.1(4)
Pd(1)-Cl(1)-B(1)-C(42)	43.9(2)	C(1)-C(10)-C(11)-C(4)	3.8(5)
P(1)-Pd(1)-B(1)-C(36)	160.9(3)	C(9)-C(10)-C(11)-C(4)	-178.7(3)
S(1)-Pd(1)-B(1)-C(36)	-133.8(4)	C(1)-C(10)-C(11)-S(1)	-176.8(3)
Cl(2)-Pd(1)-B(1)-C(36)	39.8(4)	C(9)-C(10)-C(11)-S(1)	0.7(4)
Cl(1)-Pd(1)-B(1)-C(36)	-27.8(3)	C(12)-S(1)-C(11)-C(4)	-136.4(3)
P(1)-Pd(1)-B(1)-C(5)	-59.8(2)	Pd(1)-S(1)-C(11)-C(4)	-12.0(3)
S(1)-Pd(1)-B(1)-C(5)	5.50(16)	C(9)-S(1)-C(11)-C(4)	179.1(3)
Cl(2)-Pd(1)-B(1)-C(5)	179.05(15)	C(12)-S(1)-C(11)-C(10)	44.2(3)
Cl(1)-Pd(1)-B(1)-C(5)	111.4(2)	Pd(1)-S(1)-C(11)-C(10)	168.5(2)
P(1)-Pd(1)-B(1)-C(42)	52.7(2)	C(9)-S(1)-C(11)-C(10)	-0.4(2)
S(1)-Pd(1)-B(1)-C(42)	118.06(17)	C(6)-C(5)-C(12)-C(13)	-0.9(4)
Cl(2)-Pd(1)-B(1)-C(42)	-68.39(18)	B(1)-C(5)-C(12)-C(13)	165.2(3)
Cl(1)-Pd(1)-B(1)-C(42)	-136.0(2)	C(6)-C(5)-C(12)-S(1)	174.3(2)
P(1)-Pd(1)-B(1)-Cl(1)	-171.27(4)	B(1)-C(5)-C(12)-S(1)	-19.6(4)
S(1)-Pd(1)-B(1)-Cl(1)	-105.94(9)	C(11)-S(1)-C(12)-C(5)	139.1(2)

Pd(1)-S(1)-C(12)-C(5)	24.8(3)	C(45)-C(44)-C(43)-C(42)	0.5(6)
C(9)-S(1)-C(12)-C(5)	-177.6(3)	C(47)-C(42)-C(43)-C(44)	-1.2(5)
C(11)-S(1)-C(12)-C(13)	-45.2(2)	B(1)-C(42)-C(43)-C(44)	170.2(3)
Pd(1)-S(1)-C(12)-C(13)	-159.56(18)	C(32)-C(31)-C(30)-C(35)	0.6(5)
C(9)-S(1)-C(12)-C(13)	-1.97(19)	C(32)-C(31)-C(30)-P(1)	-178.5(3)
C(36)-C(41)-C(40)-C(39)	1.2(7)	C(34)-C(35)-C(30)-C(31)	0.4(5)
C(45)-C(46)-C(47)-C(42)	0.6(7)	C(34)-C(35)-C(30)-P(1)	179.4(3)
C(43)-C(42)-C(47)-C(46)	0.7(6)	C(24)-P(1)-C(30)-C(31)	150.5(3)
B(1)-C(42)-C(47)-C(46)	-171.0(4)	C(4)-P(1)-C(30)-C(31)	-96.5(3)
C(7)-C(8)-C(13)-C(12)	0.9(5)	Pd(1)-P(1)-C(30)-C(31)	22.0(3)
C(7)-C(8)-C(13)-C(9)	-178.1(3)	C(24)-P(1)-C(30)-C(35)	-28.5(3)
C(5)-C(12)-C(13)-C(8)	0.5(4)	C(4)-P(1)-C(30)-C(35)	84.4(3)
S(1)-C(12)-C(13)-C(8)	-175.0(2)	Pd(1)-P(1)-C(30)-C(35)	-157.1(3)
C(5)-C(12)-C(13)-C(9)	179.5(3)	C(41)-C(40)-C(39)-C(38)	-2.0(7)
S(1)-C(12)-C(13)-C(9)	3.9(4)	C(36)-C(37)-C(38)-C(39)	0.1(8)
C(10)-C(9)-C(13)-C(8)	-134.7(3)	C(40)-C(39)-C(38)-C(37)	1.4(8)
C(15)-C(9)-C(13)-C(8)	-13.0(4)	C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	1.6(6)
C(14)-C(9)-C(13)-C(8)	105.1(4)	C(30)-C(35)-C(34)-C(33)	-1.5(6)
S(1)-C(9)-C(13)-C(8)	176.5(3)	C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	1.4(9)
C(10)-C(9)-C(13)-C(12)	46.4(4)	C(28)-C(27)-C(26)-C(25)	-1.4(9)
C(15)-C(9)-C(13)-C(12)	168.0(3)	C(34)-C(33)-C(32)-C(31)	-0.7(6)
C(14)-C(9)-C(13)-C(12)	-73.9(4)	C(30)-C(31)-C(32)-C(33)	-0.5(6)
S(1)-C(9)-C(13)-C(12)	-2.4(2)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

(4) Numbered ORTEP and Crystallographic Data for solvent-free **2B (DE05)**

- Hydrogen atoms are omitted for clarity.
- 50% probability ellipsoids.

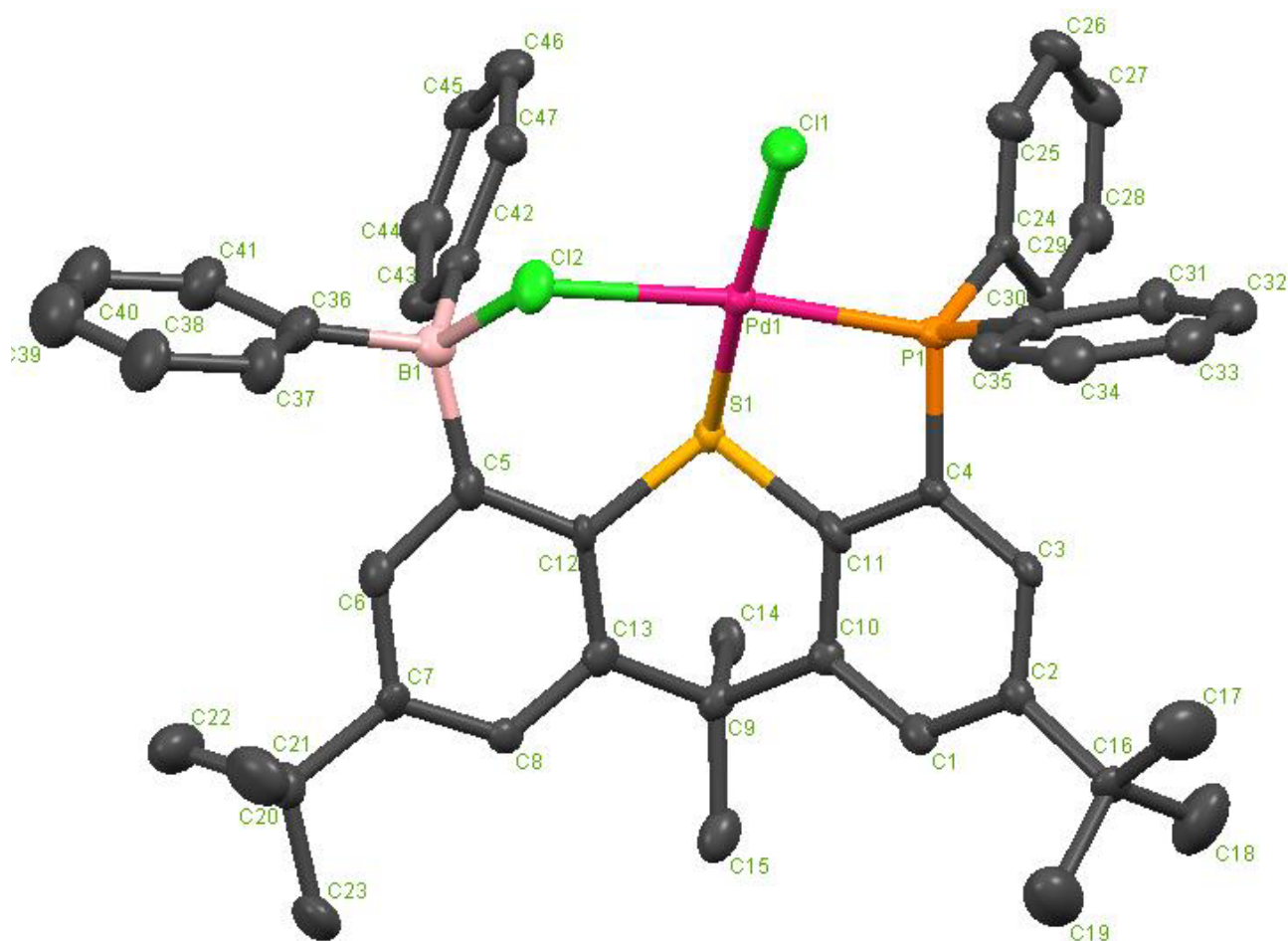


Table 1. Crystal data and structure refinement for DE05.

Identification code	de05	
Empirical formula	C ₄₇ H ₄₈ B Cl ₂ P Pd S	
Formula weight	863.99	
Temperature	173(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/c	
Unit cell dimensions	a = 11.2575(5) Å	α = 90°.
	b = 27.0326(13) Å	β = 97.258(3)°.
	c = 13.7991(7) Å	γ = 90°.
Volume	4165.7(3) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.378 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.695 mm ⁻¹	
F(000)	1784	
Crystal size	0.17 x 0.12 x 0.02 mm ³	
Theta range for data collection	1.49 to 22.50°.	
Index ranges	-12 ≤ h ≤ 12, -28 ≤ k ≤ 29, -14 ≤ l ≤ 14	
Reflections collected	25320	
Independent reflections	5445 [R(int) = 0.1524]	
Completeness to theta = 22.50°	100.0 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.986 and 0.870	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	5445 / 624 / 480	
Goodness-of-fit on F ²	1.218	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0961, wR2 = 0.1936	
R indices (all data)	R1 = 0.1483, wR2 = 0.2131	
Extinction coefficient	0.0128(10)	
Largest diff. peak and hole	3.795 and -0.709 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for DE05. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Pd(1)	3244(1)	91(1)	7509(1)	17(1)
S(1)	1355(2)	280(1)	6718(2)	16(1)
P(1)	2485(2)	-653(1)	7720(2)	17(1)
Cl(1)	5107(2)	-186(1)	8133(2)	29(1)
C(1)	-1280(9)	-206(4)	8223(8)	20(2)
B(1)	2936(11)	1294(5)	6569(11)	23(2)
Cl(2)	3974(2)	907(1)	7554(2)	29(1)
C(2)	-776(9)	-601(4)	8764(8)	19(2)
C(3)	345(8)	-769(4)	8534(8)	16(2)
C(4)	946(8)	-503(4)	7879(8)	15(2)
C(5)	1597(9)	1303(4)	6895(9)	22(2)
C(6)	1109(9)	1759(4)	7108(8)	21(2)
C(7)	-79(9)	1821(4)	7358(8)	19(2)
C(8)	-789(9)	1399(4)	7308(8)	16(2)
C(9)	-1273(8)	500(4)	6958(8)	19(2)
C(10)	-695(8)	57(4)	7548(8)	17(2)
C(11)	494(9)	-90(4)	7428(9)	21(2)
C(12)	822(8)	885(4)	6939(8)	16(2)
C(13)	-393(9)	933(4)	7075(8)	19(2)
C(14)	-1458(9)	337(4)	5855(8)	20(3)
C(15)	-2491(9)	622(4)	7212(9)	30(3)
C(16)	-1415(9)	-853(4)	9544(9)	23(2)
C(17)	-550(12)	-1146(5)	10245(11)	54(4)
C(18)	-2348(12)	-1210(5)	9080(11)	57(4)
C(19)	-2001(12)	-489(5)	10125(11)	53(4)
C(20)	-459(9)	2340(4)	7639(9)	26(3)
C(21)	383(11)	2501(5)	8565(10)	49(4)
C(22)	-338(11)	2700(5)	6822(10)	47(4)
C(23)	-1749(10)	2348(4)	7871(10)	35(3)
C(24)	2444(8)	-1063(4)	6681(8)	16(2)
C(25)	3535(9)	-1217(4)	6413(9)	25(2)
C(26)	3588(10)	-1511(4)	5620(9)	29(3)
C(27)	2531(9)	-1664(4)	5052(9)	29(3)

C(28)	1453(10)	-1516(4)	5329(9)	28(3)
C(29)	1413(9)	-1222(4)	6142(9)	22(2)
C(30)	3069(9)	-990(4)	8799(9)	20(2)
C(31)	2971(9)	-1507(4)	8826(9)	26(3)
C(32)	3267(9)	-1750(5)	9693(10)	32(3)
C(33)	3680(9)	-1497(5)	10536(10)	33(3)
C(34)	3800(9)	-1001(5)	10500(10)	32(3)
C(35)	3501(9)	-747(4)	9649(9)	23(2)
C(36)	3564(9)	1836(4)	6670(10)	29(2)
C(37)	3924(10)	2062(4)	7568(10)	34(3)
C(38)	4386(10)	2532(5)	7676(11)	41(3)
C(39)	4532(11)	2797(5)	6867(11)	49(3)
C(40)	4200(11)	2603(5)	5973(12)	49(3)
C(41)	3742(10)	2130(5)	5871(10)	38(3)
C(42)	2986(9)	1065(4)	5536(9)	25(2)
C(43)	2149(10)	1191(4)	4755(9)	27(3)
C(44)	2225(10)	1059(4)	3795(9)	32(3)
C(45)	3163(10)	772(4)	3585(9)	30(3)
C(46)	4004(10)	618(4)	4330(9)	30(3)
C(47)	3919(9)	754(4)	5285(9)	25(2)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for DE05.

Pd(1)-P(1)	2.219(3)	C(14)-H(14B)	0.9800
Pd(1)-Cl(1)	2.290(3)	C(14)-H(14A)	0.9800
Pd(1)-S(1)	2.320(3)	C(15)-H(15C)	0.9800
Pd(1)-Cl(2)	2.352(3)	C(15)-H(15B)	0.9800
S(1)-C(11)	1.770(12)	C(15)-H(15A)	0.9800
S(1)-C(12)	1.784(10)	C(16)-C(19)	1.476(16)
P(1)-C(30)	1.798(12)	C(16)-C(18)	1.508(16)
P(1)-C(24)	1.809(11)	C(16)-C(17)	1.508(16)
P(1)-C(4)	1.819(9)	C(17)-H(17C)	0.9800
C(1)-C(2)	1.383(15)	C(17)-H(17B)	0.9800
C(1)-C(10)	1.400(15)	C(17)-H(17A)	0.9800
C(1)-H(1A)	0.9500	C(18)-H(18C)	0.9800
B(1)-C(42)	1.562(18)	C(18)-H(18B)	0.9800
B(1)-C(36)	1.626(17)	C(18)-H(18A)	0.9800
B(1)-C(5)	1.626(16)	C(19)-H(19C)	0.9800
B(1)-Cl(2)	1.977(14)	C(19)-H(19B)	0.9800
C(2)-C(3)	1.414(13)	C(19)-H(19A)	0.9800
C(2)-C(16)	1.528(15)	C(20)-C(22)	1.510(17)
C(3)-C(4)	1.394(14)	C(20)-C(23)	1.526(15)
C(3)-H(3A)	0.9500	C(20)-C(21)	1.553(17)
C(4)-C(11)	1.349(14)	C(21)-H(21C)	0.9800
C(5)-C(6)	1.396(15)	C(21)-H(21B)	0.9800
C(5)-C(12)	1.433(14)	C(21)-H(21A)	0.9800
C(6)-C(7)	1.432(14)	C(22)-H(22C)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9500	C(22)-H(22B)	0.9800
C(7)-C(8)	1.390(14)	C(22)-H(22A)	0.9800
C(7)-C(20)	1.531(15)	C(23)-H(23C)	0.9800
C(8)-C(13)	1.388(14)	C(23)-H(23B)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9500	C(23)-H(23A)	0.9800
C(9)-C(15)	1.494(14)	C(24)-C(29)	1.365(14)
C(9)-C(13)	1.528(14)	C(24)-C(25)	1.390(14)
C(9)-C(10)	1.545(15)	C(25)-C(26)	1.361(16)
C(9)-C(14)	1.573(15)	C(25)-H(25A)	0.9500
C(10)-C(11)	1.426(14)	C(26)-C(27)	1.402(15)
C(12)-C(13)	1.410(13)	C(26)-H(26A)	0.9500
C(14)-H(14C)	0.9800	C(27)-C(28)	1.377(15)

C(27)-H(27A)	0.9500	P(1)-Pd(1)-Cl(1)	90.21(10)
C(28)-C(29)	1.381(16)	P(1)-Pd(1)-S(1)	85.14(10)
C(28)-H(28A)	0.9500	Cl(1)-Pd(1)-S(1)	171.79(11)
C(29)-H(29A)	0.9500	P(1)-Pd(1)-Cl(2)	170.33(12)
C(30)-C(35)	1.379(15)	Cl(1)-Pd(1)-Cl(2)	89.78(10)
C(30)-C(31)	1.402(15)	S(1)-Pd(1)-Cl(2)	95.94(10)
C(31)-C(32)	1.370(16)	C(11)-S(1)-C(12)	101.7(5)
C(31)-H(31A)	0.9500	C(11)-S(1)-Pd(1)	98.6(4)
C(32)-C(33)	1.380(17)	C(12)-S(1)-Pd(1)	115.4(3)
C(32)-H(32A)	0.9500	C(30)-P(1)-C(24)	108.4(5)
C(33)-C(34)	1.349(16)	C(30)-P(1)-C(4)	105.4(5)
C(33)-H(33A)	0.9500	C(24)-P(1)-C(4)	107.6(5)
C(34)-C(35)	1.364(16)	C(30)-P(1)-Pd(1)	117.5(4)
C(34)-H(34A)	0.9500	C(24)-P(1)-Pd(1)	115.1(4)
C(35)-H(35A)	0.9500	C(4)-P(1)-Pd(1)	101.7(3)
C(36)-C(41)	1.393(17)	C(2)-C(1)-C(10)	123.8(10)
C(36)-C(37)	1.395(16)	C(2)-C(1)-H(1A)	118.1
C(37)-C(38)	1.372(16)	C(10)-C(1)-H(1A)	118.1
C(37)-H(37A)	0.9500	C(42)-B(1)-C(36)	111.8(10)
C(38)-C(39)	1.354(18)	C(42)-B(1)-C(5)	113.6(10)
C(38)-H(38A)	0.9500	C(36)-B(1)-C(5)	111.8(10)
C(39)-C(40)	1.350(18)	C(42)-B(1)-Cl(2)	109.3(8)
C(39)-H(39A)	0.9500	C(36)-B(1)-Cl(2)	101.9(8)
C(40)-C(41)	1.381(17)	C(5)-B(1)-Cl(2)	107.8(8)
C(40)-H(40A)	0.9500	B(1)-Cl(2)-Pd(1)	107.7(4)
C(41)-H(41A)	0.9500	C(1)-C(2)-C(3)	116.2(10)
C(42)-C(43)	1.382(15)	C(1)-C(2)-C(16)	121.8(9)
C(42)-C(47)	1.422(15)	C(3)-C(2)-C(16)	121.9(10)
C(43)-C(44)	1.385(17)	C(4)-C(3)-C(2)	120.1(10)
C(43)-H(43A)	0.9500	C(4)-C(3)-H(3A)	120.0
C(44)-C(45)	1.371(16)	C(2)-C(3)-H(3A)	120.0
C(44)-H(44A)	0.9500	C(11)-C(4)-C(3)	122.7(9)
C(45)-C(46)	1.370(16)	C(11)-C(4)-P(1)	116.0(8)
C(45)-H(45A)	0.9500	C(3)-C(4)-P(1)	120.8(8)
C(46)-C(47)	1.383(16)	C(6)-C(5)-C(12)	115.4(9)
C(46)-H(46A)	0.9500	C(6)-C(5)-B(1)	118.3(9)
C(47)-H(47A)	0.9500	C(12)-C(5)-B(1)	126.1(10)
		C(5)-C(6)-C(7)	123.9(10)

