

**APPENDIX****APPENDIX : I**

Table 1.

Bond lengths [Å] and bond angles [°] for [RuL<sup>1</sup>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl], (1)

<i>Bond lengths</i>	(Å)	<i>Bond lengths</i>	(Å)
Ru(1)-C(27)	2.018(5)	Ru(1)-N(1)	2.023(10)
Ru(1)-O(1)	2.242(9)	Ru(1)-Cl(1)	2.345(3)
Ru(1)-P(1)	2.408(2)	Ru(1)-P(1A)	2.408(2)
P(1)-C(6)	1.879(7)	P(1)-C(12)	1.829(7)
P(1)-C(18)	1.816(7)	O(1)-C(24)	1.298(11)
N(1)-N(2)	1.291(11)	N(1)-C(23)	1.386(11)
N(2)-C(26)	1.388(11)	C(1)-C(2)	1.377(11)
C(1)-C(6)	1.384(9)	C(2)-C(3)	1.348(12)
C(3)-C(4)	1.342(11)	C(4)-C(5)	1.389(10)
C(5)-C(6)	1.379(9)	C(7)-C(8)	1.388(11)
C(7)-C(12)	1.369(9)	C(8)-C(9)	1.345(11)
C(9)-C(10)	1.355(10)	C(10)-C(11)	1.381(9)
C(11)-C(12)	1.372(9)	C(13)-C(14)	1.372(11)
C(13)-C(18)	1.397(10)	C(14)-C(15)	1.350(11)
C(15)-C(16)	1.374(11)	C(16)-C(17)	1.383(10)
C(17)-C(18)	1.368(9)	C(19)-C(20)	1.39
C(19)-C(24)	1.39	C(20)-C(21)	1.39
C(21)-C(22)	1.39	C(21)-C(25)	1.61(2)
C(22)-C(23)	1.39	C(23)-C(24)	1.39
C(26)-C(27)	1.39	C(26)-C(31)	1.39
C(27)-C(28)	1.39	C(28)-C(29)	1.39
C(29)-C(30)	1.39	C(30)-C(31)	1.39
C(30)-C(35)	1.39	C(31)-C(32)	1.39
C(32)-C(33)	1.39	C(33)-C(34)	1.39
C(34)-C(35)	1.39		
<i>Bond angles</i>	(°)	<i>Bond angles</i>	(°)
C(27)-Ru(1)-N(1)	76.3(3)	C(27)-Ru(1)-O(1)	151.1(4)
N(1)-Ru(1)-O(1)	74.8(4)	N(1)-Ru(1)-Cl(1)	165.0(3)
C(27)-Ru(1)-Cl(1)	118.7(2)	O(1)-Ru(1)-Cl(1)	90.2(3)
C(27)-Ru(1)-P(1)	91.5(2)	N(1)-Ru(1)-P(1)	89.3(3)
O(1)-Ru(1)-P(1)	89.2(2)	Cl(1)-Ru(1)-P(1)	90.22(5)
C(27)-Ru(1)-P(1A)	88.3(2)	N(1)-Ru(1)-P(1A)	90.3(3)
O(1)-Ru(1)-P(1A)	90.8(2)	Cl(1)-Ru(1)-P(1A)	90.22(5)
P(1)-Ru(1)-P(1A)	179.56(11)	C(6)-P(1)-C(12)	102.0(3)
C(18)-P(1)-C(6)	103.8(3)	C(18)-P(1)-C(12)	104.1(3)
C(6)-P(1)-Ru(1)	118.0(2)	C(12)-P(1)-Ru(1)	117.3(2)
C(18)-P(1)-Ru(1)	110.0(2)	C(24)-O(1)-Ru(1)	112.5(7)
N(2)-N(1)-C(23)	119.7(8)	N(2)-N(1)-Ru(1)	121.1(6)
C(23)-N(1)-Ru(1)	119.2(7)	N(1)-N(2)-C(26)	111.3(8)
C(6)-C(1)-C(2)	120.5(8)	C(3)-C(2)-C(1)	121.0(9)
C(2)-C(3)-C(4)	119.9(8)	C(3)-C(4)-C(5)	120.5(8)
C(6)-C(5)-C(4)	120.7(7)	C(5)-C(6)-C(1)	117.4(7)
C(1)-C(6)-P(1)	122.5(6)	C(5)-C(6)-P(1)	120.1(5)
C(12)-C(7)-C(8)	120.6(8)	C(9)-C(8)-C(7)	121.2(8)
C(8)-C(9)-C(10)	118.4(8)	C(9)-C(10)-C(11)	121.7(8)
C(12)-C(11)-C(10)	120.2(7)	C(7)-C(12)-C(11)	118.0(7)
C(7)-C(12)-P(1)	120.9(6)	C(11)-C(12)-P(1)	121.1(5)
C(14)-C(13)-C(18)	120.0(8)	C(15)-C(14)-C(13)	121.3(8)
C(14)-C(15)-C(16)	120.1(8)	C(17)-C(16)-C(15)	118.7(8)
C(18)-C(17)-C(16)	122.2(8)	C(17)-C(18)-C(13)	117.6(7)