C(5)-C(6)-H(6A)	118.1	C(19)-C(16)-C(18)	108.7(10)
C(7)-C(6)-H(6A)	118.1	C(19)-C(16)-C(17)	107.4(11)
C(8)-C(7)-C(6)	116.2(10)	C(18)-C(16)-C(17)	107.2(11)
C(8)-C(7)-C(20)	126.0(9)	C(19)-C(16)-C(2)	111.6(10)
C(6)-C(7)-C(20)	117.8(9)	C(18)-C(16)-C(2)	110.5(10)
C(13)-C(8)-C(7)	123.9(9)	C(17)-C(16)-C(2)	111.2(9)
C(13)-C(8)-H(8A)	118.1	C(16)-C(17)-H(17C)	109.5
C(7)-C(8)-H(8A)	118.1	C(16)-C(17)-H(17B)	109.5
C(15)-C(9)-C(13)	114.1(9)	H(17C)-C(17)-H(17B)	109.5
C(15)-C(9)-C(10)	112.7(9)	C(16)-C(17)-H(17A)	109.5
C(13)-C(9)-C(10)	108.3(8)	H(17C)-C(17)-H(17A)	109.5
C(15)-C(9)-C(14)	106.0(9)	H(17B)-C(17)-H(17A)	109.5
C(13)-C(9)-C(14)	108.7(9)	C(16)-C(18)-H(18C)	109.5
C(10)-C(9)-C(14)	106.8(9)	C(16)-C(18)-H(18B)	109.5
C(1)-C(10)-C(11)	117.6(10)	H(18C)-C(18)-H(18B)	109.5
C(1)-C(10)-C(9)	122.8(9)	C(16)-C(18)-H(18A)	109.5
C(11)-C(10)-C(9)	119.6(10)	H(18C)-C(18)-H(18A)	109.5
C(4)-C(11)-C(10)	118.8(10)	H(18B)-C(18)-H(18A)	109.5
C(4)-C(11)-S(1)	121.4(8)	C(16)-C(19)-H(19C)	109.5
C(10)-C(11)-S(1)	119.7(8)	C(16)-C(19)-H(19B)	109.5
C(13)-C(12)-C(5)	122.7(9)	H(19C)-C(19)-H(19B)	109.5
C(13)-C(12)-S(1)	117.3(8)	C(16)-C(19)-H(19A)	109.5
C(5)-C(12)-S(1)	119.8(7)	H(19C)-C(19)-H(19A)	109.5
C(8)-C(13)-C(12)	117.3(9)	H(19B)-C(19)-H(19A)	109.5
C(8)-C(13)-C(9)	119.8(9)	C(22)-C(20)-C(23)	109.0(9)
C(12)-C(13)-C(9)	122.9(9)	C(22)-C(20)-C(7)	110.4(10)
C(9)-C(14)-H(14C)	109.5	C(23)-C(20)-C(7)	111.7(9)
C(9)-C(14)-H(14B)	109.5	C(22)-C(20)-C(21)	109.3(10)
H(14C)-C(14)-H(14B)	109.5	C(23)-C(20)-C(21)	108.8(10)
C(9)-C(14)-H(14A)	109.5	C(7)-C(20)-C(21)	107.7(9)
H(14C)-C(14)-H(14A)	109.5	C(20)-C(21)-H(21C)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14A)	109.5	C(20)-C(21)-H(21B)	109.5
C(9)-C(15)-H(15C)	109.5	H(21C)-C(21)-H(21B)	109.5
C(9)-C(15)-H(15B)	109.5	C(20)-C(21)-H(21A)	109.5
H(15C)-C(15)-H(15B)	109.5	H(21C)-C(21)-H(21A)	109.5
C(9)-C(15)-H(15A)	109.5	H(21B)-C(21)-H(21A)	109.5
H(15C)-C(15)-H(15A)	109.5	C(20)-C(22)-H(22C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15A)	109.5	C(20)-C(22)-H(22B)	109.5

H(22C)-C(22)-H(22B)	109.5	C(34)-C(33)-H(33A)	120.4
C(20)-C(22)-H(22A)	109.5	C(32)-C(33)-H(33A)	120.4
H(22C)-C(22)-H(22A)	109.5	C(33)-C(34)-C(35)	121.0(12)
H(22B)-C(22)-H(22A)	109.5	C(33)-C(34)-H(34A)	119.5
C(20)-C(23)-H(23C)	109.5	C(35)-C(34)-H(34A)	119.5
C(20)-C(23)-H(23B)	109.5	C(34)-C(35)-C(30)	121.0(11)
H(23C)-C(23)-H(23B)	109.5	C(34)-C(35)-H(35A)	119.5
C(20)-C(23)-H(23A)	109.5	C(30)-C(35)-H(35A)	119.5
H(23C)-C(23)-H(23A)	109.5	C(41)-C(36)-C(37)	113.6(11)
H(23B)-C(23)-H(23A)	109.5	C(41)-C(36)-B(1)	123.3(12)
C(29)-C(24)-C(25)	118.8(11)	C(37)-C(36)-B(1)	123.0(11)
C(29)-C(24)-P(1)	124.0(8)	C(38)-C(37)-C(36)	124.4(13)
C(25)-C(24)-P(1)	117.3(8)	C(38)-C(37)-H(37A)	117.8
C(26)-C(25)-C(24)	121.2(11)	C(36)-C(37)-H(37A)	117.8
C(26)-C(25)-H(25A)	119.4	C(39)-C(38)-C(37)	119.0(14)
C(24)-C(25)-H(25A)	119.4	C(39)-C(38)-H(38A)	120.5
C(25)-C(26)-C(27)	120.2(10)	C(37)-C(38)-H(38A)	120.5
C(25)-C(26)-H(26A)	119.9	C(40)-C(39)-C(38)	119.9(14)
C(27)-C(26)-H(26A)	119.9	C(40)-C(39)-H(39A)	120.0
C(28)-C(27)-C(26)	118.3(11)	C(38)-C(39)-H(39A)	120.0
C(28)-C(27)-H(27A)	120.9	C(39)-C(40)-C(41)	120.7(15)
C(26)-C(27)-H(27A)	120.9	C(39)-C(40)-H(40A)	119.7
C(27)-C(28)-C(29)	120.9(11)	C(41)-C(40)-H(40A)	119.7
C(27)-C(28)-H(28A)	119.5	C(40)-C(41)-C(36)	122.4(14)
C(29)-C(28)-H(28A)	119.5	C(40)-C(41)-H(41A)	118.8
C(24)-C(29)-C(28)	120.6(10)	C(36)-C(41)-H(41A)	118.8
C(24)-C(29)-H(29A)	119.7	C(43)-C(42)-C(47)	114.1(11)
C(28)-C(29)-H(29A)	119.7	C(43)-C(42)-B(1)	120.9(10)
C(35)-C(30)-C(31)	118.2(11)	C(47)-C(42)-B(1)	124.8(10)
C(35)-C(30)-P(1)	121.0(9)	C(42)-C(43)-C(44)	124.3(11)
C(31)-C(30)-P(1)	120.4(9)	C(42)-C(43)-H(43A)	117.8
C(32)-C(31)-C(30)	119.4(12)	C(44)-C(43)-H(43A)	117.8
C(32)-C(31)-H(31A)	120.3	C(45)-C(44)-C(43)	119.4(12)
C(30)-C(31)-H(31A)	120.3	C(45)-C(44)-H(44A)	120.3
C(31)-C(32)-C(33)	121.1(12)	C(43)-C(44)-H(44A)	120.3
C(31)-C(32)-H(32A)	119.5	C(46)-C(45)-C(44)	119.4(12)
C(33)-C(32)-H(32A)	119.5	C(46)-C(45)-H(45A)	120.3
C(34)-C(33)-C(32)	119.2(12)	C(44)-C(45)-H(45A)	120.3

C(45)-C(46)-C(47)	120.7(11)	C(46)-C(47)-C(42)	122.0(11)
C(45)-C(46)-H(46A)	119.6	C(46)-C(47)-H(47A)	119.0
C(47)-C(46)-H(46A)	119.6	C(42)-C(47)-H(47A)	119.0

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for DE05. 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)	15(1)	17(1)	19(1)	-2(1)	3(1)	-2(1)
S(1)	18(1)	13(2)	16(2)	1(1)	2(1)	-2(1)
P(1)	12(1)	21(2)	17(2)	-4(2)	0(1)	1(1)
Cl(1)	20(1)	28(2)	39(2)	2(2)	3(1)	0(1)
C(1)	19(4)	19(5)	21(5)	-1(4)	-1(4)	0(4)
B(1)	22(4)	24(5)	23(5)	1(4)	0(4)	1(4)
Cl(2)	26(1)	27(2)	31(2)	2(2)	-5(1)	-7(1)
C(2)	21(4)	16(4)	18(4)	0(4)	2(4)	1(4)
C(3)	17(4)	11(4)	19(5)	1(4)	0(4)	3(4)
C(4)	15(4)	13(4)	17(5)	-1(4)	3(4)	3(4)
C(5)	28(4)	16(4)	21(5)	3(4)	2(4)	-2(4)
C(6)	26(4)	18(5)	19(5)	0(4)	-1(4)	-6(4)
C(7)	26(4)	18(4)	14(4)	2(4)	8(4)	-2(4)
C(8)	20(4)	18(4)	12(5)	4(4)	4(4)	3(4)
C(9)	20(4)	21(4)	17(5)	4(4)	3(4)	-2(4)
C(10)	18(4)	18(4)	13(4)	1(4)	0(4)	0(4)
C(11)	25(4)	13(4)	24(5)	0(4)	0(4)	6(4)
C(12)	25(4)	8(4)	16(5)	1(4)	5(4)	-1(4)
C(13)	21(4)	22(4)	14(4)	5(4)	2(4)	-1(4)
C(14)	25(5)	16(5)	16(6)	-1(5)	-6(5)	-4(4)
C(15)	30(5)	31(6)	27(6)	10(5)	-1(5)	-6(5)
C(16)	28(4)	24(5)	19(5)	6(4)	12(4)	3(4)
C(17)	59(6)	67(7)	39(7)	19(6)	16(6)	10(6)
C(18)	66(7)	55(7)	53(7)	5(6)	17(6)	-24(6)

C(19)	70(7)	47(7)	46(7)	5(6)	24(6)	9(6)
C(20)	29(4)	21(5)	29(5)	1(4)	4(4)	0(4)
C(21)	53(6)	42(7)	51(7)	-20(6)	5(6)	4(6)
C(22)	45(6)	48(7)	51(7)	18(6)	22(6)	7(5)
C(23)	43(6)	25(6)	41(7)	-5(5)	15(5)	7(5)
C(24)	16(4)	15(5)	18(5)	3(4)	6(4)	1(4)
C(25)	26(4)	26(5)	22(5)	-3(4)	4(4)	4(4)
C(26)	33(4)	30(5)	25(5)	-5(4)	8(4)	7(4)
C(27)	38(5)	28(5)	21(5)	-4(4)	1(4)	7(4)
C(28)	35(4)	25(5)	25(5)	-2(4)	0(4)	-3(4)
C(29)	28(4)	18(5)	21(5)	1(4)	6(4)	2(4)
C(30)	19(4)	22(5)	20(5)	0(4)	2(4)	7(4)
C(31)	25(4)	24(5)	27(5)	3(4)	0(4)	0(4)
C(32)	27(4)	32(5)	35(5)	7(5)	4(4)	4(4)
C(33)	27(4)	38(5)	32(5)	9(5)	4(4)	3(4)
C(34)	25(4)	42(5)	28(5)	-1(5)	-2(4)	-1(4)
C(35)	22(4)	25(5)	24(5)	-1(4)	4(4)	2(4)
C(36)	27(4)	28(5)	33(5)	0(4)	7(4)	-8(4)
C(37)	37(5)	28(5)	35(5)	-4(5)	2(4)	-10(4)
C(38)	43(5)	35(5)	44(6)	-9(5)	1(5)	-19(4)
C(39)	51(5)	42(5)	54(6)	-5(5)	6(5)	-14(5)
C(40)	50(5)	45(5)	53(6)	5(5)	11(5)	-13(5)
C(41)	37(5)	36(5)	42(5)	3(5)	9(5)	-8(4)
C(42)	22(4)	26(4)	27(5)	2(4)	6(4)	-2(4)
C(43)	24(4)	31(5)	27(5)	0(5)	6(4)	-2(4)
C(44)	34(5)	37(5)	25(5)	-3(5)	-2(5)	-6(4)
C(45)	32(4)	36(5)	22(5)	-5(5)	12(4)	-9(4)
C(46)	28(4)	33(5)	32(5)	-6(5)	10(4)	-5(4)
C(47)	25(4)	22(5)	28(5)	-5(4)	6(4)	-2(4)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$) for DE05.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	-2068	-108	8313	24
H(3A)	689	-1062	8827	19
H(6A)	1594	2046	7086	26
H(8A)	-1592	1431	7442	19
H(14C)	-682	251	5649	30
H(14B)	-1815	611	5452	30
H(14A)	-1991	50	5776	30
H(15C)	-2427	730	7894	45
H(15B)	-3003	329	7121	45
H(15A)	-2841	889	6786	45
H(17C)	52	-923	10583	81
H(17B)	-152	-1395	9882	81
H(17A)	-986	-1311	10725	81
H(18C)	-2763	-1362	9588	86
H(18B)	-1960	-1468	8733	86
H(18A)	-2928	-1032	8617	86
H(19C)	-1399	-261	10446	80
H(19B)	-2394	-663	10622	80
H(19A)	-2600	-303	9695	80
H(21C)	169	2835	8754	73
H(21B)	1214	2498	8424	73
H(21A)	296	2271	9100	73
H(22C)	-868	2600	6237	70
H(22B)	493	2703	6679	70
H(22A)	-560	3032	7019	70
H(23C)	-2291	2260	7283	53
H(23B)	-1945	2680	8088	53
H(23A)	-1839	2108	8389	53
H(25A)	4258	-1115	6792	30
H(26A)	4342	-1612	5449	35
H(27A)	2558	-1865	4490	35
H(28A)	727	-1618	4957	34

H(29A)	660	-1128	6329	26
H(31A)	2702	-1686	8248	31
H(32A)	3187	-2100	9714	38
H(33A)	3877	-1669	11134	39
H(34A)	4099	-825	11077	38
H(35A)	3591	-398	9643	28
H(37A)	3844	1879	8143	40
H(38A)	4599	2668	8308	49
H(39A)	4868	3120	6930	59
H(40A)	4282	2795	5408	59
H(41A)	3542	1999	5232	46
H(43A)	1477	1381	4885	33
H(44A)	1633	1167	3287	39
H(45A)	3229	680	2930	36
H(46A)	4652	417	4188	36
H(47A)	4502	635	5790	30

Table 6. Torsion angles [°] for DE05.

P(1)-Pd(1)-S(1)-C(11)	33.9(4)	C(5)-C(6)-C(7)-C(20)	176.0(11)
Cl(2)-Pd(1)-S(1)-C(11)	-136.4(4)	C(6)-C(7)-C(8)-C(13)	2.7(17)
P(1)-Pd(1)-S(1)-C(12)	141.4(4)	C(20)-C(7)-C(8)-C(13)	-178.2(11)
Cl(2)-Pd(1)-S(1)-C(12)	-29.0(4)	C(2)-C(1)-C(10)-C(11)	-0.9(17)
Cl(1)-Pd(1)-P(1)-C(30)	37.8(4)	C(2)-C(1)-C(10)-C(9)	-179.4(10)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(30)	-148.9(4)	C(15)-C(9)-C(10)-C(1)	1.8(15)
Cl(1)-Pd(1)-P(1)-C(24)	-91.7(4)	C(13)-C(9)-C(10)-C(1)	129.0(11)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(24)	81.5(4)	C(14)-C(9)-C(10)-C(1)	-114.2(11)
Cl(1)-Pd(1)-P(1)-C(4)	152.4(4)	C(15)-C(9)-C(10)-C(11)	-176.7(10)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(4)	-34.4(4)	C(13)-C(9)-C(10)-C(11)	-49.6(14)
C(42)-B(1)-Cl(2)-Pd(1)	-60.4(8)	C(14)-C(9)-C(10)-C(11)	67.3(12)
C(36)-B(1)-Cl(2)-Pd(1)	-178.8(6)	C(3)-C(4)-C(11)-C(10)	-6.4(17)
C(5)-B(1)-Cl(2)-Pd(1)	63.5(8)	P(1)-C(4)-C(11)-C(10)	-178.1(8)
Cl(1)-Pd(1)-Cl(2)-B(1)	155.5(4)	C(3)-C(4)-C(11)-S(1)	172.1(9)
S(1)-Pd(1)-Cl(2)-B(1)	-18.6(4)	P(1)-C(4)-C(11)-S(1)	0.4(14)
C(10)-C(1)-C(2)-C(3)	-6.4(16)	C(1)-C(10)-C(11)-C(4)	7.3(16)
C(10)-C(1)-C(2)-C(16)	175.6(10)	C(9)-C(10)-C(11)-C(4)	-174.1(10)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	7.5(15)	C(1)-C(10)-C(11)-S(1)	-171.2(8)
C(16)-C(2)-C(3)-C(4)	-174.5(10)	C(9)-C(10)-C(11)-S(1)	7.4(15)
C(2)-C(3)-C(4)-C(11)	-1.2(17)	C(12)-S(1)-C(11)-C(4)	-146.0(10)
C(2)-C(3)-C(4)-P(1)	170.1(8)	Pd(1)-S(1)-C(11)-C(4)	-27.6(10)
C(30)-P(1)-C(4)-C(11)	151.8(9)	C(12)-S(1)-C(11)-C(10)	32.5(10)
C(24)-P(1)-C(4)-C(11)	-92.7(10)	Pd(1)-S(1)-C(11)-C(10)	150.9(9)
Pd(1)-P(1)-C(4)-C(11)	28.7(10)	C(6)-C(5)-C(12)-C(13)	7.1(17)
C(30)-P(1)-C(4)-C(3)	-20.0(10)	B(1)-C(5)-C(12)-C(13)	-169.4(11)
C(24)-P(1)-C(4)-C(3)	95.5(10)	C(6)-C(5)-C(12)-S(1)	-178.1(8)
Pd(1)-P(1)-C(4)-C(3)	-143.2(8)	B(1)-C(5)-C(12)-S(1)	5.4(16)
C(42)-B(1)-C(5)-C(6)	-120.8(12)	C(11)-S(1)-C(12)-C(13)	-33.6(10)
C(36)-B(1)-C(5)-C(6)	6.8(15)	Pd(1)-S(1)-C(12)-C(13)	-139.2(8)
Cl(2)-B(1)-C(5)-C(6)	117.9(10)	C(11)-S(1)-C(12)-C(5)	151.3(9)
C(42)-B(1)-C(5)-C(12)	55.6(16)	Pd(1)-S(1)-C(12)-C(5)	45.8(10)
C(36)-B(1)-C(5)-C(12)	-176.8(11)	C(7)-C(8)-C(13)-C(12)	3.9(17)
Cl(2)-B(1)-C(5)-C(12)	-65.7(14)	C(7)-C(8)-C(13)-C(9)	-175.0(11)
C(12)-C(5)-C(6)-C(7)	0.1(17)	C(5)-C(12)-C(13)-C(8)	-9.1(17)
B(1)-C(5)-C(6)-C(7)	176.9(11)	S(1)-C(12)-C(13)-C(8)	176.0(8)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	-4.8(17)	C(5)-C(12)-C(13)-C(9)	169.8(11)

S(1)-C(12)-C(13)-C(9)	-5.1(15)	C(4)-P(1)-C(30)-C(35)	-82.5(9)
C(15)-C(9)-C(13)-C(8)	-5.7(15)	Pd(1)-P(1)-C(30)-C(35)	29.9(10)
C(10)-C(9)-C(13)-C(8)	-132.0(10)	C(24)-P(1)-C(30)-C(31)	-24.7(10)
C(14)-C(9)-C(13)-C(8)	112.3(11)	C(4)-P(1)-C(30)-C(31)	90.3(9)
C(15)-C(9)-C(13)-C(12)	175.4(10)	Pd(1)-P(1)-C(30)-C(31)	-157.3(7)
C(10)-C(9)-C(13)-C(12)	49.1(14)	C(35)-C(30)-C(31)-C(32)	2.1(15)
C(14)-C(9)-C(13)-C(12)	-66.6(13)	P(1)-C(30)-C(31)-C(32)	-170.9(8)
C(1)-C(2)-C(16)-C(19)	-41.1(15)	C(30)-C(31)-C(32)-C(33)	-1.2(16)
C(3)-C(2)-C(16)-C(19)	141.0(11)	C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	-0.5(17)
C(1)-C(2)-C(16)-C(18)	80.1(14)	C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	1.2(17)
C(3)-C(2)-C(16)-C(18)	-97.8(13)	C(33)-C(34)-C(35)-C(30)	-0.2(17)
C(1)-C(2)-C(16)-C(17)	-161.0(11)	C(31)-C(30)-C(35)-C(34)	-1.4(15)
C(3)-C(2)-C(16)-C(17)	21.1(15)	P(1)-C(30)-C(35)-C(34)	171.6(8)
C(8)-C(7)-C(20)-C(22)	-121.3(12)	C(42)-B(1)-C(36)-C(41)	20.7(15)
C(6)-C(7)-C(20)-C(22)	57.7(13)	C(5)-B(1)-C(36)-C(41)	-107.9(13)
C(8)-C(7)-C(20)-C(23)	0.1(17)	Cl(2)-B(1)-C(36)-C(41)	137.3(10)
C(6)-C(7)-C(20)-C(23)	179.2(10)	C(42)-B(1)-C(36)-C(37)	-162.4(10)
C(8)-C(7)-C(20)-C(21)	119.5(12)	C(5)-B(1)-C(36)-C(37)	69.0(14)
C(6)-C(7)-C(20)-C(21)	-61.5(13)	Cl(2)-B(1)-C(36)-C(37)	-45.8(13)
C(30)-P(1)-C(24)-C(29)	113.4(10)	C(41)-C(36)-C(37)-C(38)	1.5(17)
C(4)-P(1)-C(24)-C(29)	-0.2(11)	B(1)-C(36)-C(37)-C(38)	-175.7(11)
Pd(1)-P(1)-C(24)-C(29)	-112.8(9)	C(36)-C(37)-C(38)-C(39)	-1.4(19)
C(30)-P(1)-C(24)-C(25)	-67.8(10)	C(37)-C(38)-C(39)-C(40)	1(2)
C(4)-P(1)-C(24)-C(25)	178.6(9)	C(38)-C(39)-C(40)-C(41)	-2(2)
Pd(1)-P(1)-C(24)-C(25)	66.1(9)	B(1)-C(36)-C(41)-C(40)	175.3(11)
C(29)-C(24)-C(25)-C(26)	1.4(17)	C(36)-B(1)-C(42)-C(43)	-82.8(13)
P(1)-C(24)-C(25)-C(26)	-177.5(9)	C(5)-B(1)-C(42)-C(43)	44.8(15)
C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	0.1(18)	Cl(2)-B(1)-C(42)-C(43)	165.3(9)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	-1.0(18)	C(36)-B(1)-C(42)-C(47)	91.2(14)
C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	0.4(18)	C(5)-B(1)-C(42)-C(47)	-141.2(11)
C(25)-C(24)-C(29)-C(28)	-2.0(17)	Cl(2)-B(1)-C(42)-C(47)	-20.8(14)
P(1)-C(24)-C(29)-C(28)	176.9(9)	B(1)-C(42)-C(43)-C(44)	170.7(11)
C(27)-C(28)-C(29)-C(24)	1.1(18)	B(1)-C(42)-C(47)-C(46)	-170.6(11)
C(24)-P(1)-C(30)-C(35)	162.5(8)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

(5) Numbered ORTEP and Crystallographic Data for $4\mathbf{B} \cdot 1.31\text{CH}_2\text{Cl}_2$ (so02)

- Lattice solvent and hydrogen atoms are omitted for clarity.
- 50% probability ellipsoids.

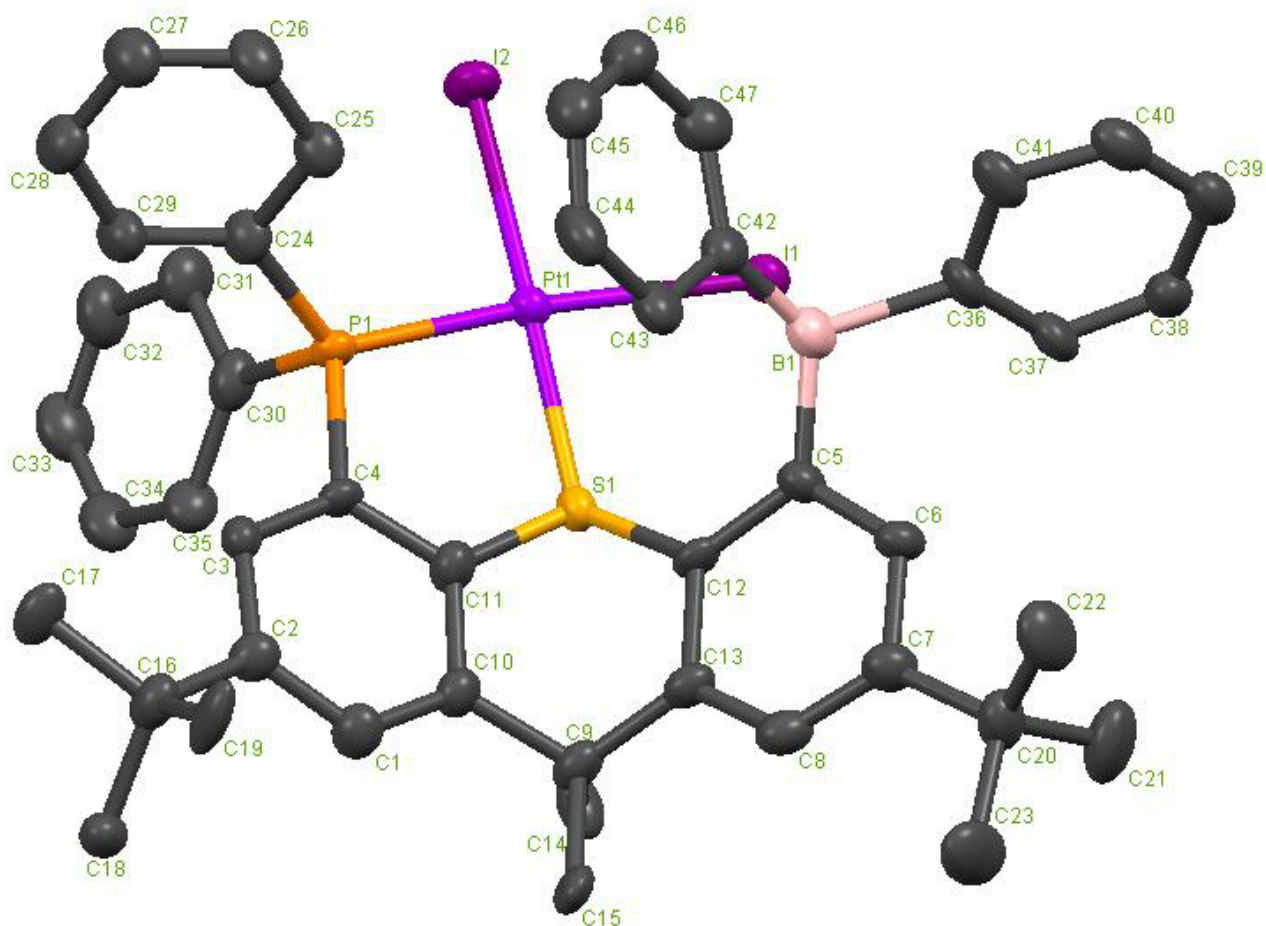


Table 1. Crystal data and structure refinement for so02.

Identification code	so02	
Empirical formula	C _{48.31} H _{50.62} B Cl _{2.62} I ₂ P Pt S	
Formula weight	1246.93	
Temperature	173(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	Pna2(1)	
Unit cell dimensions	a = 22.18(2) Å	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 9.043(8) Å	$\beta = 90^\circ$.
	c = 24.75(2) Å	$\gamma = 90^\circ$.
Volume	4964(8) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.662 Mg/m ³	
Absorption coefficient	4.310 mm ⁻¹	
F(000)	2410	
Crystal size	0.25 x 0.13 x 0.03 mm ³	
Theta range for data collection	1.65 to 26.36°.	
Index ranges	-27 ≤ h ≤ 27, -11 ≤ k ≤ 10, -30 ≤ l ≤ 30	
Reflections collected	34768	
Independent reflections	9159 [R(int) = 0.1803]	
Completeness to theta = 26.36°	99.8 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.88 and 0.70	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	9159 / 398 / 518	
Goodness-of-fit on F ²	1.021	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0652, wR2 = 0.1222	
R indices (all data)	R1 = 0.1661, wR2 = 0.1573	
Absolute structure parameter	0.003(11)	
Extinction coefficient	0.00101(8)	
Largest diff. peak and hole	1.743 and -1.368 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for so02. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Pt(1)	5385(1)	3623(1)	6868(1)	24(1)
I(1)	6050(1)	2094(1)	7552(1)	30(1)
S(1)	4591(2)	2309(5)	7162(2)	26(1)
P(1)	4762(2)	4760(5)	6301(2)	23(1)
C(1)	2883(8)	3527(19)	6896(9)	33(3)
B(1)	5336(11)	3490(30)	8307(8)	35(4)
I(2)	6332(1)	4819(2)	6440(1)	38(1)
C(2)	2928(9)	4790(20)	6582(7)	29(3)
C(3)	3513(7)	5164(19)	6366(7)	25(3)
C(4)	4009(8)	4352(19)	6541(6)	24(3)
C(5)	4746(8)	2510(20)	8296(7)	28(3)
C(6)	4525(8)	2150(20)	8817(7)	29(3)
C(7)	3923(9)	1660(20)	8899(7)	34(3)
C(8)	3574(9)	1460(20)	8453(7)	33(3)
C(9)	3363(9)	1360(20)	7453(7)	31(3)
C(13)	3766(9)	1667(19)	7930(7)	27(3)
C(12)	4355(8)	2230(20)	7851(7)	24(3)
C(11)	3969(8)	3181(19)	6917(8)	31(3)
C(10)	3366(9)	2720(20)	7084(7)	28(3)
C(14)	3531(9)	-50(20)	7142(8)	40(5)
C(15)	2692(9)	1150(20)	7642(7)	36(5)
C(16)	2384(9)	5680(20)	6434(8)	34(3)
C(17)	2507(9)	6940(20)	6031(7)	36(5)
C(18)	1892(8)	4640(20)	6165(7)	36(5)
C(19)	2135(9)	6280(20)	6932(9)	46(5)
C(20)	3743(10)	1300(20)	9471(7)	40(4)
C(21)	4059(11)	-140(30)	9650(8)	59(6)
C(22)	3903(11)	2490(30)	9864(7)	54(6)
C(23)	3064(11)	930(30)	9511(8)	60(6)
C(24)	4820(9)	6760(20)	6203(7)	31(4)
C(25)	5115(9)	7570(20)	6610(7)	31(4)
C(26)	5202(9)	9070(20)	6527(8)	37(4)
C(27)	4991(9)	9710(20)	6091(8)	40(4)

C(28)	4688(9)	8950(20)	5706(8)	40(4)
C(29)	4609(9)	7420(20)	5759(8)	37(4)
C(30)	4776(10)	4000(20)	5641(7)	36(4)
C(31)	5257(10)	4340(20)	5281(7)	43(4)
C(32)	5232(11)	3700(20)	4749(8)	49(4)
C(33)	4783(11)	2890(20)	4571(8)	46(4)
C(34)	4328(11)	2580(20)	4907(8)	43(4)
C(35)	4291(10)	3100(20)	5436(7)	36(4)
C(36)	5808(9)	2990(20)	8825(7)	32(4)
C(37)	5931(8)	1560(20)	8979(7)	36(4)
C(38)	6295(9)	1250(20)	9371(7)	37(4)
C(39)	6544(9)	2370(20)	9699(8)	39(4)
C(40)	6438(9)	3750(20)	9538(7)	40(4)
C(41)	6085(9)	4170(20)	9121(7)	37(4)
C(42)	5346(9)	5060(20)	8145(7)	32(3)
C(43)	4775(10)	5820(20)	8154(7)	39(4)
C(44)	4723(11)	7410(20)	8073(8)	43(4)
C(45)	5230(10)	8200(20)	7995(8)	46(4)
C(46)	5760(11)	7450(20)	7943(8)	43(4)
C(47)	5820(10)	5940(20)	8023(7)	42(4)
C(48)	8079(10)	9660(20)	8322(16)	66(13)
Cl(1)	7361(9)	10360(20)	8501(8)	187(8)
Cl(2)	8087(10)	7716(19)	8402(8)	187(8)
C(49)	2382(15)	800(50)	5252(18)	210(30)
Cl(3)	3010(8)	668(17)	5690(5)	153(5)
Cl(4)	2493(8)	2282(18)	4796(5)	153(5)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for so02.

Pt(1)-P(1)	2.222(5)	C(14)-H(14B)	0.9800
Pt(1)-S(1)	2.246(5)	C(14)-H(14C)	0.9800
Pt(1)-I(2)	2.590(2)	C(15)-H(15A)	0.9800
Pt(1)-I(1)	2.637(2)	C(15)-H(15B)	0.9800
I(1)-B(1)	2.75(2)	C(15)-H(15C)	0.9800
S(1)-C(11)	1.702(18)	C(16)-C(19)	1.45(3)
S(1)-C(12)	1.784(17)	C(16)-C(17)	1.53(2)
P(1)-C(30)	1.770(18)	C(16)-C(18)	1.59(3)
P(1)-C(4)	1.811(18)	C(17)-H(17A)	0.9800
P(1)-C(24)	1.829(19)	C(17)-H(17B)	0.9800
C(1)-C(10)	1.38(2)	C(17)-H(17C)	0.9800
C(1)-C(2)	1.39(2)	C(18)-H(18A)	0.9800
C(1)-H(1A)	0.9500	C(18)-H(18B)	0.9800
B(1)-C(42)	1.48(3)	C(18)-H(18C)	0.9800
B(1)-C(5)	1.58(3)	C(19)-H(19A)	0.9800
B(1)-C(36)	1.72(3)	C(19)-H(19B)	0.9800
C(2)-C(3)	1.44(2)	C(19)-H(19C)	0.9800
C(2)-C(16)	1.50(3)	C(20)-C(22)	1.49(3)
C(3)-C(4)	1.39(2)	C(20)-C(21)	1.54(3)
C(3)-H(3A)	0.9500	C(20)-C(23)	1.55(3)
C(4)-C(11)	1.41(2)	C(21)-H(21A)	0.9800
C(5)-C(6)	1.42(2)	C(21)-H(21B)	0.9800
C(5)-C(12)	1.42(2)	C(21)-H(21C)	0.9800
C(6)-C(7)	1.42(2)	C(22)-H(22A)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9500	C(22)-H(22B)	0.9800
C(7)-C(8)	1.36(2)	C(22)-H(22C)	0.9800
C(7)-C(20)	1.51(2)	C(23)-H(23A)	0.9800
C(8)-C(13)	1.37(2)	C(23)-H(23B)	0.9800
C(8)-H(8A)	0.9500	C(23)-H(23C)	0.9800
C(9)-C(13)	1.51(3)	C(24)-C(29)	1.33(3)
C(9)-C(14)	1.53(2)	C(24)-C(25)	1.40(2)
C(9)-C(10)	1.53(2)	C(25)-C(26)	1.39(2)
C(9)-C(15)	1.57(2)	C(25)-H(25A)	0.9500
C(13)-C(12)	1.42(2)	C(26)-C(27)	1.31(2)
C(11)-C(10)	1.46(3)	C(26)-H(26A)	0.9500
C(14)-H(14A)	0.9800	C(27)-C(28)	1.36(3)

C(27)-H(27A)	0.9500	C(48)-Cl(2)	1.769(5)
C(28)-C(29)	1.40(3)	C(48)-H(48A)	0.9900
C(28)-H(28A)	0.9500	C(48)-H(48B)	0.9900
C(29)-H(29A)	0.9500	C(49)-Cl(4)	1.768(5)
C(30)-C(31)	1.42(3)	C(49)-Cl(3)	1.769(5)
C(30)-C(35)	1.44(3)	C(49)-H(49A)	0.9900
C(31)-C(32)	1.44(3)	C(49)-H(49B)	0.9900
C(31)-H(31A)	0.9500		
C(32)-C(33)	1.31(3)	P(1)-Pt(1)-S(1)	87.81(18)
C(32)-H(32A)	0.9500	P(1)-Pt(1)-I(2)	93.03(14)
C(33)-C(34)	1.34(3)	S(1)-Pt(1)-I(2)	171.81(13)
C(33)-H(33A)	0.9500	P(1)-Pt(1)-I(1)	174.96(13)
C(34)-C(35)	1.39(3)	S(1)-Pt(1)-I(1)	87.34(14)
C(34)-H(34A)	0.9500	I(2)-Pt(1)-I(1)	91.58(8)
C(35)-H(35A)	0.9500	Pt(1)-I(1)-B(1)	82.7(5)
C(36)-C(37)	1.38(3)	C(11)-S(1)-C(12)	96.9(9)
C(36)-C(41)	1.43(3)	C(11)-S(1)-Pt(1)	106.0(6)
C(37)-C(38)	1.29(2)	C(12)-S(1)-Pt(1)	124.0(6)
C(37)-H(37A)	0.9500	C(30)-P(1)-C(4)	103.8(9)
C(38)-C(39)	1.41(3)	C(30)-P(1)-C(24)	105.0(9)
C(38)-H(38A)	0.9500	C(4)-P(1)-C(24)	108.1(9)
C(39)-C(40)	1.33(3)	C(30)-P(1)-Pt(1)	113.1(7)
C(39)-H(39A)	0.9500	C(4)-P(1)-Pt(1)	105.8(6)
C(40)-C(41)	1.35(2)	C(24)-P(1)-Pt(1)	119.9(6)
C(40)-H(40A)	0.9500	C(10)-C(1)-C(2)	124.7(18)
C(41)-H(41A)	0.9500	C(10)-C(1)-H(1A)	117.6
C(42)-C(47)	1.35(3)	C(2)-C(1)-H(1A)	117.6
C(42)-C(43)	1.44(3)	C(42)-B(1)-C(5)	123(2)
C(43)-C(44)	1.46(3)	C(42)-B(1)-C(36)	116.5(18)
C(43)-H(43A)	0.9500	C(5)-B(1)-C(36)	111.9(16)
C(44)-C(45)	1.34(3)	C(42)-B(1)-I(1)	104.3(13)
C(44)-H(44A)	0.9500	C(5)-B(1)-I(1)	102.1(13)
C(45)-C(46)	1.36(3)	C(36)-B(1)-I(1)	92.0(12)
C(45)-H(45A)	0.9500	C(1)-C(2)-C(3)	117.7(17)
C(46)-C(47)	1.39(3)	C(1)-C(2)-C(16)	121.5(17)
C(46)-H(46A)	0.9500	C(3)-C(2)-C(16)	120.6(16)
C(47)-H(47A)	0.9500	C(4)-C(3)-C(2)	118.2(16)
C(48)-Cl(1)	1.769(5)	C(4)-C(3)-H(3A)	120.9