C(13)-C(18)-P(1)	120.6(6)	C(17)-C(18)-P(1)	121.1(6)
C(20)-C(19)-C(24)	120.0	C(19)-C(20)-C(21)	120.0
C(20)-C(21)-C(22)	120.0	C(20)-C(21)-C(25)	122.4(10)
C(22)-C(21)-C(25)	117.6(10)	C(23)-C(22)-C(21)	120.0
C(24)-C(23)-C(22)	120.0	N(1)-C(23)-C(24)	114.5(7)
N(1)-C(23)-C(22)	125.5(7)	O(1)-C(24)-C(23)	119.0(7)
O(1)-C(24)-C(19)	121.0(7)	C(23)-C(24)-C(19)	120.0
N(2)-C(26)-C(27)	117.4(5)	N(2)-C(26)-C(31)	122.5(5)
C(27)-C(26)-C(31)	120.0	C(28)-C(27)-C(26)	120.0
C(28)-C(27)-Ru(1)	126.2(4)	C(26)-C(27)-Ru(1)	113.8(4)
C(29)-C(28)-C(27)	120.0	C(30)-C(29)-C(28)	120.0
C(29)-C(30)-C(31)	120.0	C(29)-C(30)-C(35)	120.0
C(31)-C(30)-C(35)	120.0	C(32)-C(31)-C(30)	120.0
C(32)-C(31)-C(26)	120.0	C(30)-C(31)-C(26)	120.0
C(33)-C(32)-C(31)	120.0	C(34)-C(33)-C(32)	120.0
C(33)-C(34)-C(35)	120.0	C(34)-C(35)-C(30)	120.0

Table 2.

Atomic coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{RuL}^1(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}]$ , (1).