C(2)-C(3)-H(3A)	120.9	H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5
C(3)-C(4)-C(11)	123.4(17)	H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5
C(3)-C(4)-P(1)	121.4(13)	C(9)-C(15)-H(15A)	109.5
C(11)-C(4)-P(1)	115.3(14)	C(9)-C(15)-H(15B)	109.5
C(6)-C(5)-C(12)	117.0(17)	H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
C(6)-C(5)-B(1)	113.4(16)	C(9)-C(15)-H(15C)	109.5
C(12)-C(5)-B(1)	128.1(16)	H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
C(5)-C(6)-C(7)	121.7(17)	H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
C(5)-C(6)-H(6A)	119.2	C(19)-C(16)-C(2)	107.3(16)
C(7)-C(6)-H(6A)	119.2	C(19)-C(16)-C(17)	110.1(15)
C(8)-C(7)-C(6)	117.4(17)	C(2)-C(16)-C(17)	114.4(16)
C(8)-C(7)-C(20)	125.5(18)	C(19)-C(16)-C(18)	108.4(16)
C(6)-C(7)-C(20)	116.8(17)	C(2)-C(16)-C(18)	109.7(15)
C(7)-C(8)-C(13)	124.7(19)	C(17)-C(16)-C(18)	106.8(16)
C(7)-C(8)-H(8A)	117.7	C(16)-C(17)-H(17A)	109.5
C(13)-C(8)-H(8A)	117.7	C(16)-C(17)-H(17B)	109.5
C(13)-C(9)-C(14)	113.7(16)	H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(13)-C(9)-C(10)	108.3(15)	C(16)-C(17)-H(17C)	109.5
C(14)-C(9)-C(10)	111.6(14)	H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
C(13)-C(9)-C(15)	110.5(14)	H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
C(14)-C(9)-C(15)	106.1(16)	C(16)-C(18)-H(18A)	109.5
C(10)-C(9)-C(15)	106.3(15)	C(16)-C(18)-H(18B)	109.5
C(8)-C(13)-C(12)	117.7(17)	H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
C(8)-C(13)-C(9)	121.9(17)	C(16)-C(18)-H(18C)	109.5
C(12)-C(13)-C(9)	120.3(15)	H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
C(13)-C(12)-C(5)	121.2(15)	H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
C(13)-C(12)-S(1)	114.6(13)	C(16)-C(19)-H(19A)	109.5
C(5)-C(12)-S(1)	123.6(14)	C(16)-C(19)-H(19B)	109.5
C(4)-C(11)-C(10)	117.3(16)	H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5
C(4)-C(11)-S(1)	122.1(14)	C(16)-C(19)-H(19C)	109.5
C(10)-C(11)-S(1)	120.6(14)	H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5
C(1)-C(10)-C(11)	117.8(16)	H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5
C(1)-C(10)-C(9)	128.5(18)	C(22)-C(20)-C(7)	112.9(18)
C(11)-C(10)-C(9)	113.7(16)	C(22)-C(20)-C(21)	108.1(18)
C(9)-C(14)-H(14A)	109.5	C(7)-C(20)-C(21)	109.6(17)
C(9)-C(14)-H(14B)	109.5	C(22)-C(20)-C(23)	110.3(18)
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5	C(7)-C(20)-C(23)	111.4(17)
C(9)-C(14)-H(14C)	109.5	C(21)-C(20)-C(23)	104.1(18)

C(20)-C(21)-H(21A)	109.5	C(35)-C(30)-P(1)	122.1(15)
C(20)-C(21)-H(21B)	109.5	C(30)-C(31)-C(32)	117(2)
H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5	C(30)-C(31)-H(31A)	121.3
C(20)-C(21)-H(21C)	109.5	C(32)-C(31)-H(31A)	121.3
H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5	C(33)-C(32)-C(31)	124(2)
H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5	C(33)-C(32)-H(32A)	118.0
C(20)-C(22)-H(22A)	109.5	C(31)-C(32)-H(32A)	118.0
C(20)-C(22)-H(22B)	109.5	C(32)-C(33)-C(34)	119(2)
H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5	C(32)-C(33)-H(33A)	120.6
C(20)-C(22)-H(22C)	109.5	C(34)-C(33)-H(33A)	120.6
H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5	C(33)-C(34)-C(35)	124(2)
H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5	C(33)-C(34)-H(34A)	118.1
C(20)-C(23)-H(23A)	109.5	C(35)-C(34)-H(34A)	118.1
C(20)-C(23)-H(23B)	109.5	C(34)-C(35)-C(30)	119(2)
H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5	C(34)-C(35)-H(35A)	120.7
C(20)-C(23)-H(23C)	109.5	C(30)-C(35)-H(35A)	120.7
H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5	C(37)-C(36)-C(41)	118.4(17)
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5	C(37)-C(36)-B(1)	125.1(18)
C(29)-C(24)-C(25)	121.5(18)	C(41)-C(36)-B(1)	116.5(18)
C(29)-C(24)-P(1)	121.7(16)	C(38)-C(37)-C(36)	122(2)
C(25)-C(24)-P(1)	116.8(14)	C(38)-C(37)-H(37A)	118.9
C(26)-C(25)-C(24)	117.8(17)	C(36)-C(37)-H(37A)	118.9
C(26)-C(25)-H(25A)	121.1	C(37)-C(38)-C(39)	122(2)
C(24)-C(25)-H(25A)	121.1	C(37)-C(38)-H(38A)	119.2
C(27)-C(26)-C(25)	120.3(19)	C(39)-C(38)-H(38A)	119.2
C(27)-C(26)-H(26A)	119.8	C(40)-C(39)-C(38)	115.6(19)
C(25)-C(26)-H(26A)	119.8	C(40)-C(39)-H(39A)	122.2
C(26)-C(27)-C(28)	122(2)	C(38)-C(39)-H(39A)	122.2
C(26)-C(27)-H(27A)	119.0	C(39)-C(40)-C(41)	126(2)
C(28)-C(27)-H(27A)	119.0	C(39)-C(40)-H(40A)	116.8
C(27)-C(28)-C(29)	119.9(19)	C(41)-C(40)-H(40A)	116.8
C(27)-C(28)-H(28A)	120.0	C(40)-C(41)-C(36)	115(2)
C(29)-C(28)-H(28A)	120.0	C(40)-C(41)-H(41A)	122.3
C(24)-C(29)-C(28)	118(2)	C(36)-C(41)-H(41A)	122.3
C(24)-C(29)-H(29A)	120.9	C(47)-C(42)-C(43)	114.1(19)
C(28)-C(29)-H(29A)	120.9	C(47)-C(42)-B(1)	130(2)
C(31)-C(30)-C(35)	117.2(17)	C(43)-C(42)-B(1)	116.2(19)
C(31)-C(30)-P(1)	120.6(16)	C(42)-C(43)-C(44)	123(2)

C(42)-C(43)-H(43A)	118.7	C(46)-C(47)-H(47A)	118.8
C(44)-C(43)-H(43A)	118.7	Cl(1)-C(48)-Cl(2)	109.6(4)
C(45)-C(44)-C(43)	118(2)	Cl(1)-C(48)-H(48A)	109.7
C(45)-C(44)-H(44A)	120.9	Cl(2)-C(48)-H(48A)	109.7
C(43)-C(44)-H(44A)	120.9	Cl(1)-C(48)-H(48B)	109.7
C(44)-C(45)-C(46)	118(2)	Cl(2)-C(48)-H(48B)	109.7
C(44)-C(45)-H(45A)	120.8	H(48A)-C(48)-H(48B)	108.2
C(46)-C(45)-H(45A)	120.8	Cl(4)-C(49)-Cl(3)	109.4(4)
C(45)-C(46)-C(47)	124(2)	Cl(4)-C(49)-H(49A)	109.8
C(45)-C(46)-H(46A)	118.0	Cl(3)-C(49)-H(49A)	109.8
C(47)-C(46)-H(46A)	118.0	Cl(4)-C(49)-H(49B)	109.8
C(42)-C(47)-C(46)	122(2)	Cl(3)-C(49)-H(49B)	109.8
C(42)-C(47)-H(47A)	118.8	H(49A)-C(49)-H(49B)	108.2

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for so02. 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
Pt(1)	19(1)	27(1)	25(1)	2(1)	-1(1)	0(1)
I(1)	23(1)	37(1)	31(1)	3(1)	0(1)	1(1)
S(1)	25(3)	26(3)	27(2)	4(2)	-5(2)	1(2)
P(1)	18(3)	25(3)	26(3)	3(2)	4(2)	-2(2)
C(1)	30(7)	36(7)	32(6)	2(7)	6(7)	6(6)
B(1)	34(7)	42(7)	29(6)	-1(7)	-4(7)	-3(7)
I(2)	24(1)	43(1)	48(1)	11(1)	5(1)	-3(1)
C(2)	29(6)	29(6)	30(6)	-1(5)	6(6)	2(6)
C(3)	26(7)	26(7)	23(6)	3(6)	-3(6)	-2(6)
C(4)	21(6)	28(6)	23(6)	3(5)	5(5)	-5(5)
C(5)	23(6)	33(6)	27(5)	-1(5)	-2(5)	-5(5)
C(6)	23(7)	35(7)	29(6)	-1(6)	1(6)	-7(6)
C(7)	29(6)	39(6)	33(5)	-3(5)	5(5)	-3(5)
C(8)	33(7)	31(7)	35(6)	-2(6)	8(6)	-7(6)
C(9)	32(6)	31(6)	30(6)	6(6)	10(6)	0(6)
C(13)	27(6)	26(5)	29(5)	2(5)	10(5)	-1(5)
C(12)	21(6)	26(6)	24(5)	4(5)	10(5)	-2(5)
C(11)	31(6)	35(6)	27(6)	6(6)	3(6)	2(5)
C(10)	31(6)	30(6)	23(5)	3(5)	4(6)	0(6)
C(14)	53(12)	32(11)	36(9)	-7(9)	-19(10)	8(10)
C(15)	40(8)	35(8)	33(7)	20(7)	-4(7)	-8(7)
C(16)	34(7)	33(7)	35(7)	10(6)	7(7)	6(6)
C(17)	35(11)	41(11)	32(9)	10(8)	17(9)	12(9)
C(18)	31(11)	46(12)	31(10)	9(9)	-3(9)	-11(9)
C(19)	41(11)	52(11)	44(11)	31(10)	18(11)	26(10)
C(20)	38(8)	57(8)	27(7)	9(7)	1(7)	1(7)
C(21)	69(14)	73(14)	36(10)	21(10)	11(11)	16(12)
C(22)	51(13)	83(15)	26(10)	-6(10)	3(10)	0(12)
C(23)	54(13)	99(15)	27(10)	4(10)	11(11)	-19(12)
C(24)	31(8)	29(8)	33(7)	0(6)	0(7)	8(6)
C(25)	33(8)	31(8)	30(7)	-4(6)	-1(6)	7(7)
C(26)	41(8)	33(8)	35(7)	-8(6)	-9(7)	2(7)
C(27)	42(9)	33(8)	46(8)	-2(7)	-4(7)	6(7)

C(28)	39(8)	35(8)	47(8)	10(6)	-2(7)	7(7)
C(29)	34(8)	34(8)	42(7)	6(6)	-7(7)	2(7)
C(30)	48(9)	35(8)	25(7)	2(6)	4(7)	6(7)
C(31)	54(10)	48(8)	28(7)	-3(7)	3(7)	1(7)
C(32)	59(10)	58(9)	30(7)	0(7)	-2(7)	6(8)
C(33)	58(10)	45(9)	34(7)	-13(7)	-9(7)	5(8)
C(34)	53(10)	37(8)	37(8)	-9(7)	-8(7)	-4(8)
C(35)	45(9)	30(8)	32(7)	-6(6)	-1(7)	-4(7)
C(36)	21(8)	47(8)	28(7)	1(7)	-8(7)	1(7)
C(37)	27(8)	48(8)	34(7)	1(7)	-11(7)	-5(7)
C(38)	31(8)	47(8)	34(7)	12(7)	-3(7)	-9(7)
C(39)	27(8)	58(9)	31(7)	7(7)	-1(7)	-3(8)
C(40)	29(8)	58(9)	34(7)	-10(7)	0(7)	-5(8)
C(41)	23(8)	53(9)	34(7)	-7(7)	-3(7)	7(7)
C(42)	36(6)	35(6)	26(5)	-1(5)	-5(5)	-6(5)
C(43)	42(8)	39(7)	35(7)	0(6)	-12(7)	-6(7)
C(44)	45(9)	41(8)	45(7)	-1(7)	-18(7)	3(7)
C(45)	54(9)	40(9)	45(7)	4(7)	-8(8)	-3(7)
C(46)	45(9)	42(9)	42(7)	5(7)	-2(8)	-5(7)
C(47)	41(8)	45(8)	39(7)	-3(7)	-1(7)	-5(7)
C(48)	63(15)	65(15)	72(15)	9(9)	-3(9)	-2(9)
Cl(1)	190(10)	190(9)	182(9)	5(6)	15(6)	2(6)
Cl(2)	190(10)	190(9)	182(9)	5(6)	15(6)	2(6)
Cl(3)	165(8)	155(7)	138(7)	9(5)	17(5)	3(6)
Cl(4)	165(8)	155(7)	138(7)	9(5)	17(5)	3(6)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for so02.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	2490	3192	6988	39
H(3A)	3558	5944	6112	30
H(6A)	4786	2245	9120	35
H(8A)	3169	1152	8506	39
H(14A)	3951	18	7023	61
H(14B)	3268	-148	6826	61
H(14C)	3481	-908	7378	61
H(15A)	2559	2024	7841	54
H(15B)	2664	276	7877	54
H(15C)	2433	1003	7325	54
H(17A)	2792	7641	6191	54
H(17B)	2128	7447	5947	54
H(17C)	2679	6526	5699	54
H(18A)	1786	3844	6416	54
H(18B)	2055	4212	5831	54
H(18C)	1531	5219	6080	54
H(19A)	2432	6932	7102	69
H(19B)	2038	5464	7179	69
H(19C)	1768	6838	6851	69
H(21A)	3953	-355	10026	89
H(21B)	4497	-13	9620	89
H(21C)	3929	-955	9418	89
H(22A)	3798	2167	10230	80
H(22B)	3680	3389	9775	80
H(22C)	4337	2684	9844	80
H(23A)	2964	659	9884	90
H(23B)	2971	95	9271	90
H(23C)	2827	1791	9402	90
H(25A)	5249	7098	6932	38
H(26A)	5415	9638	6787	44
H(27A)	5052	10743	6044	48
H(28A)	4529	9450	5400	48
H(29A)	4410	6863	5486	44

H(31A)	5582	4955	5387	52
H(32A)	5561	3871	4512	59
H(33A)	4781	2530	4210	55
H(34A)	4012	1966	4779	51
H(35A)	3953	2874	5656	43
H(37A)	5742	768	8790	44
H(38A)	6396	247	9441	45
H(39A)	6773	2153	10014	46
H(40A)	6629	4519	9737	48
H(41A)	6023	5182	9029	44
H(43A)	4419	5262	8215	47
H(44A)	4340	7885	8075	52
H(45A)	5220	9245	7977	55
H(46A)	6109	7997	7847	51
H(47A)	6208	5502	7990	50
H(48A)	8392	10112	8555	80
H(48B)	8170	9918	7942	80
H(49A)	2332	-133	5050	247
H(49B)	2011	975	5466	247

Table 6. Torsion angles [°] for so02.