	x	y	z	U(eq)
Ru(1)	5000	3047.8(9)	2500	28(1)
P(1)	3951.8(7)	3038(2)	2300.8(8)	28(1)
O(1)	4684(4)	3040(11)	1349(5)	42(2)
N(1)	4922(5)	929(11)	2231(5)	24(3)
N(2)	5027(6)	-79(11)	2686(5)	27(3)
Cl(1)	5000	5591(3)	2500	60(1)
C(1)	2790(3)	3213(9)	1155(4)	59(2)
C(2)	2361(4)	3850(11)	560(5)	84(3)
C(3)	2504(4)	4997(10)	273(5)	73(3)
C(4)	3076(4)	5514(9)	560(4)	60(2)
C(5)	3518(3)	4899(8)	1163(4)	45(2)
C(6)	3379(3)	3747(8)	1475(3)	33(2)
C(7)	3191(4)	3976(10)	2875(5)	73(3)
C(8)	3053(4)	4726(12)	3346(6)	89(4)
C(9)	3486(4)	5452(9)	3880(4)	55(2)
C(10)	4057(4)	5492(9)	3930(4)	58(2)
C(11)	4204(3)	4779(8)	3461(4)	45(2)
C(12)	3769(3)	4002(7)	2927(4)	33(2)
C(13)	3747(3)	592(9)	2938(4)	54(2)
C(14)	3647(4)	-863(9)	2974(5)	67(3)
C(15)	3506(4)	-1742(9)	2422(6)	68(3)
C(16)	3460(4)	-1186(9)	1808(5)	55(2)
C(17)	3555(3)	281(8)	1768(4)	44(2)
C(18)	3702(3)	1192(8)	2321(4)	33(2)
C(19)	4425(5)	1512(9)	392(4)	37(5)
C(20)	4350(5)	108(10)	132(4)	48(4)
C(21)	4468(5)	-1069(8)	577(5)	48(4)
C(22)	4660(5)	-842(8)	1282(4)	29(3)
C(23)	4736(4)	562(9)	1542(4)	21(6)
C(24)	4618(4)	1739(7)	1097(5)	30(3)
C(25)	4385(8)	-2716(18)	307(12)	55(6)
C(26)	5221(4)	498(7)	3346(3)	27(6)
C(27)	5264(4)	1999(7)	3411(4)	31(3)
C(28)	5486(4)	2635(6)	4063(4)	39(4)
C(29)	5665(4)	1772(6)	4650(3)	40(6)
C(30)	5622(3)	271(6)	4585(3)	31(4)
C(31)	5400(3)	-365(6)	3933(3)	26(3)
C(32)	5357(4)	-1866(6)	3869(4)	37(3)
C(33)	5536(4)	-2729(6)	4456(4)	46(7)
C(34)	5758(4)	-2092(8)	5108(4)	48(4)
C(35)	5801(4)	-592(8)	5173(3)	49(4)

Table 3.

Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ]  
for  $[\text{RuL}^1(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}]$ , (1)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  
 $-2\pi^2 [(ha^*)^2U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12}]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ru(1)	25(1)	19(1)	38(1)	0	13(1)	0
P(1)	24(1)	25(1)	33(1)	0(1)	11(1)	0(1)
Cl(1)	49(2)	22(2)	104(2)	0	30(2)	0
C(1)	28(4)	66(6)	67(6)	18(5)	5(4)	-5(5)
C(2)	39(5)	82(7)	81(7)	13(6)	-17(5)	-2(5)
C(3)	64(7)	60(6)	51(6)	15(5)	-15(5)	5(6)
C(4)	69(6)	54(6)	45(5)	7(5)	15(5)	9(5)
C(5)	34(4)	46(5)	44(5)	5(4)	9(4)	4(4)
C(6)	38(5)	32(4)	31(4)	1(4)	18(4)	2(4)
C(7)	38(5)	98(8)	98(7)	-51(6)	43(5)	-24(5)
C(8)	48(6)	121(9)	126(9)	-59(8)	63(6)	-30(6)
C(9)	59(6)	56(6)	68(6)	-15(5)	45(5)	4(5)
C(10)	48(5)	63(6)	57(5)	-30(5)	19(4)	3(5)
C(11)	35(4)	49(5)	54(5)	-15(4)	23(4)	-1(4)
C(12)	36(4)	22(4)	44(4)	-1(4)	19(4)	3(4)
C(13)	55(5)	36(5)	54(5)	2(5)	10(4)	-4(4)
C(14)	69(6)	41(6)	65(6)	16(5)	5(5)	-10(5)
C(15)	57(6)	22(5)	104(8)	7(6)	18(6)	-10(4)
C(16)	54(5)	28(5)	86(7)	-14(5)	32(5)	-3(4)
C(17)	40(5)	43(5)	50(5)	-8(4)	23(4)	-5(4)
C(18)	24(4)	31(4)	39(5)	3(4)	10(3)	-1(3)

Table 4.

Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $[\text{RuL}^1(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}]$  (1)

	x	y	z	U(eq)
H(1A)	2682(3)	2410(9)	1346(4)	71
H(2A)	1962(4)	3478(11)	350(5)	100
H(3A)	2204(4)	5435(10)	-128(5)	88
H(4A)	3177(4)	6297(9)	352(4)	72
H(5A)	3917(3)	5272(8)	1359(4)	53
H(7A)	2885(4)	3445(10)	2516(5)	88
H(8A)	2651(4)	4726(12)	3291(6)	107
H(9A)	3394(4)	5921(9)	4210(4)	66
H(10A)	4361(4)	6017(9)	4294(4)	69
H(11A)	4604(3)	4827(8)	3507(4)	53
H(13A)	3844(3)	1185(9)	3328(4)	65
H(14A)	3678(4)	-1255(9)	3391(5)	81
H(15A)	3439(4)	-2735(9)	2458(6)	81
H(16A)	3366(4)	-1793(9)	1423(5)	67
H(17A)	3517(3)	666(8)	1346(4)	52

APPENDIX : II

Table 1.

Bond lengths [Å] and angles [°]<sup>a</sup> for [PdL<sup>6</sup>Cl], (2A)

<i>Bond lengths</i>	(Å)	<i>Bond lengths</i>	(Å)
Pd-N(1)	1.960(4)	Pd-C(14)	1.994(5)
Pd-Cl	2.3271(12)	Pd-S	2.392(2)
S-C(6)	1.775(5)	S-C(7)	1.838(5)
O(1)-C(22)	1.359(6)	O(1)-C(24)	1.436(6)
N(1)-N(2)	1.280(5)	N(1)-C(1)	1.428(6)
N(2)-C(15)	1.367(6)	C(1)-C(2)	1.386(7)
C(1)-C(6)	1.397(6)	C(2)-C(3)	1.373(7)
C(3)-C(4)	1.371(7)	C(4)-C(5)	1.372(7)
C(5)-C(6)	1.383(6)	C(7)-C(13)	1.492(7)
C(8)-C(13)	1.382(7)	C(8)-C(9)	1.386(8)
C(9)-C(10)	1.353(8)	C(10)-C(11)	1.377(8)
C(11)-C(12)	1.379(7)	C(12)-C(13)	1.384(7)
C(14)-C(23)	1.391(7)	C(14)-C(15)	1.394(6)
C(15)-C(16)	1.450(6)	C(16)-C(17)	1.405(7)
C(16)-C(21)	1.409(7)	C(17)-C(18)	1.371(7)
C(18)-C(19)	1.371(8)	C(19)-C(20)	1.369(8)
C(20)-C(21)	1.417(7)	C(21)-C(22)	1.418(7)
C(22)-C(23)	1.384(7)		
<i>Bond angles</i>	(°)	<i>Bond angles</i>	(°)
N(1)-Pd-C(14)	78.8(2)	N(1)-Pd-Cl	177.28(11)
C(14)-Pd-Cl	98.8(2)	N(1)-Pd-S	85.17(12)
C(14)-Pd-S	163.71(14)	Cl-Pd-S	97.27(5)
C(6)-S-C(7)	101.4(2)	C(6)-S-Pd	95.7(2)
C(7)-S-Pd	106.8(2)	C(22)-O(1)-C(24)	119.2(4)
N(2)-N(1)-C(1)	117.7(4)	N(2)-N(1)-Pd	120.9(3)
C(1)-N(1)-Pd	121.4(3)	N(1)-N(2)-C(15)	110.6(4)
C(2)-C(1)-C(6)	120.9(4)	C(2)-C(1)-N(1)	121.9(4)
C(6)-C(1)-N(1)	117.2(4)	C(3)-C(2)-C(1)	118.2(5)
C(4)-C(3)-C(2)	121.6(5)	C(3)-C(4)-C(5)	120.1(5)
C(4)-C(5)-C(6)	120.1(5)	C(5)-C(6)-C(1)	118.9(4)
C(5)-C(6)-S	120.5(4)	C(1)-C(6)-S	120.6(4)
C(13)-C(7)-S	114.7(3)	C(13)-C(8)-C(9)	119.6(6)
C(10)-C(9)-C(8)	121.6(6)	C(9)-C(10)-C(11)	119.2(6)
C(10)-C(11)-C(12)	120.3(6)	C(11)-C(12)-C(13)	120.5(5)
C(8)-C(13)-C(12)	118.8(5)	C(8)-C(13)-C(7)	119.7(5)
C(12)-C(13)-C(7)	121.5(5)	C(23)-C(14)-C(15)	119.7(4)
C(23)-C(14)-Pd	130.2(4)	C(15)-C(14)-Pd	110.0(3)
N(2)-C(15)-C(14)	119.7(4)	N(2)-C(15)-C(16)	118.4(4)
C(14)-C(15)-C(16)	121.8(4)	C(17)-C(16)-C(21)	119.7(4)
C(17)-C(16)-C(15)	123.2(5)	C(21)-C(16)-C(15)	117.2(4)
C(18)-C(17)-C(16)	119.4(5)	C(19)-C(18)-C(17)	121.7(5)
C(20)-C(19)-C(18)	120.4(5)	C(19)-C(20)-C(21)	120.2(5)
C(16)-C(21)-C(20)	118.6(5)	C(16)-C(21)-C(22)	119.3(4)
C(20)-C(21)-C(22)	122.0(5)	O(1)-C(22)-C(23)	124.1(5)
O(1)-C(22)-C(21)	113.7(4)	C(23)-C(22)-C(21)	122.2(5)
C(22)-C(23)-C(14)	119.7(5)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms.