S(1)-Pt(1)-I(1)-B(1)	-64.0(5)	C(5)-C(6)-C(7)-C(20)	179.1(18)
I(2)-Pt(1)-I(1)-B(1)	124.1(5)	C(6)-C(7)-C(8)-C(13)	1(3)
P(1)-Pt(1)-S(1)-C(11)	-13.6(8)	C(20)-C(7)-C(8)-C(13)	-173.4(19)
I(1)-Pt(1)-S(1)-C(11)	167.8(8)	C(7)-C(8)-C(13)-C(12)	-5(3)
P(1)-Pt(1)-S(1)-C(12)	-123.7(8)	C(7)-C(8)-C(13)-C(9)	177.4(18)
I(1)-Pt(1)-S(1)-C(12)	57.7(8)	C(14)-C(9)-C(13)-C(8)	-107(2)
S(1)-Pt(1)-P(1)-C(30)	-97.6(8)	C(10)-C(9)-C(13)-C(8)	128.8(18)
I(2)-Pt(1)-P(1)-C(30)	74.2(8)	C(15)-C(9)-C(13)-C(8)	13(2)
S(1)-Pt(1)-P(1)-C(4)	15.4(6)	C(14)-C(9)-C(13)-C(12)	76(2)
I(2)-Pt(1)-P(1)-C(4)	-172.8(6)	C(10)-C(9)-C(13)-C(12)	-49(2)
S(1)-Pt(1)-P(1)-C(24)	137.7(7)	C(15)-C(9)-C(13)-C(12)	-165.2(16)
I(2)-Pt(1)-P(1)-C(24)	-50.5(7)	C(8)-C(13)-C(12)-C(5)	3(3)
Pt(1)-I(1)-B(1)-C(42)	-48.3(13)	C(9)-C(13)-C(12)-C(5)	-179.0(17)
Pt(1)-I(1)-B(1)-C(5)	80.7(12)	C(8)-C(13)-C(12)-S(1)	174.5(14)
Pt(1)-I(1)-B(1)-C(36)	-166.3(11)	C(9)-C(13)-C(12)-S(1)	-7(2)
C(10)-C(1)-C(2)-C(3)	10(3)	C(6)-C(5)-C(12)-C(13)	2(3)
C(10)-C(1)-C(2)-C(16)	-174.4(19)	B(1)-C(5)-C(12)-C(13)	-163.2(19)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-8(3)	C(6)-C(5)-C(12)-S(1)	-169.0(14)
C(16)-C(2)-C(3)-C(4)	176.4(16)	B(1)-C(5)-C(12)-S(1)	26(3)
C(2)-C(3)-C(4)-C(11)	0(3)	C(11)-S(1)-C(12)-C(13)	49.9(15)
C(2)-C(3)-C(4)-P(1)	-179.0(13)	Pt(1)-S(1)-C(12)-C(13)	164.5(11)
C(30)-P(1)-C(4)-C(3)	-76.6(16)	C(11)-S(1)-C(12)-C(5)	-138.7(17)
C(24)-P(1)-C(4)-C(3)	34.5(17)	Pt(1)-S(1)-C(12)-C(5)	-24.1(19)
Pt(1)-P(1)-C(4)-C(3)	164.1(13)	C(3)-C(4)-C(11)-C(10)	6(3)
C(30)-P(1)-C(4)-C(11)	104.3(15)	P(1)-C(4)-C(11)-C(10)	-174.6(14)
C(24)-P(1)-C(4)-C(11)	-144.6(14)	C(3)-C(4)-C(11)-S(1)	-174.7(14)
Pt(1)-P(1)-C(4)-C(11)	-15.0(15)	P(1)-C(4)-C(11)-S(1)	4(2)
C(42)-B(1)-C(5)-C(6)	-109(2)	C(12)-S(1)-C(11)-C(4)	136.7(17)
C(36)-B(1)-C(5)-C(6)	37(2)	Pt(1)-S(1)-C(11)-C(4)	8.4(18)
I(1)-B(1)-C(5)-C(6)	134.5(14)	C(12)-S(1)-C(11)-C(10)	-44.2(17)
C(42)-B(1)-C(5)-C(12)	56(3)	Pt(1)-S(1)-C(11)-C(10)	-172.6(14)
C(36)-B(1)-C(5)-C(12)	-157.2(18)	C(2)-C(1)-C(10)-C(11)	-4(3)
I(1)-B(1)-C(5)-C(12)	-60(2)	C(2)-C(1)-C(10)-C(9)	177.1(18)
C(12)-C(5)-C(6)-C(7)	-5(3)	C(4)-C(11)-C(10)-C(1)	-5(3)
B(1)-C(5)-C(6)-C(7)	161.8(18)	S(1)-C(11)-C(10)-C(1)	176.3(16)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	4(3)	C(4)-C(11)-C(10)-C(9)	174.8(16)

S(1)-C(11)-C(10)-C(9)	-4(2)	Pt(1)-P(1)-C(30)-C(31)	-77.4(17)
C(13)-C(9)-C(10)-C(1)	-126(2)	C(4)-P(1)-C(30)-C(35)	-8.0(18)
C(14)-C(9)-C(10)-C(1)	108(2)	C(24)-P(1)-C(30)-C(35)	-121.4(17)
C(15)-C(9)-C(10)-C(1)	-7(3)	Pt(1)-P(1)-C(30)-C(35)	106.2(16)
C(13)-C(9)-C(10)-C(11)	55(2)	C(35)-C(30)-C(31)-C(32)	-3(3)
C(14)-C(9)-C(10)-C(11)	-71(2)	P(1)-C(30)-C(31)-C(32)	-179.1(15)
C(15)-C(9)-C(10)-C(11)	173.8(15)	C(30)-C(31)-C(32)-C(33)	3(3)
C(1)-C(2)-C(16)-C(19)	64(2)	C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	-3(4)
C(3)-C(2)-C(16)-C(19)	-120.4(18)	C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	2(4)
C(1)-C(2)-C(16)-C(17)	-173.2(18)	C(33)-C(34)-C(35)-C(30)	-2(3)
C(3)-C(2)-C(16)-C(17)	2(3)	C(31)-C(30)-C(35)-C(34)	2(3)
C(1)-C(2)-C(16)-C(18)	-53(2)	P(1)-C(30)-C(35)-C(34)	178.4(15)
C(3)-C(2)-C(16)-C(18)	122.0(17)	C(42)-B(1)-C(36)-C(37)	-170(2)
C(8)-C(7)-C(20)-C(22)	-136(2)	C(5)-B(1)-C(36)-C(37)	41(3)
C(6)-C(7)-C(20)-C(22)	50(2)	I(1)-B(1)-C(36)-C(37)	-63(2)
C(8)-C(7)-C(20)-C(21)	104(2)	C(42)-B(1)-C(36)-C(41)	11(3)
C(6)-C(7)-C(20)-C(21)	-71(2)	C(5)-B(1)-C(36)-C(41)	-137.7(18)
C(8)-C(7)-C(20)-C(23)	-11(3)	I(1)-B(1)-C(36)-C(41)	118.5(15)
C(6)-C(7)-C(20)-C(23)	174.5(18)	C(41)-C(36)-C(37)-C(38)	-2(3)
C(30)-P(1)-C(24)-C(29)	29(2)	B(1)-C(36)-C(37)-C(38)	179.7(18)
C(4)-P(1)-C(24)-C(29)	-80.9(18)	C(36)-C(37)-C(38)-C(39)	6(3)
Pt(1)-P(1)-C(24)-C(29)	157.8(15)	C(37)-C(38)-C(39)-C(40)	-8(3)
C(30)-P(1)-C(24)-C(25)	-148.9(15)	C(38)-C(39)-C(40)-C(41)	5(3)
C(4)-P(1)-C(24)-C(25)	100.8(15)	B(1)-C(36)-C(41)-C(40)	177.7(17)
Pt(1)-P(1)-C(24)-C(25)	-20.4(17)	C(5)-B(1)-C(42)-C(47)	-164.2(19)
C(29)-C(24)-C(25)-C(26)	-3(3)	C(36)-B(1)-C(42)-C(47)	50(3)
P(1)-C(24)-C(25)-C(26)	175.6(14)	I(1)-B(1)-C(42)-C(47)	-49(2)
C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	3(3)	C(5)-B(1)-C(42)-C(43)	21(3)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	-1(3)	C(36)-B(1)-C(42)-C(43)	-124.4(19)
C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	-2(3)	I(1)-B(1)-C(42)-C(43)	136.0(14)
C(25)-C(24)-C(29)-C(28)	0(3)	C(47)-C(42)-C(43)-C(44)	-4(3)
P(1)-C(24)-C(29)-C(28)	-178.0(15)	B(1)-C(42)-C(43)-C(44)	171.9(17)
C(27)-C(28)-C(29)-C(24)	2(3)	B(1)-C(42)-C(47)-C(46)	-171.6(19)
C(4)-P(1)-C(30)-C(31)	168.4(16)	C(45)-C(46)-C(47)-C(42)	2(3)
C(24)-P(1)-C(30)-C(31)	55.0(18)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

(6) Numbered ORTEP and Crystallographic Data for $2\mathbf{H} \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$ (de060m)

- Lattice solvent and hydrogen atoms are omitted for clarity.
- 50% probability ellipsoids.

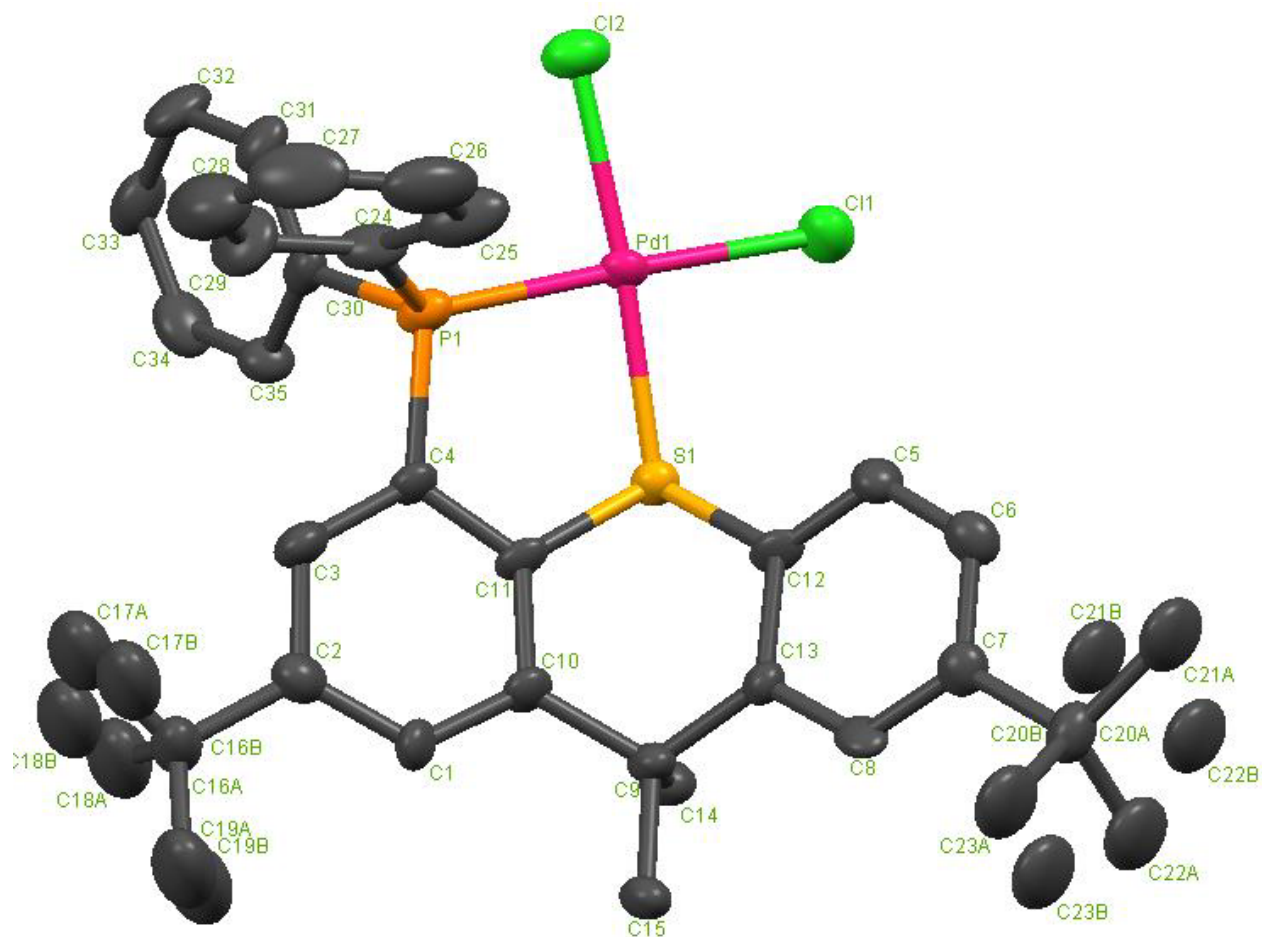


Table 1. Crystal data and structure refinement for de060m.

Identification code	de060m	
Empirical formula	C37 H43 Cl6 P Pd S	
Formula weight	869.84	
Temperature	173(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 12.1463(18) Å	$\alpha = 76.402(10)^\circ$.
	b = 12.547(2) Å	$\beta = 74.583(10)^\circ$.
	c = 13.883(2) Å	$\gamma = 81.960(10)^\circ$.
Volume	1975.7(5) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.460 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.994 mm ⁻¹	
F(000)	885	
Crystal size	0.30 x 0.30 x 0.15 mm ³	
Theta range for data collection	1.56 to 24.75°.	
Index ranges	-14 ≤ h ≤ 14, -14 ≤ k ≤ 14, -15 ≤ l ≤ 16	
Reflections collected	13584	
Independent reflections	6736 [R(int) = 0.1027]	
Completeness to theta = 24.75°	99.4 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.861 and 0.603	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	6736 / 12 / 412	
Goodness-of-fit on F ²	1.044	
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0877, wR2 = 0.1715	
R indices (all data)	R1 = 0.1966, wR2 = 0.2091	
Extinction coefficient	0.0028(7)	
Largest diff. peak and hole	0.664 and -0.987 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for de060m. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Pd(1)	6068(1)	3832(1)	1711(1)	25(1)
S(1)	4316(2)	4532(2)	1480(2)	28(1)
P(1)	6330(2)	5469(3)	1918(2)	29(1)
Cl(2)	7898(2)	3250(3)	1909(2)	44(1)
C(1)	2816(8)	7388(9)	2171(8)	30(3)
Cl(1)	5818(2)	2214(3)	1220(3)	46(1)
C(2)	3726(9)	7958(9)	2197(9)	35(3)
C(3)	4813(8)	7373(10)	2118(9)	34(3)
Cl(3)	5403(5)	1897(6)	4351(5)	156(3)
C(4)	4984(7)	6291(9)	1941(8)	24(3)
Cl(4)	6751(6)	-178(6)	4289(6)	205(4)
C(5)	3210(8)	2831(9)	2899(8)	29(3)
Cl(5)	8080(7)	-589(7)	740(7)	203(4)
C(6)	2250(8)	2349(10)	3570(8)	33(3)
Cl(6)	9337(6)	1(7)	1959(6)	180(3)
C(7)	1197(8)	2976(10)	3710(9)	31(3)
C(8)	1127(8)	4038(9)	3188(8)	29(3)
C(9)	1960(8)	5739(9)	1929(9)	31(3)
C(10)	2944(8)	6341(9)	1972(8)	28(3)
C(11)	4047(7)	5823(9)	1857(8)	24(3)
C(12)	3121(7)	3890(9)	2377(8)	24(3)
C(13)	2066(7)	4550(9)	2521(8)	23(3)
C(14)	2059(8)	5755(9)	796(9)	35(3)
C(15)	781(8)	6350(9)	2349(9)	34(3)
C(16A)	3579(9)	9146(10)	2267(11)	45(4)
C(17A)	4530(30)	9430(30)	2700(30)	90(5)
C(18A)	3960(30)	9670(30)	1173(18)	90(5)
C(19A)	2423(17)	9600(30)	2780(30)	90(5)
C(16B)	3579(9)	9146(10)	2267(11)	45(4)
C(17B)	3990(30)	9180(20)	3230(20)	90(5)
C(18B)	4370(20)	9850(20)	1450(20)	90(5)
C(19B)	2345(14)	9570(20)	2390(30)	90(5)
C(20A)	136(9)	2420(10)	4410(9)	36(3)

C(21A)	430(60)	1250(30)	5000(60)	62(3)
C(22A)	-720(50)	2410(70)	3800(50)	62(3)
C(23A)	-410(70)	3170(60)	5160(50)	62(3)
C(20B)	136(9)	2420(10)	4410(9)	36(3)
C(21B)	376(11)	1889(14)	5469(12)	62(3)
C(22B)	-174(12)	1549(13)	3958(13)	62(3)
C(23B)	-941(11)	3223(12)	4595(14)	62(3)
C(24)	6702(9)	5537(11)	3082(9)	37(3)
C(25)	6402(9)	4692(13)	3930(11)	55(4)
C(26)	6513(11)	4771(15)	4883(11)	66(5)
C(27)	7013(12)	5693(16)	4921(12)	64(5)
C(28)	7278(12)	6514(15)	4122(15)	74(5)
C(29)	7143(10)	6446(12)	3177(11)	50(4)
C(30)	7351(8)	6210(9)	863(9)	30(3)
C(31)	8514(8)	5997(10)	815(9)	32(3)
C(32)	9289(9)	6506(11)	-35(10)	43(3)
C(33)	8914(9)	7218(10)	-839(10)	41(3)
C(34)	7766(10)	7409(10)	-767(9)	42(3)
C(35)	6973(9)	6920(9)	62(9)	30(3)
C(37)	8526(16)	471(15)	1082(17)	123(8)
C(36)	6474(18)	1054(16)	3697(18)	142(9)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for de060m.

Pd(1)-P(1)	2.216(3)	C(14)-H(14C)	0.9800
Pd(1)-S(1)	2.260(3)	C(14)-H(14B)	0.9800
Pd(1)-Cl(2)	2.308(3)	C(14)-H(14A)	0.9800
Pd(1)-Cl(1)	2.369(3)	C(15)-H(15C)	0.9800
S(1)-C(11)	1.779(11)	C(15)-H(15B)	0.9800
S(1)-C(12)	1.789(10)	C(15)-H(15A)	0.9800
P(1)-C(4)	1.803(9)	C(16A)-C(18A)	1.48(2)
P(1)-C(30)	1.808(11)	C(16A)-C(19A)	1.495(17)
P(1)-C(24)	1.813(12)	C(16A)-C(17A)	1.56(2)
C(1)-C(10)	1.384(14)	C(17A)-H(17A)	0.9800
C(1)-C(2)	1.410(14)	C(17A)-H(17B)	0.9800
C(1)-H(1A)	0.9500	C(17A)-H(17C)	0.9800
C(2)-C(3)	1.409(14)	C(18A)-H(18A)	0.9800
C(2)-C(16A)	1.499(15)	C(18A)-H(18B)	0.9800
C(3)-C(4)	1.414(14)	C(18A)-H(18C)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9500	C(19A)-H(19A)	0.9800
Cl(3)-C(36)	1.75(2)	C(19A)-H(19B)	0.9800
C(4)-C(11)	1.394(13)	C(19A)-H(19C)	0.9800
Cl(4)-C(36)	1.606(18)	C(17B)-H(17D)	0.9800
C(5)-C(12)	1.360(14)	C(17B)-H(17E)	0.9800
C(5)-C(6)	1.396(14)	C(17B)-H(17F)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9500	C(18B)-H(18D)	0.9800
Cl(5)-C(37)	1.710(17)	C(18B)-H(18E)	0.9800
C(6)-C(7)	1.398(14)	C(18B)-H(18F)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9500	C(19B)-H(19D)	0.9800
Cl(6)-C(37)	1.714(18)	C(19B)-H(19E)	0.9800
C(7)-C(8)	1.362(14)	C(19B)-H(19F)	0.9800
C(7)-C(20A)	1.535(14)	C(20A)-C(22A)	1.51(3)
C(8)-C(13)	1.390(14)	C(20A)-C(23A)	1.53(2)
C(8)-H(8A)	0.9500	C(20A)-C(21A)	1.54(3)
C(9)-C(10)	1.521(14)	C(21A)-H(21A)	0.9800
C(9)-C(13)	1.531(14)	C(21A)-H(21B)	0.9800
C(9)-C(14)	1.540(15)	C(21A)-H(21C)	0.9800
C(9)-C(15)	1.561(13)	C(22A)-H(22A)	0.9800
C(10)-C(11)	1.392(13)	C(22A)-H(22B)	0.9800
C(12)-C(13)	1.419(13)	C(22A)-H(22C)	0.9800

C(23A)-H(23A)	0.9800		
C(23A)-H(23B)	0.9800	P(1)-Pd(1)-S(1)	87.98(11)
C(23A)-H(23C)	0.9800	P(1)-Pd(1)-Cl(2)	88.10(11)
C(21B)-H(21D)	0.9800	S(1)-Pd(1)-Cl(2)	175.72(13)
C(21B)-H(21E)	0.9800	P(1)-Pd(1)-Cl(1)	171.14(13)
C(21B)-H(21F)	0.9800	S(1)-Pd(1)-Cl(1)	89.19(11)
C(22B)-H(22D)	0.9800	Cl(2)-Pd(1)-Cl(1)	94.44(11)
C(22B)-H(22E)	0.9800	C(11)-S(1)-C(12)	97.3(5)
C(22B)-H(22F)	0.9800	C(11)-S(1)-Pd(1)	106.5(3)
C(23B)-H(23D)	0.9800	C(12)-S(1)-Pd(1)	116.2(4)
C(23B)-H(23E)	0.9800	C(4)-P(1)-C(30)	105.1(5)
C(23B)-H(23F)	0.9800	C(4)-P(1)-C(24)	105.3(5)
C(24)-C(29)	1.372(16)	C(30)-P(1)-C(24)	107.3(6)
C(24)-C(25)	1.392(17)	C(4)-P(1)-Pd(1)	106.7(3)
C(25)-C(26)	1.391(18)	C(30)-P(1)-Pd(1)	113.6(4)
C(25)-H(25A)	0.9500	C(24)-P(1)-Pd(1)	117.8(5)
C(26)-C(27)	1.40(2)	C(10)-C(1)-C(2)	124.4(10)
C(26)-H(26A)	0.9500	C(10)-C(1)-H(1A)	117.8
C(27)-C(28)	1.33(2)	C(2)-C(1)-H(1A)	117.8
C(27)-H(27A)	0.9500	C(3)-C(2)-C(1)	117.1(11)
C(28)-C(29)	1.388(19)	C(3)-C(2)-C(16A)	120.2(10)
C(28)-H(28A)	0.9500	C(1)-C(2)-C(16A)	122.7(10)
C(29)-H(29A)	0.9500	C(2)-C(3)-C(4)	120.5(10)
C(30)-C(31)	1.388(13)	C(2)-C(3)-H(3A)	119.7
C(30)-C(35)	1.390(14)	C(4)-C(3)-H(3A)	119.7
C(31)-C(32)	1.381(15)	C(11)-C(4)-C(3)	118.1(9)
C(31)-H(31A)	0.9500	C(11)-C(4)-P(1)	119.3(8)
C(32)-C(33)	1.392(16)	C(3)-C(4)-P(1)	122.5(7)
C(32)-H(32A)	0.9500	C(12)-C(5)-C(6)	120.7(10)
C(33)-C(34)	1.362(15)	C(12)-C(5)-H(5A)	119.7
C(33)-H(33A)	0.9500	C(6)-C(5)-H(5A)	119.7
C(34)-C(35)	1.368(15)	C(5)-C(6)-C(7)	118.9(11)
C(34)-H(34A)	0.9500	C(5)-C(6)-H(6A)	120.5
C(35)-H(35A)	0.9500	C(7)-C(6)-H(6A)	120.5
C(37)-H(37B)	0.9900	C(8)-C(7)-C(6)	119.5(10)
C(37)-H(37A)	0.9900	C(8)-C(7)-C(20A)	122.0(10)
C(36)-H(36B)	0.9900	C(6)-C(7)-C(20A)	118.5(10)
C(36)-H(36A)	0.9900	C(7)-C(8)-C(13)	123.2(10)

C(7)-C(8)-H(8A)	118.4	C(16A)-C(17A)-H(17A)	109.5
C(13)-C(8)-H(8A)	118.4	C(16A)-C(17A)-H(17B)	109.5
C(10)-C(9)-C(13)	109.3(8)	H(17A)-C(17A)-H(17B)	109.5
C(10)-C(9)-C(14)	107.3(9)	C(16A)-C(17A)-H(17C)	109.5
C(13)-C(9)-C(14)	109.9(9)	H(17A)-C(17A)-H(17C)	109.5
C(10)-C(9)-C(15)	110.8(9)	H(17B)-C(17A)-H(17C)	109.5
C(13)-C(9)-C(15)	111.7(9)	C(16A)-C(18A)-H(18A)	109.5
C(14)-C(9)-C(15)	107.7(8)	C(16A)-C(18A)-H(18B)	109.4
C(1)-C(10)-C(11)	115.6(9)	H(18A)-C(18A)-H(18B)	109.5
C(1)-C(10)-C(9)	124.0(9)	C(16A)-C(18A)-H(18C)	109.5
C(11)-C(10)-C(9)	120.3(10)	H(18A)-C(18A)-H(18C)	109.5
C(10)-C(11)-C(4)	124.0(10)	H(18B)-C(18A)-H(18C)	109.5
C(10)-C(11)-S(1)	118.5(8)	C(16A)-C(19A)-H(19A)	109.5
C(4)-C(11)-S(1)	117.3(7)	C(16A)-C(19A)-H(19B)	109.5
C(5)-C(12)-C(13)	121.4(9)	H(19A)-C(19A)-H(19B)	109.5
C(5)-C(12)-S(1)	122.3(7)	C(16A)-C(19A)-H(19C)	109.5
C(13)-C(12)-S(1)	116.3(8)	H(19A)-C(19A)-H(19C)	109.5
C(8)-C(13)-C(12)	116.2(10)	H(19B)-C(19A)-H(19C)	109.5
C(8)-C(13)-C(9)	122.1(9)	H(17D)-C(17B)-H(17E)	109.5
C(12)-C(13)-C(9)	121.5(9)	H(17D)-C(17B)-H(17F)	109.5
C(9)-C(14)-H(14C)	109.5	H(17E)-C(17B)-H(17F)	109.5
C(9)-C(14)-H(14B)	109.5	H(18D)-C(18B)-H(18E)	109.5
H(14C)-C(14)-H(14B)	109.5	H(18D)-C(18B)-H(18F)	109.5
C(9)-C(14)-H(14A)	109.5	H(18E)-C(18B)-H(18F)	109.5
H(14C)-C(14)-H(14A)	109.5	H(19D)-C(19B)-H(19E)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14A)	109.5	H(19D)-C(19B)-H(19F)	109.5
C(9)-C(15)-H(15C)	109.5	H(19E)-C(19B)-H(19F)	109.5
C(9)-C(15)-H(15B)	109.5	C(22A)-C(20A)-C(23A)	107(3)
H(15C)-C(15)-H(15B)	109.5	C(22A)-C(20A)-C(7)	110(3)
C(9)-C(15)-H(15A)	109.5	C(23A)-C(20A)-C(7)	105(3)
H(15C)-C(15)-H(15A)	109.5	C(22A)-C(20A)-C(21A)	111(3)
H(15B)-C(15)-H(15A)	109.5	C(23A)-C(20A)-C(21A)	110(3)
C(18A)-C(16A)-C(19A)	113.6(15)	C(7)-C(20A)-C(21A)	113(3)
C(18A)-C(16A)-C(2)	100.2(18)	C(20A)-C(21A)-H(21A)	109.5
C(19A)-C(16A)-C(2)	117.9(17)	C(20A)-C(21A)-H(21B)	109.5
C(18A)-C(16A)-C(17A)	101.2(15)	H(21A)-C(21A)-H(21B)	109.5
C(19A)-C(16A)-C(17A)	111.0(16)	C(20A)-C(21A)-H(21C)	109.5
C(2)-C(16A)-C(17A)	111.2(14)	H(21A)-C(21A)-H(21C)	109.5

H(21B)-C(21A)-H(21C)	109.5	C(27)-C(28)-H(28A)	119.9
C(20A)-C(22A)-H(22A)	109.5	C(29)-C(28)-H(28A)	119.9
C(20A)-C(22A)-H(22B)	109.5	C(24)-C(29)-C(28)	119.5(14)
H(22A)-C(22A)-H(22B)	109.5	C(24)-C(29)-H(29A)	120.3
C(20A)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(28)-C(29)-H(29A)	120.3
H(22A)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(31)-C(30)-C(35)	120.3(10)
H(22B)-C(22A)-H(22C)	109.5	C(31)-C(30)-P(1)	119.7(9)
C(20A)-C(23A)-H(23A)	109.5	C(35)-C(30)-P(1)	119.7(8)
C(20A)-C(23A)-H(23B)	109.5	C(32)-C(31)-C(30)	119.1(11)
H(23A)-C(23A)-H(23B)	109.5	C(32)-C(31)-H(31A)	120.5
C(20A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(30)-C(31)-H(31A)	120.4
H(23A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(31)-C(32)-C(33)	120.8(10)
H(23B)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(31)-C(32)-H(32A)	119.6
H(21D)-C(21B)-H(21E)	109.5	C(33)-C(32)-H(32A)	119.6
H(21D)-C(21B)-H(21F)	109.5	C(34)-C(33)-C(32)	118.5(11)
H(21E)-C(21B)-H(21F)	109.5	C(34)-C(33)-H(33A)	120.7
H(22D)-C(22B)-H(22E)	109.5	C(32)-C(33)-H(33A)	120.7
H(22D)-C(22B)-H(22F)	109.5	C(33)-C(34)-C(35)	122.4(12)
H(22E)-C(22B)-H(22F)	109.5	C(33)-C(34)-H(34A)	118.8
H(23D)-C(23B)-H(23E)	109.5	C(35)-C(34)-H(34A)	118.8
H(23D)-C(23B)-H(23F)	109.5	C(34)-C(35)-C(30)	118.8(10)
H(23E)-C(23B)-H(23F)	109.5	C(34)-C(35)-H(35A)	120.6
C(29)-C(24)-C(25)	119.8(12)	C(30)-C(35)-H(35A)	120.6
C(29)-C(24)-P(1)	121.9(11)	Cl(5)-C(37)-Cl(6)	111.7(11)
C(25)-C(24)-P(1)	117.9(10)	Cl(5)-C(37)-H(37B)	109.3
C(26)-C(25)-C(24)	120.7(15)	Cl(6)-C(37)-H(37B)	109.3
C(26)-C(25)-H(25A)	119.6	Cl(5)-C(37)-H(37A)	109.3
C(24)-C(25)-H(25A)	119.6	Cl(6)-C(37)-H(37A)	109.3
C(25)-C(26)-C(27)	116.7(15)	H(37B)-C(37)-H(37A)	107.9
C(25)-C(26)-H(26A)	121.7	Cl(4)-C(36)-Cl(3)	118.0(14)
C(27)-C(26)-H(26A)	121.7	Cl(4)-C(36)-H(36B)	107.8
C(28)-C(27)-C(26)	122.7(15)	Cl(3)-C(36)-H(36B)	107.8
C(28)-C(27)-H(27A)	118.6	Cl(4)-C(36)-H(36A)	107.8
C(26)-C(27)-H(27A)	118.6	Cl(3)-C(36)-H(36A)	107.8
C(27)-C(28)-C(29)	120.3(16)	H(36B)-C(36)-H(36A)	107.1

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for de060m. 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)	18(1)	28(1)	26(1)	-9(1)	0(1)	2(1)
S(1)	22(1)	30(2)	31(2)	-11(2)	-2(1)	-1(1)
P(1)	20(1)	40(2)	29(2)	-13(2)	-5(1)	1(1)
Cl(2)	28(1)	55(2)	44(2)	-8(2)	-8(2)	3(2)
C(1)	25(5)	25(7)	37(8)	-2(6)	-2(5)	-10(5)
Cl(1)	35(2)	39(2)	62(2)	-22(2)	-1(2)	0(1)
C(2)	33(6)	30(7)	36(8)	-4(6)	-5(6)	2(5)
C(3)	20(5)	41(8)	41(8)	-8(7)	-7(5)	-4(5)
Cl(3)	124(4)	166(6)	149(6)	31(5)	-48(4)	5(4)
C(4)	15(5)	32(7)	24(7)	-8(6)	1(5)	-3(5)
Cl(4)	155(6)	190(8)	187(8)	60(6)	-24(5)	53(5)
C(5)	28(6)	30(7)	29(7)	-2(6)	-10(5)	0(5)
Cl(5)	194(7)	216(9)	266(10)	-158(8)	-101(7)	30(6)
C(6)	38(6)	31(7)	27(7)	-9(6)	-4(6)	1(5)
Cl(6)	159(6)	225(8)	185(8)	-65(6)	-101(6)	42(5)
C(7)	31(6)	34(8)	26(7)	-11(6)	-1(5)	-4(5)
C(8)	32(6)	31(7)	34(8)	-7(6)	-24(6)	4(5)
C(9)	21(5)	29(7)	46(8)	-12(6)	-12(5)	2(5)
C(10)	17(5)	33(7)	28(7)	-7(6)	3(5)	-4(5)
C(11)	13(5)	39(7)	18(6)	-9(6)	2(4)	-3(5)
C(12)	17(5)	37(7)	18(7)	-18(6)	2(5)	2(5)
C(13)	19(5)	26(7)	25(7)	-7(6)	-4(5)	-5(5)
C(14)	30(6)	34(7)	40(8)	-9(6)	-12(6)	4(5)
C(15)	28(5)	28(7)	49(9)	-14(7)	-14(6)	5(5)
C(16A)	31(6)	33(8)	66(10)	-18(8)	1(6)	-3(6)
C(17A)	64(8)	49(8)	148(16)	-38(10)	2(8)	-4(6)
C(18A)	64(8)	49(8)	148(16)	-38(10)	2(8)	-4(6)
C(19A)	64(8)	49(8)	148(16)	-38(10)	2(8)	-4(6)
C(16B)	31(6)	33(8)	66(10)	-18(8)	1(6)	-3(6)
C(17B)	64(8)	49(8)	148(16)	-38(10)	2(8)	-4(6)
C(18B)	64(8)	49(8)	148(16)	-38(10)	2(8)	-4(6)
C(19B)	64(8)	49(8)	148(16)	-38(10)	2(8)	-4(6)
C(20A)	34(6)	41(8)	34(8)	-9(7)	-2(6)	-13(6)

C(21A)	37(5)	63(7)	73(8)	-7(6)	14(5)	-22(5)
C(22A)	37(5)	63(7)	73(8)	-7(6)	14(5)	-22(5)
C(23A)	37(5)	63(7)	73(8)	-7(6)	14(5)	-22(5)
C(20B)	34(6)	41(8)	34(8)	-9(7)	-2(6)	-13(6)
C(21B)	37(5)	63(7)	73(8)	-7(6)	14(5)	-22(5)
C(22B)	37(5)	63(7)	73(8)	-7(6)	14(5)	-22(5)
C(23B)	37(5)	63(7)	73(8)	-7(6)	14(5)	-22(5)
C(24)	33(6)	56(9)	27(8)	-19(7)	-15(6)	11(6)
C(25)	37(7)	98(13)	35(9)	-30(9)	-10(7)	7(7)
C(26)	38(7)	98(14)	42(10)	-2(10)	1(7)	13(8)
C(27)	62(9)	108(15)	32(10)	-36(10)	-21(8)	21(10)
C(28)	59(9)	85(14)	90(15)	-32(12)	-32(10)	6(9)
C(29)	55(8)	65(10)	45(10)	-22(8)	-24(7)	-11(7)
C(30)	24(5)	29(7)	40(8)	-16(6)	-2(5)	-6(5)
C(31)	28(5)	46(8)	26(7)	-14(6)	-5(5)	-12(6)
C(32)	24(6)	67(10)	40(9)	-6(8)	-13(6)	-10(6)
C(33)	31(6)	57(9)	36(8)	-21(7)	8(6)	-18(6)
C(34)	63(8)	36(8)	29(8)	1(7)	-18(7)	-4(7)
C(35)	29(6)	34(7)	25(7)	-4(6)	-9(6)	2(5)
C(37)	131(16)	87(15)	190(20)	-85(16)	-86(16)	49(12)
C(36)	128(17)	114(19)	150(20)	26(17)	-36(16)	28(14)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for de060m.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	2065	7746	2298	36
H(3A)	5436	7709	2184	41
H(5A)	3933	2416	2806	35
H(6A)	2313	1606	3926	39
H(8A)	402	4449	3283	35
H(14C)	2793	5376	511	52
H(14B)	2016	6518	418	52
H(14A)	1430	5380	739	52
H(15C)	742	7104	1949	51
H(15B)	702	6367	3066	51
H(15A)	161	5962	2295	51
H(17A)	4419	10215	2732	134
H(17B)	5284	9283	2255	134
H(17C)	4492	8986	3388	134
H(18A)	3912	10468	1099	134
H(18B)	3456	9486	794	134
H(18C)	4747	9395	902	134
H(19A)	2445	10375	2774	134
H(19B)	2207	9188	3489	134
H(19C)	1858	9519	2418	134
H(17D)	3921	9945	3311	134
H(17E)	4792	8885	3146	134
H(17F)	3516	8739	3835	134
H(18D)	4228	10607	1545	134
H(18E)	4258	9818	784	134
H(18F)	5166	9579	1474	134
H(19D)	2261	10347	2429	134
H(19E)	1884	9147	3016	134
H(19F)	2083	9493	1801	134
H(21A)	-282	935	5421	93
H(21B)	931	1287	5430	93
H(21C)	814	785	4507	93

H(22A)	-1401	2065	4250	93
H(22B)	-377	2000	3259	93
H(22C)	-947	3171	3489	93
H(23A)	-1097	2862	5631	93
H(23B)	-626	3902	4775	93
H(23C)	137	3243	5539	93
H(21D)	-300	1534	5917	93
H(21E)	547	2460	5771	93
H(21F)	1032	1339	5388	93
H(22D)	-851	1208	4420	93
H(22E)	470	986	3867	93
H(22F)	-340	1889	3295	93
H(23D)	-1583	2822	5053	93
H(23E)	-1134	3563	3942	93
H(23F)	-794	3796	4907	93
H(25A)	6119	4054	3858	66
H(26A)	6260	4225	5477	79
H(27A)	7171	5734	5546	77
H(28A)	7561	7151	4196	89
H(29A)	7353	7024	2600	60
H(31A)	8775	5507	1359	38
H(32A)	10086	6368	-71	51
H(33A)	9448	7563	-1426	49
H(34A)	7507	7900	-1311	51
H(35A)	6177	7063	89	36
H(37B)	7848	934	1375	147
H(37A)	8982	934	467	147
H(36B)	6257	1005	3071	171
H(36A)	7192	1428	3477	171

Table 6. Torsion angles [°] for de060m.