<sup>a</sup> Estimated standard deviations in the least significant digits are given in parentheses.

Table 2.

Atomic coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for,  $[\text{PdL}^6\text{Cl}]$ , (2A)

	x	y	z	U(eq) <sup>a</sup>
Pd	5074.6(3)	3889.4(3)	1110.9(2)	30(1)
Cl	5938(1)	1982(1)	1409(1)	37(1)
S	6546(1)	5069(1)	1900(1)	34(1)
O(1)	1493(4)	962(3)	-391(2)	53(1)
N(1)	4315(4)	5465(3)	814(2)	31(1)
N(2)	3329(4)	5522(4)	350(2)	34(1)
C(1)	4841(4)	6585(4)	1104(2)	31(1)
C(2)	4344(5)	7707(4)	873(3)	38(1)
C(3)	4889(5)	8740(5)	1192(3)	45(1)
C(4)	5897(5)	8679(4)	1725(3)	44(1)
C(5)	6408(5)	7570(4)	1937(3)	40(1)
C(6)	5897(4)	6508(4)	1624(3)	30(1)
C(7)	6085(5)	4937(5)	2848(3)	40(1)
C(8)	4415(6)	6375(5)	3150(3)	48(1)
C(9)	3162(6)	6653(6)	3197(3)	58(2)
C(10)	2240(6)	5828(6)	3014(3)	56(2)
C(11)	2556(5)	4683(6)	2782(3)	53(2)
C(12)	3796(5)	4387(5)	2727(3)	39(1)
C(13)	4740(5)	5227(5)	2918(2)	35(1)
C(14)	3603(4)	3362(4)	418(2)	31(1)
C(15)	2930(5)	4378(4)	137(2)	31(1)
C(16)	1772(4)	4260(4)	-351(2)	34(1)
C(17)	1090(5)	5266(5)	-659(3)	45(1)
C(18)	-22(5)	5074(6)	-1092(3)	54(2)
C(19)	-498(6)	3925(6)	-1224(3)	56(2)
C(20)	156(5)	2925(6)	-945(3)	50(2)
C(21)	1321(5)	3070(5)	-506(2)	35(1)
C(22)	2029(5)	2059(5)	-205(3)	37(1)
C(23)	3164(5)	2198(4)	228(2)	36(1)
C(24)	2089(6)	-133(5)	-96(3)	63(2)

<sup>a</sup> U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_j$  tensor.

Table 3.

Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^6\text{Cl}]$  (2A)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [ (ha')^2U_{11} + \dots + 2hka'b'U_{12} ]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd	32(1)	25(1)	33(1)	1(1)	2(1)	2(1)
Cl	35(1)	17(1)	56(1)	4(1)	-10(1)	4(1)
S	29(1)	30(1)	42(1)	1(1)	2(1)	2(1)
O(1)	66(3)	35(2)	52(2)	-5(2)	-19(2)	-8(2)
N(1)	32(2)	27(2)	33(2)	3(2)	3(2)	4(2)
N(2)	34(2)	33(2)	35(2)	2(2)	2(2)	2(2)
C(1)	33(3)	25(2)	36(3)	3(2)	11(2)	-1(2)
C(2)	38(3)	27(3)	47(3)	2(2)	3(2)	3(2)
C(3)	48(3)	27(3)	62(4)	3(3)	8(3)	4(3)
C(4)	39(3)	27(3)	65(4)	2(2)	4(3)	-7(2)
C(5)	34(3)	35(3)	51(3)	0(3)	1(2)	-6(2)
C(6)	28(3)	24(2)	39(3)	4(2)	5(2)	0(2)
C(7)	42(3)	43(3)	35(3)	5(2)	-4(2)	-1(3)
C(8)	59(4)	40(3)	46(3)	0(3)	20(3)	-2(3)
C(9)	75(5)	51(4)	54(4)	13(3)	36(3)	25(4)
C(10)	46(4)	76(5)	48(3)	9(3)	15(3)	21(4)
C(11)	42(3)	79(5)	38(3)	3(3)	6(3)	-2(3)
C(12)	45(3)	41(3)	32(3)	-3(2)	3(2)	2(3)
C(13)	39(3)	38(3)	27(2)	7(2)	3(2)	4(2)
C(14)	33(3)	36(3)	24(2)	1(2)	4(2)	3(2)
C(15)	36(3)	27(2)	29(2)	1(2)	3(2)	2(2)
C(16)	32(3)	37(3)	31(3)	3(2)	0(2)	7(2)
C(17)	46(3)	45(3)	42(3)	7(3)	-1(3)	10(3)
C(18)	53(4)	56(4)	49(3)	3(3)	-10(3)	18(3)
C(19)	50(3)	68(4)	45(3)	-6(3)	-16(3)	7(3)
C(20)	51(3)	57(4)	39(3)	-10(3)	-11(3)	1(3)
C(21)	33(3)	47(3)	26(2)	-6(2)	-2(2)	1(2)
C(22)	42(3)	37(3)	31(3)	-2(2)	1(2)	0(3)
C(23)	42(3)	32(3)	32(3)	1(2)	-3(2)	7(2)
C(24)	85(5)	35(3)	64(4)	-3(3)	-18(4)	-6(3)

Table 4.

Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $[\text{PdL}^6\text{Cl}]$  (2A)

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	3653(5)	7758(4)	509(3)	45
H(3A)	4564(5)	9507(5)	1041(3)	54
H(4A)	6238(5)	9399(4)	1945(3)	53
H(5A)	7107(5)	7533(4)	2297(3)	48
H(7A)	6254(5)	4102(5)	3024(3)	49
H(7B)	6613(5)	5485(5)	3174(3)	49
H(8A)	5040(6)	6963(5)	3276(3)	57
H(9A)	2947(6)	7433(6)	3358(3)	69
H(10A)	1395(6)	6035(6)	3045(3)	67
H(11A)	1924(5)	4100(6)	2661(3)	63
H(12A)	4002(5)	3608(5)	2559(3)	47
H(17A)	1393(5)	6063(5)	-569(3)	53
H(18A)	-469(5)	5748(6)	-1304(3)	64
H(19A)	-1278(6)	3823(6)	-1508(3)	67
H(20A)	-170(5)	2139(6)	-1045(3)	60
H(23A)	3636(5)	1509(4)	393(2)	43
H(24A)	1598(6)	-835(5)	-278(3)	95
H(24B)	2144(6)	-113(5)	442(3)	95
H(24C)	2926(6)	-190(5)	-254(3)	95

Table 5.

Bond lengths [Å] and angles [°]<sup>a</sup> for [PdL<sup>6</sup>Cl], (2B)

<i>Bond lengths</i>	(Å)	<i>Bond lengths</i>	(Å)
Pd-N(1)	2.014(3)	Pd-C(14)	2.026(4)
Pd-Cl(1)	2.3685(12)	Pd-S(1)	2.3988(12)
S(1)-C(2)	1.778(5)	S(1)-C(7)	1.855(5)
O(1)-C(19)	1.354(6)	O(1)-C(24)	1.444(6)
N(1)-N(2)	1.284(5)	N(1)-C(1)	1.459(5)
N(2)-C(16)	1.380(5)	C(1)-C(6)	1.382(7)
C(1)-C(2)	1.421(6)	C(2)-C(3)	1.410(7)
C(3)-C(4)	1.381(8)	C(4)-C(5)	1.380(8)
C(5)-C(6)	1.411(7)	C(7)-C(13)	1.496(7)
C(8)-C(9)	1.43(2)	C(8)-C(13)	1.418(9)
C(9)-C(10)	1.37(2)	C(10)-C(11)	1.40(2)
C(14)-C(15)	1.412(6)	C(14)-C(23)	1.411(7)
C(15)-C(16)	1.447(6)	C(15)-C(20)	1.465(6)
C(16)-C(17)	1.425(7)	C(17)-C(18)	1.364(7)
C(18)-C(19)	1.408(7)	C(19)-C(20)	1.422(6)
C(20)-C(21)	1.429(7)	C(21)-C(22)	1.371(7)
C(22)-C(23)	1.408(7)	C(11)-C(12)	1.384(10)
C(12)-C(13)	1.392(9)		
<i>Bond angles</i>	(°)	<i>Bond angles</i>	(°)
N(1)-Pd-C(14)	91.5(2)	N(1)-Pd-Cl(1)	172.24(10)
C(14)-Pd-Cl(1)	95.97(12)	N(1)-Pd-S(1)	85.14(10)
C(14)-Pd-S(1)	173.78(12)	Cl(1)-Pd-S(1)	87.63(4)
C(2)-S(1)-C(7)	103.1(2)	C(2)-S(1)-Pd	96.9(2)
C(7)-S(1)-Pd	110.6(2)	C(19)-O(1)-C(24)	118.2(4)
N(2)-N(1)-C(1)	111.9(3)	N(2)-N(1)-Pd	129.5(3)
C(1)-N(1)-Pd	118.6(3)	N(1)-N(2)-C(16)	124.3(4)
C(6)-C(1)-N(1)	121.8(4)	C(6)-C(1)-C(2)	119.7(4)
N(1)-C(1)-C(2)	118.5(4)	C(3)-C(2)-C(1)	119.1(4)
C(3)-C(2)-S(1)	121.6(4)	C(1)-C(2)-S(1)	119.3(4)
C(2)-C(3)-C(4)	120.2(5)	C(5)-C(4)-C(3)	120.7(5)
C(4)-C(5)-C(6)	120.0(5)	C(1)-C(6)-C(5)	120.2(5)
C(13)-C(7)-S(1)	114.6(3)	C(9)-C(8)-C(13)	116.4(10)
C(10)-C(9)-C(8)	121.5(12)	C(9)-C(10)-C(11)	120.5(10)
C(15)-C(14)-C(23)	116.4(4)	C(15)-C(14)-Pd	123.5(3)
C(23)-C(14)-Pd	120.1(3)	C(14)-C(15)-C(16)	123.6(4)
C(14)-C(15)-C(20)	120.6(4)	C(16)-C(15)-C(20)	115.7(4)
N(2)-C(16)-C(17)	112.6(4)	N(2)-C(16)-C(15)	127.2(4)
C(17)-C(16)-C(15)	120.2(4)	C(18)-C(17)-C(16)	123.5(5)
C(17)-C(18)-C(19)	118.3(4)	O(1)-C(19)-C(20)	114.8(4)
O(1)-C(19)-C(18)	123.6(4)	C(20)-C(19)-C(18)	121