P(1)-Pd(1)-S(1)-C(11)	-12.0(4)	C(9)-C(10)-C(11)-C(4)	-176.4(10)
Cl(1)-Pd(1)-S(1)-C(11)	176.4(4)	C(1)-C(10)-C(11)-S(1)	-174.1(8)
P(1)-Pd(1)-S(1)-C(12)	-119.1(4)	C(9)-C(10)-C(11)-S(1)	8.7(14)
Cl(1)-Pd(1)-S(1)-C(12)	69.3(4)	C(3)-C(4)-C(11)-C(10)	-2.4(16)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(4)	6.9(4)	P(1)-C(4)-C(11)-C(10)	172.9(8)
Cl(2)-Pd(1)-P(1)-C(4)	-174.9(4)	C(3)-C(4)-C(11)-S(1)	172.5(8)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(30)	-108.5(4)	P(1)-C(4)-C(11)-S(1)	-12.1(12)
Cl(2)-Pd(1)-P(1)-C(30)	69.8(4)	C(12)-S(1)-C(11)-C(10)	-48.1(9)
S(1)-Pd(1)-P(1)-C(24)	124.8(4)	Pd(1)-S(1)-C(11)-C(10)	-168.3(8)
Cl(2)-Pd(1)-P(1)-C(24)	-56.9(4)	C(12)-S(1)-C(11)-C(4)	136.7(8)
C(10)-C(1)-C(2)-C(3)	-6.7(17)	Pd(1)-S(1)-C(11)-C(4)	16.6(9)
C(10)-C(1)-C(2)-C(16A)	171.1(11)	C(6)-C(5)-C(12)-C(13)	2.2(17)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	4.7(16)	C(6)-C(5)-C(12)-S(1)	-178.1(8)
C(16A)-C(2)-C(3)-C(4)	-173.1(11)	C(11)-S(1)-C(12)-C(5)	-137.4(9)
C(2)-C(3)-C(4)-C(11)	-0.5(16)	Pd(1)-S(1)-C(12)-C(5)	-24.9(11)
C(2)-C(3)-C(4)-P(1)	-175.7(8)	C(11)-S(1)-C(12)-C(13)	42.3(8)
C(30)-P(1)-C(4)-C(11)	122.3(9)	Pd(1)-S(1)-C(12)-C(13)	154.8(7)
C(24)-P(1)-C(4)-C(11)	-124.6(9)	C(7)-C(8)-C(13)-C(12)	2.1(16)
Pd(1)-P(1)-C(4)-C(11)	1.3(9)	C(7)-C(8)-C(13)-C(9)	178.9(10)
C(30)-P(1)-C(4)-C(3)	-62.6(10)	C(5)-C(12)-C(13)-C(8)	-2.7(15)
C(24)-P(1)-C(4)-C(3)	50.5(11)	S(1)-C(12)-C(13)-C(8)	177.6(8)
Pd(1)-P(1)-C(4)-C(3)	176.4(8)	C(5)-C(12)-C(13)-C(9)	-179.5(10)
C(12)-C(5)-C(6)-C(7)	-1.0(16)	S(1)-C(12)-C(13)-C(9)	0.8(13)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	0.3(16)	C(10)-C(9)-C(13)-C(8)	136.0(10)
C(5)-C(6)-C(7)-C(20A)	177.1(10)	C(14)-C(9)-C(13)-C(8)	-106.5(11)
C(6)-C(7)-C(8)-C(13)	-1.0(17)	C(15)-C(9)-C(13)-C(8)	13.0(14)
C(20A)-C(7)-C(8)-C(13)	-177.6(10)	C(10)-C(9)-C(13)-C(12)	-47.4(14)
C(2)-C(1)-C(10)-C(11)	4.0(17)	C(14)-C(9)-C(13)-C(12)	70.1(12)
C(2)-C(1)-C(10)-C(9)	-179.0(11)	C(15)-C(9)-C(13)-C(12)	-170.4(9)
C(13)-C(9)-C(10)-C(1)	-135.0(11)	C(3)-C(2)-C(16A)-C(18A)	82(2)
C(14)-C(9)-C(10)-C(1)	105.8(12)	C(1)-C(2)-C(16A)-C(18A)	-96(2)
C(15)-C(9)-C(10)-C(1)	-11.4(16)	C(3)-C(2)-C(16A)-C(19A)	-154.3(19)
C(13)-C(9)-C(10)-C(11)	41.9(14)	C(1)-C(2)-C(16A)-C(19A)	28(2)
C(14)-C(9)-C(10)-C(11)	-77.3(12)	C(3)-C(2)-C(16A)-C(17A)	-24(2)
C(15)-C(9)-C(10)-C(11)	165.5(10)	C(1)-C(2)-C(16A)-C(17A)	158(2)
C(1)-C(10)-C(11)-C(4)	0.7(16)	C(8)-C(7)-C(20A)-C(22A)	60(4)

C(6)-C(7)-C(20A)-C(22A)	-117(4)	P(1)-C(24)-C(29)-C(28)	171.9(10)
C(8)-C(7)-C(20A)-C(23A)	-54(4)	C(27)-C(28)-C(29)-C(24)	2(2)
C(6)-C(7)-C(20A)-C(23A)	129(4)	C(4)-P(1)-C(30)-C(31)	160.4(9)
C(8)-C(7)-C(20A)-C(21A)	-175(4)	C(24)-P(1)-C(30)-C(31)	48.8(10)
C(6)-C(7)-C(20A)-C(21A)	8(4)	Pd(1)-P(1)-C(30)-C(31)	-83.3(9)
C(4)-P(1)-C(24)-C(29)	-77.1(10)	C(4)-P(1)-C(30)-C(35)	-25.1(10)
C(30)-P(1)-C(24)-C(29)	34.5(11)	C(24)-P(1)-C(30)-C(35)	-136.7(9)
Pd(1)-P(1)-C(24)-C(29)	164.2(8)	Pd(1)-P(1)-C(30)-C(35)	91.2(9)
C(4)-P(1)-C(24)-C(25)	95.4(9)	C(35)-C(30)-C(31)-C(32)	0.5(17)
C(30)-P(1)-C(24)-C(25)	-153.1(9)	P(1)-C(30)-C(31)-C(32)	175.0(9)
Pd(1)-P(1)-C(24)-C(25)	-23.4(10)	C(30)-C(31)-C(32)-C(33)	-0.5(18)
C(29)-C(24)-C(25)-C(26)	1.9(17)	C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	0.5(18)
P(1)-C(24)-C(25)-C(26)	-170.7(9)	C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	-0.6(18)
C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	-4.6(18)	C(33)-C(34)-C(35)-C(30)	0.6(18)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	6(2)	C(31)-C(30)-C(35)-C(34)	-0.6(17)
C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	-5(2)	P(1)-C(30)-C(35)-C(34)	-175.1(9)
C(25)-C(24)-C(29)-C(28)	-0.4(18)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

(7) Numbered ORTEP and Crystallographic Data for $4\mathbf{H} \cdot 1.5\text{CH}_2\text{Cl}_2$ (so04)

- Lattice solvent and hydrogen atoms are omitted for clarity.
- 50% probability ellipsoids.

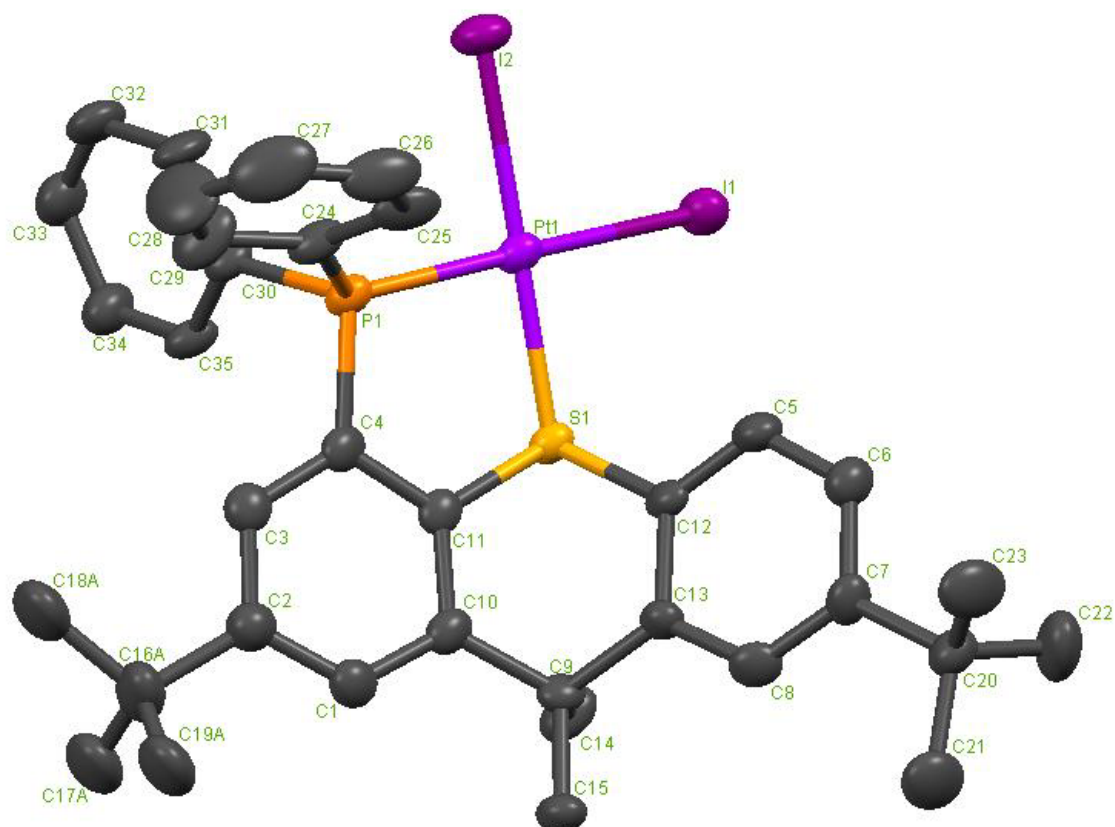


Table 1. Crystal data and structure refinement for so04.

Identification code	so04	
Empirical formula	C36.50 H42 Cl3 I2 P Pt S	
Formula weight	1098.97	
Temperature	173(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 12.451(2) Å	$\alpha = 75.815(2)^\circ$.
	b = 12.803(2) Å	$\beta = 74.648(2)^\circ$.
	c = 13.852(2) Å	$\gamma = 80.524(4)^\circ$.
Volume	2052.7(6) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	1.778 Mg/m ³	
Absorption coefficient	5.230 mm ⁻¹	
F(000)	1054	
Crystal size	0.06 x 0.05 x 0.03 mm ³	
Theta range for data collection	2.02 to 28.35°.	
Index ranges	-12<=h<=16, -13<=k<=17, -17<=l<=18	
Reflections collected	17425	
Independent reflections	9987 [R(int) = 0.0883]	
Completeness to theta = 28.35°	97.3 %	
Absorption correction	Numerical	
Max. and min. transmission	0.8589 and 0.7443	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	9987 / 514 / 391	
Goodness-of-fit on F ²	0.868	
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0673, wR2 = 0.1269	
R indices (all data)	R1 = 0.1518, wR2 = 0.1513	
Largest diff. peak and hole	2.389 and -2.485 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for so04. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Pt(1)	6020(1)	8774(1)	1723(1)	26(1)
I(2)	8000(1)	7979(1)	2024(1)	40(1)
S(1)	4293(2)	9476(2)	1506(2)	26(1)
P(1)	6224(2)	10359(3)	2018(2)	26(1)
C(1)	2779(9)	12286(10)	2199(8)	32(3)
I(1)	5857(1)	7077(1)	1004(1)	37(1)
C(2)	3647(10)	12820(10)	2240(10)	38(3)
C(3)	4711(9)	12246(10)	2173(8)	30(2)
C(4)	4910(9)	11181(10)	2009(8)	28(2)
C(5)	3286(9)	7790(10)	2933(9)	33(3)
C(6)	2351(9)	7317(10)	3606(9)	34(3)
C(7)	1289(9)	7917(10)	3777(8)	30(2)
C(8)	1189(9)	8981(10)	3258(8)	31(2)
C(9)	1968(9)	10670(9)	1963(8)	27(2)
C(10)	2919(9)	11255(10)	2014(8)	29(2)
C(11)	4018(8)	10721(9)	1910(8)	25(2)
C(12)	3162(8)	8845(9)	2399(8)	25(2)
C(13)	2093(8)	9495(9)	2546(8)	27(2)
C(14)	2021(9)	10697(11)	832(9)	39(3)
C(15)	821(8)	11277(10)	2390(9)	32(3)
C(16A)	3488(10)	14034(11)	2267(10)	57(3)
C(17A)	3270(30)	14750(20)	1259(18)	65(3)
C(18A)	4535(19)	14420(30)	2400(30)	65(3)
C(19A)	2530(20)	14210(30)	3190(20)	65(3)
C(16B)	3488(10)	14034(11)	2267(10)	57(3)
C(17B)	4160(20)	14642(18)	1236(16)	65(3)
C(18B)	4000(20)	14221(19)	3087(18)	65(3)
C(19B)	2263(14)	14528(18)	2450(20)	65(3)
C(20)	269(9)	7359(10)	4501(9)	35(3)
C(21)	-807(10)	8169(11)	4653(10)	51(3)
C(22)	22(11)	6472(11)	4079(12)	61(4)
C(23)	502(10)	6904(12)	5568(9)	52(4)
C(24)	6532(9)	10365(11)	3219(9)	32(3)

C(25)	6295(9)	9493(12)	4047(9)	41(3)
C(26)	6462(10)	9541(14)	4987(10)	54(4)
C(27)	6896(12)	10379(16)	5093(12)	69(4)
C(28)	7158(13)	11238(15)	4305(13)	69(4)
C(29)	6963(10)	11248(13)	3346(10)	48(3)
C(30)	7220(8)	11135(10)	996(8)	27(2)
C(31)	8363(9)	10947(11)	981(10)	40(3)
C(32)	9116(9)	11482(11)	161(10)	43(3)
C(33)	8769(10)	12136(11)	-662(10)	43(3)
C(34)	7624(9)	12317(11)	-639(10)	41(3)
C(35)	6868(9)	11813(10)	172(8)	30(3)
C(36A)	8490(30)	5160(20)	1510(60)	199(7)
Cl(1A)	9950(20)	5010(30)	1430(30)	199(4)
Cl(2A)	7952(19)	3890(20)	2060(20)	199(4)
C(36B)	8790(30)	5030(20)	890(30)	199(7)
Cl(1B)	9678(16)	4676(17)	1751(17)	199(4)
Cl(2B)	7919(13)	3986(14)	1136(16)	199(4)

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for so04.

Pt(1)-P(1)	2.232(3)	C(15)-H(15B)	0.9800
Pt(1)-S(1)	2.258(3)	C(15)-H(15C)	0.9800
Pt(1)-I(2)	2.6067(10)	C(16A)-C(19A)	1.533(12)
Pt(1)-I(1)	2.6582(10)	C(16A)-C(18A)	1.535(12)
S(1)-C(12)	1.768(10)	C(16A)-C(17A)	1.535(12)
S(1)-C(11)	1.769(12)	C(17A)-H(17A)	0.9800
P(1)-C(4)	1.795(12)	C(17A)-H(17B)	0.9800
P(1)-C(24)	1.806(11)	C(17A)-H(17C)	0.9800
P(1)-C(30)	1.821(11)	C(18A)-H(18A)	0.9800
C(1)-C(10)	1.381(16)	C(18A)-H(18B)	0.9800
C(1)-C(2)	1.390(15)	C(18A)-H(18C)	0.9800
C(1)-H(1A)	0.9500	C(19A)-H(19A)	0.9800
C(2)-C(3)	1.397(16)	C(19A)-H(19B)	0.9800
C(2)-C(16A)	1.543(18)	C(19A)-H(19C)	0.9800
C(3)-C(4)	1.408(16)	C(17B)-H(17D)	0.9800
C(3)-H(3A)	0.9500	C(17B)-H(17E)	0.9800
C(4)-C(11)	1.391(14)	C(17B)-H(17F)	0.9800
C(5)-C(12)	1.378(16)	C(18B)-H(18D)	0.9800
C(5)-C(6)	1.404(14)	C(18B)-H(18E)	0.9800
C(5)-H(5A)	0.9500	C(18B)-H(18F)	0.9800
C(6)-C(7)	1.408(16)	C(19B)-H(19D)	0.9800
C(6)-H(6A)	0.9500	C(19B)-H(19E)	0.9800
C(7)-C(8)	1.379(16)	C(19B)-H(19F)	0.9800
C(7)-C(20)	1.550(15)	C(20)-C(22)	1.505(16)
C(8)-C(13)	1.417(14)	C(20)-C(23)	1.535(17)
C(8)-H(8A)	0.9500	C(20)-C(21)	1.554(17)
C(9)-C(10)	1.527(14)	C(21)-H(21A)	0.9800
C(9)-C(13)	1.529(15)	C(21)-H(21B)	0.9800
C(9)-C(14)	1.543(15)	C(21)-H(21C)	0.9800
C(9)-C(15)	1.551(15)	C(22)-H(22A)	0.9800
C(10)-C(11)	1.412(15)	C(22)-H(22B)	0.9800
C(12)-C(13)	1.442(14)	C(22)-H(22C)	0.9800
C(14)-H(14A)	0.9800	C(23)-H(23A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800	C(23)-H(23B)	0.9800
C(14)-H(14C)	0.9800	C(23)-H(23C)	0.9800
C(15)-H(15A)	0.9800	C(24)-C(29)	1.395(16)

C(24)-C(25)	1.396(16)	C(11)-S(1)-Pt(1)	106.0(4)
C(25)-C(26)	1.388(17)	C(4)-P(1)-C(24)	105.5(5)
C(25)-H(25A)	0.9500	C(4)-P(1)-C(30)	103.8(5)
C(26)-C(27)	1.33(2)	C(24)-P(1)-C(30)	107.8(5)
C(26)-H(26A)	0.9500	C(4)-P(1)-Pt(1)	106.5(4)
C(27)-C(28)	1.36(2)	C(24)-P(1)-Pt(1)	118.2(4)
C(27)-H(27A)	0.9500	C(30)-P(1)-Pt(1)	113.8(4)
C(28)-C(29)	1.408(17)	C(10)-C(1)-C(2)	124.0(11)
C(28)-H(28A)	0.9500	C(10)-C(1)-H(1A)	118.0
C(29)-H(29A)	0.9500	C(2)-C(1)-H(1A)	118.0
C(30)-C(35)	1.379(15)	C(1)-C(2)-C(3)	118.0(12)
C(30)-C(31)	1.399(14)	C(1)-C(2)-C(16A)	122.1(11)
C(31)-C(32)	1.380(15)	C(3)-C(2)-C(16A)	119.7(10)
C(31)-H(31A)	0.9500	C(2)-C(3)-C(4)	120.8(10)
C(32)-C(33)	1.365(17)	C(2)-C(3)-H(3A)	119.6
C(32)-H(32A)	0.9500	C(4)-C(3)-H(3A)	119.6
C(33)-C(34)	1.400(16)	C(11)-C(4)-C(3)	118.1(11)
C(33)-H(33A)	0.9500	C(11)-C(4)-P(1)	118.5(9)
C(34)-C(35)	1.360(15)	C(3)-C(4)-P(1)	123.2(8)
C(34)-H(34A)	0.9500	C(12)-C(5)-C(6)	119.9(11)
C(35)-H(35A)	0.9500	C(12)-C(5)-H(5A)	120.1
C(36A)-Cl(2A)	1.769(5)	C(6)-C(5)-H(5A)	120.1
C(36A)-Cl(1A)	1.771(5)	C(5)-C(6)-C(7)	121.1(12)
C(36A)-H(36A)	0.9900	C(5)-C(6)-H(6A)	119.5
C(36A)-H(36B)	0.9900	C(7)-C(6)-H(6A)	119.5
C(36B)-Cl(2B)	1.769(5)	C(8)-C(7)-C(6)	118.2(10)
C(36B)-Cl(1B)	1.770(5)	C(8)-C(7)-C(20)	122.2(11)
C(36B)-H(36C)	0.9900	C(6)-C(7)-C(20)	119.6(11)
C(36B)-H(36D)	0.9900	C(7)-C(8)-C(13)	123.5(11)
		C(7)-C(8)-H(8A)	118.3
P(1)-Pt(1)-S(1)	88.17(11)	C(13)-C(8)-H(8A)	118.3
P(1)-Pt(1)-I(2)	90.87(8)	C(10)-C(9)-C(13)	109.5(9)
S(1)-Pt(1)-I(2)	178.37(8)	C(10)-C(9)-C(14)	109.1(9)
P(1)-Pt(1)-I(1)	169.24(8)	C(13)-C(9)-C(14)	109.6(10)
S(1)-Pt(1)-I(1)	89.55(8)	C(10)-C(9)-C(15)	110.1(9)
I(2)-Pt(1)-I(1)	91.62(3)	C(13)-C(9)-C(15)	111.9(9)
C(12)-S(1)-C(11)	97.1(5)	C(14)-C(9)-C(15)	106.6(9)
C(12)-S(1)-Pt(1)	116.0(4)	C(1)-C(10)-C(11)	115.9(10)

C(1)-C(10)-C(9)	124.1(10)	C(16A)-C(18A)-H(18C)	109.5
C(11)-C(10)-C(9)	119.9(10)	H(18A)-C(18A)-H(18C)	109.5
C(4)-C(11)-C(10)	122.9(11)	H(18B)-C(18A)-H(18C)	109.5
C(4)-C(11)-S(1)	118.7(9)	C(16A)-C(19A)-H(19A)	109.5
C(10)-C(11)-S(1)	118.1(8)	C(16A)-C(19A)-H(19B)	109.5
C(5)-C(12)-C(13)	121.2(10)	H(19A)-C(19A)-H(19B)	109.5
C(5)-C(12)-S(1)	122.3(8)	C(16A)-C(19A)-H(19C)	109.5
C(13)-C(12)-S(1)	116.5(9)	H(19A)-C(19A)-H(19C)	109.5
C(8)-C(13)-C(12)	116.2(10)	H(19B)-C(19A)-H(19C)	109.5
C(8)-C(13)-C(9)	123.0(10)	H(17D)-C(17B)-H(17E)	109.5
C(12)-C(13)-C(9)	120.9(9)	H(17D)-C(17B)-H(17F)	109.5
C(9)-C(14)-H(14A)	109.5	H(17E)-C(17B)-H(17F)	109.5
C(9)-C(14)-H(14B)	109.5	H(18D)-C(18B)-H(18E)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14B)	109.5	H(18D)-C(18B)-H(18F)	109.5
C(9)-C(14)-H(14C)	109.5	H(18E)-C(18B)-H(18F)	109.5
H(14A)-C(14)-H(14C)	109.5	H(19D)-C(19B)-H(19E)	109.5
H(14B)-C(14)-H(14C)	109.5	H(19D)-C(19B)-H(19F)	109.5
C(9)-C(15)-H(15A)	109.5	H(19E)-C(19B)-H(19F)	109.5
C(9)-C(15)-H(15B)	109.5	C(22)-C(20)-C(23)	110.5(12)
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5	C(22)-C(20)-C(7)	110.7(10)
C(9)-C(15)-H(15C)	109.5	C(23)-C(20)-C(7)	109.5(9)
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5	C(22)-C(20)-C(21)	107.6(10)
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5	C(23)-C(20)-C(21)	106.3(11)
C(19A)-C(16A)-C(18A)	107.8(17)	C(7)-C(20)-C(21)	112.0(11)
C(19A)-C(16A)-C(17A)	111.8(18)	C(20)-C(21)-H(21A)	109.5
C(18A)-C(16A)-C(17A)	104.9(16)	C(20)-C(21)-H(21B)	109.5
C(19A)-C(16A)-C(2)	108.0(15)	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
C(18A)-C(16A)-C(2)	112.7(15)	C(20)-C(21)-H(21C)	109.5
C(17A)-C(16A)-C(2)	111.6(15)	H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
C(16A)-C(17A)-H(17A)	109.5	H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5
C(16A)-C(17A)-H(17B)	109.5	C(20)-C(22)-H(22A)	109.5
H(17A)-C(17A)-H(17B)	109.5	C(20)-C(22)-H(22B)	109.5
C(16A)-C(17A)-H(17C)	109.5	H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
H(17A)-C(17A)-H(17C)	109.5	C(20)-C(22)-H(22C)	109.5
H(17B)-C(17A)-H(17C)	109.5	H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5
C(16A)-C(18A)-H(18A)	109.5	H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
C(16A)-C(18A)-H(18B)	109.5	C(20)-C(23)-H(23A)	109.5
H(18A)-C(18A)-H(18B)	109.5	C(20)-C(23)-H(23B)	109.5

H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5	C(32)-C(31)-H(31A)	120.3
C(20)-C(23)-H(23C)	109.5	C(30)-C(31)-H(31A)	120.3
H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5	C(33)-C(32)-C(31)	120.9(11)
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5	C(33)-C(32)-H(32A)	119.5
C(29)-C(24)-C(25)	119.3(11)	C(31)-C(32)-H(32A)	119.5
C(29)-C(24)-P(1)	120.9(10)	C(32)-C(33)-C(34)	119.0(12)
C(25)-C(24)-P(1)	119.7(9)	C(32)-C(33)-H(33A)	120.5
C(26)-C(25)-C(24)	119.2(13)	C(34)-C(33)-H(33A)	120.5
C(26)-C(25)-H(25A)	120.4	C(35)-C(34)-C(33)	120.7(12)
C(24)-C(25)-H(25A)	120.4	C(35)-C(34)-H(34A)	119.7
C(27)-C(26)-C(25)	120.9(15)	C(33)-C(34)-H(34A)	119.7
C(27)-C(26)-H(26A)	119.6	C(34)-C(35)-C(30)	120.2(10)
C(25)-C(26)-H(26A)	119.6	C(34)-C(35)-H(35A)	119.9
C(26)-C(27)-C(28)	122.0(15)	C(30)-C(35)-H(35A)	119.9
C(26)-C(27)-H(27A)	119.0	Cl(2A)-C(36A)-Cl(1A)	110.1(12)
C(28)-C(27)-H(27A)	119.0	Cl(2A)-C(36A)-H(36A)	109.6
C(27)-C(28)-C(29)	119.3(15)	Cl(1A)-C(36A)-H(36A)	109.6
C(27)-C(28)-H(28A)	120.4	Cl(2A)-C(36A)-H(36B)	109.6
C(29)-C(28)-H(28A)	120.4	Cl(1A)-C(36A)-H(36B)	109.6
C(24)-C(29)-C(28)	119.2(14)	H(36A)-C(36A)-H(36B)	108.2
C(24)-C(29)-H(29A)	120.4	Cl(2B)-C(36B)-Cl(1B)	108.9(10)
C(28)-C(29)-H(29A)	120.4	Cl(2B)-C(36B)-H(36C)	109.9
C(35)-C(30)-C(31)	119.6(10)	Cl(1B)-C(36B)-H(36C)	109.9
C(35)-C(30)-P(1)	119.8(8)	Cl(2B)-C(36B)-H(36D)	109.9
C(31)-C(30)-P(1)	120.1(9)	Cl(1B)-C(36B)-H(36D)	109.9
C(32)-C(31)-C(30)	119.3(12)	H(36C)-C(36B)-H(36D)	108.3

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for so04. 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
Pt(1)	20(1)	35(1)	23(1)	-9(1)	-2(1)	-3(1)
I(2)	25(1)	54(1)	42(1)	-14(1)	-11(1)	4(1)
S(1)	21(1)	35(2)	23(2)	-10(1)	-2(1)	-4(1)
P(1)	21(1)	37(2)	21(2)	-9(1)	-2(1)	-4(1)
C(1)	31(5)	34(6)	26(6)	-3(5)	2(5)	-5(4)
I(1)	31(1)	39(1)	42(1)	-17(1)	-5(1)	-1(1)
C(2)	34(5)	38(5)	37(7)	-6(5)	-5(5)	-4(4)
C(3)	35(5)	35(6)	18(6)	-3(5)	-5(5)	-6(4)
C(4)	27(4)	34(5)	19(6)	3(5)	-2(4)	-9(4)
C(5)	23(5)	38(6)	38(7)	-9(5)	-10(5)	0(4)
C(6)	32(5)	40(7)	27(7)	-3(5)	-4(5)	-8(4)
C(7)	29(5)	36(6)	23(6)	-11(5)	5(4)	-9(4)
C(8)	28(5)	41(6)	21(6)	-14(5)	1(4)	2(5)
C(9)	26(5)	32(5)	22(5)	-1(5)	-9(4)	1(4)
C(10)	26(4)	38(6)	19(6)	-1(5)	-3(4)	-8(4)
C(11)	28(4)	32(5)	13(5)	-1(5)	-3(4)	-7(4)
C(12)	20(4)	31(5)	28(6)	-15(4)	-8(4)	-1(4)
C(13)	23(5)	27(5)	29(6)	-11(4)	-3(4)	1(4)
C(14)	33(6)	64(9)	23(5)	-12(5)	-6(5)	-14(6)
C(15)	24(5)	35(7)	38(7)	-14(6)	-8(5)	4(4)
C(16A)	48(7)	36(6)	85(9)	-25(6)	-1(6)	-6(5)
C(17A)	61(6)	34(6)	96(9)	-22(5)	-8(6)	4(5)
C(18A)	61(6)	34(6)	96(9)	-22(5)	-8(6)	4(5)
C(19A)	61(6)	34(6)	96(9)	-22(5)	-8(6)	4(5)
C(16B)	48(7)	36(6)	85(9)	-25(6)	-1(6)	-6(5)
C(17B)	61(6)	34(6)	96(9)	-22(5)	-8(6)	4(5)
C(18B)	61(6)	34(6)	96(9)	-22(5)	-8(6)	4(5)
C(19B)	61(6)	34(6)	96(9)	-22(5)	-8(6)	4(5)
C(20)	29(5)	43(7)	37(6)	-8(5)	-9(5)	-8(5)
C(21)	38(6)	60(9)	41(8)	-9(7)	12(5)	-6(5)
C(22)	56(9)	48(9)	83(11)	-27(8)	1(8)	-22(7)
C(23)	40(7)	68(11)	31(6)	2(6)	10(5)	-7(6)
C(24)	23(5)	56(8)	23(5)	-15(5)	-6(4)	-4(5)

C(25)	23(6)	69(8)	21(5)	-7(5)	4(5)	5(6)
C(26)	40(7)	92(11)	20(6)	-5(7)	-2(6)	5(7)
C(27)	56(9)	124(14)	29(7)	-30(7)	-8(7)	-1(9)
C(28)	82(11)	90(12)	63(9)	-35(7)	-45(9)	-10(9)
C(29)	45(7)	82(10)	28(6)	-22(6)	-8(6)	-19(7)
C(30)	22(4)	41(7)	23(5)	-9(4)	-7(4)	-5(5)
C(31)	18(5)	58(9)	40(7)	-1(6)	-11(5)	-3(5)
C(32)	20(5)	58(9)	44(8)	-8(6)	-2(5)	-3(5)
C(33)	34(5)	48(9)	44(7)	-4(6)	-1(5)	-12(6)
C(34)	33(6)	48(9)	38(7)	0(6)	-6(5)	-11(6)
C(35)	19(5)	48(8)	23(6)	-10(5)	-4(4)	-2(5)
C(36A)	197(8)	205(9)	202(10)	-43(6)	-57(7)	-22(6)
Cl(1A)	200(5)	190(5)	203(6)	-33(4)	-59(4)	-10(4)
Cl(2A)	200(5)	190(5)	203(6)	-33(4)	-59(4)	-10(4)
C(36B)	197(8)	205(9)	202(10)	-43(6)	-57(7)	-22(6)
Cl(1B)	200(5)	190(5)	203(6)	-33(4)	-59(4)	-10(4)
Cl(2B)	200(5)	190(5)	203(6)	-33(4)	-59(4)	-10(4)

Table 5. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for so04.

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	2043	12654	2306	39
H(3A)	5309	12579	2239	36
H(5A)	4002	7383	2847	39
H(6A)	2436	6580	3952	40
H(8A)	477	9392	3383	37
H(14A)	2738	10327	527	58
H(14B)	1951	11451	456	58
H(14C)	1406	10330	793	58
H(15A)	750	11281	3110	48
H(15B)	216	10910	2334	48
H(15C)	771	12025	1995	48
H(17A)	3160	15512	1305	98
H(17B)	2590	14559	1135	98
H(17C)	3907	14631	693	98
H(18A)	4392	15196	2405	98
H(18B)	5167	14304	1823	98
H(18C)	4714	14014	3041	98
H(19A)	2402	14980	3213	98
H(19B)	2722	13782	3819	98
H(19C)	1843	13982	3116	98
H(17D)	4066	15419	1228	98
H(17E)	3891	14522	673	98
H(17F)	4958	14371	1152	98
H(18D)	3895	14995	3095	98
H(18E)	4808	13977	2933	98
H(18F)	3643	13811	3758	98
H(19D)	2225	15298	2450	98
H(19E)	1841	14152	3110	98
H(19F)	1939	14449	1901	98
H(21A)	-991	8487	3989	76
H(21B)	-679	8746	4949	76
H(21C)	-1430	7786	5115	76

H(22A)	689	5949	3971	92
H(22B)	-186	6785	3425	92
H(22C)	-598	6104	4565	92
H(23A)	1184	6393	5512	78
H(23B)	-132	6529	6018	78
H(23C)	604	7499	5854	78
H(25A)	6022	8876	3969	50
H(26A)	6265	8967	5562	65
H(27A)	7026	10376	5739	83
H(28A)	7468	11825	4400	83
H(29A)	7124	11850	2792	58
H(31A)	8618	10456	1531	47
H(32A)	9886	11393	170	51
H(33A)	9298	12465	-1243	52
H(34A)	7372	12796	-1196	49
H(35A)	6095	11929	172	36
H(36A)	8106	5690	1930	239
H(36B)	8350	5426	813	239
H(36C)	8323	5721	973	239
H(36D)	9244	5126	173	239

Table 6. Torsion angles [°] for so04.

P(1)-Pt(1)-S(1)-C(12)	-116.5(4)	C(14)-C(9)-C(10)-C(11)	-79.0(13)
I(1)-Pt(1)-S(1)-C(12)	74.0(4)	C(15)-C(9)-C(10)-C(11)	164.3(10)
P(1)-Pt(1)-S(1)-C(11)	-10.1(4)	C(3)-C(4)-C(11)-C(10)	-3.1(16)
I(1)-Pt(1)-S(1)-C(11)	-179.6(4)	P(1)-C(4)-C(11)-C(10)	172.4(9)
S(1)-Pt(1)-P(1)-C(4)	4.3(4)	C(3)-C(4)-C(11)-S(1)	170.2(8)
I(2)-Pt(1)-P(1)-C(4)	-174.4(4)	P(1)-C(4)-C(11)-S(1)	-14.4(12)
I(1)-Pt(1)-P(1)-C(4)	82.2(5)	C(1)-C(10)-C(11)-C(4)	1.5(16)
S(1)-Pt(1)-P(1)-C(24)	122.6(4)	C(9)-C(10)-C(11)-C(4)	-176.1(10)
I(2)-Pt(1)-P(1)-C(24)	-56.0(4)	C(1)-C(10)-C(11)-S(1)	-171.8(8)
I(1)-Pt(1)-P(1)-C(24)	-159.5(5)	C(9)-C(10)-C(11)-S(1)	10.6(14)
S(1)-Pt(1)-P(1)-C(30)	-109.4(4)	C(12)-S(1)-C(11)-C(4)	136.1(9)
I(2)-Pt(1)-P(1)-C(30)	71.9(4)	Pt(1)-S(1)-C(11)-C(4)	16.5(9)
I(1)-Pt(1)-P(1)-C(30)	-31.5(6)	C(12)-S(1)-C(11)-C(10)	-50.3(9)
C(10)-C(1)-C(2)-C(3)	-5.5(19)	Pt(1)-S(1)-C(11)-C(10)	-169.9(8)
C(10)-C(1)-C(2)-C(16A)	169.4(11)	C(6)-C(5)-C(12)-C(13)	2.5(16)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	3.7(18)	C(6)-C(5)-C(12)-S(1)	-177.7(8)
C(16A)-C(2)-C(3)-C(4)	-171.4(11)	C(11)-S(1)-C(12)-C(5)	-135.4(10)
C(2)-C(3)-C(4)-C(11)	0.4(17)	Pt(1)-S(1)-C(12)-C(5)	-23.7(10)
C(2)-C(3)-C(4)-P(1)	-174.8(9)	C(11)-S(1)-C(12)-C(13)	44.4(9)
C(24)-P(1)-C(4)-C(11)	-121.8(9)	Pt(1)-S(1)-C(12)-C(13)	156.0(7)
C(30)-P(1)-C(4)-C(11)	125.0(9)	C(7)-C(8)-C(13)-C(12)	-1.3(16)
Pt(1)-P(1)-C(4)-C(11)	4.6(9)	C(7)-C(8)-C(13)-C(9)	179.0(10)
C(24)-P(1)-C(4)-C(3)	53.4(11)	C(5)-C(12)-C(13)-C(8)	-0.7(15)
C(30)-P(1)-C(4)-C(3)	-59.8(10)	S(1)-C(12)-C(13)-C(8)	179.6(8)
Pt(1)-P(1)-C(4)-C(3)	179.8(8)	C(5)-C(12)-C(13)-C(9)	179.0(10)
C(12)-C(5)-C(6)-C(7)	-2.5(17)	S(1)-C(12)-C(13)-C(9)	-0.7(14)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	0.6(17)	C(10)-C(9)-C(13)-C(8)	133.2(11)
C(5)-C(6)-C(7)-C(20)	178.3(10)	C(14)-C(9)-C(13)-C(8)	-107.2(11)
C(6)-C(7)-C(8)-C(13)	1.4(17)	C(15)-C(9)-C(13)-C(8)	10.9(15)
C(20)-C(7)-C(8)-C(13)	-176.3(10)	C(10)-C(9)-C(13)-C(12)	-46.5(13)
C(2)-C(1)-C(10)-C(11)	2.9(17)	C(14)-C(9)-C(13)-C(12)	73.1(12)
C(2)-C(1)-C(10)-C(9)	-179.6(11)	C(15)-C(9)-C(13)-C(12)	-168.8(9)
C(13)-C(9)-C(10)-C(1)	-136.5(11)	C(1)-C(2)-C(16A)-C(19A)	57(2)
C(14)-C(9)-C(10)-C(1)	103.6(13)	C(3)-C(2)-C(16A)-C(19A)	-128.7(19)
C(15)-C(9)-C(10)-C(1)	-13.0(15)	C(1)-C(2)-C(16A)-C(18A)	175.5(18)
C(13)-C(9)-C(10)-C(11)	40.9(13)	C(3)-C(2)-C(16A)-C(18A)	-10(2)

C(1)-C(2)-C(16A)-C(17A)	-66.8(19)	C(26)-C(27)-C(28)-C(29)	0(3)
C(3)-C(2)-C(16A)-C(17A)	108.0(18)	C(25)-C(24)-C(29)-C(28)	0.5(19)
C(8)-C(7)-C(20)-C(22)	113.7(13)	P(1)-C(24)-C(29)-C(28)	177.9(11)
C(6)-C(7)-C(20)-C(22)	-63.9(15)	C(27)-C(28)-C(29)-C(24)	-2(2)
C(8)-C(7)-C(20)-C(23)	-124.1(13)	C(4)-P(1)-C(30)-C(35)	-28.8(11)
C(6)-C(7)-C(20)-C(23)	58.3(14)	C(24)-P(1)-C(30)-C(35)	-140.4(10)
C(8)-C(7)-C(20)-C(21)	-6.4(16)	Pt(1)-P(1)-C(30)-C(35)	86.5(10)
C(6)-C(7)-C(20)-C(21)	176.0(11)	C(4)-P(1)-C(30)-C(31)	159.0(10)
C(4)-P(1)-C(24)-C(29)	-78.7(10)	C(24)-P(1)-C(30)-C(31)	47.4(11)
C(30)-P(1)-C(24)-C(29)	31.7(11)	Pt(1)-P(1)-C(30)-C(31)	-85.7(10)
Pt(1)-P(1)-C(24)-C(29)	162.5(9)	C(35)-C(30)-C(31)-C(32)	2.8(18)
C(4)-P(1)-C(24)-C(25)	98.8(10)	P(1)-C(30)-C(31)-C(32)	175.1(10)
C(30)-P(1)-C(24)-C(25)	-150.8(9)	C(30)-C(31)-C(32)-C(33)	-4(2)
Pt(1)-P(1)-C(24)-C(25)	-20.1(11)	C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	4(2)
C(29)-C(24)-C(25)-C(26)	1.9(17)	C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	-3(2)
P(1)-C(24)-C(25)-C(26)	-175.6(9)	C(33)-C(34)-C(35)-C(30)	1.5(19)
C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	-3(2)	C(31)-C(30)-C(35)-C(34)	-1.6(18)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	2(2)	P(1)-C(30)-C(35)-C(34)	-173.8(9)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: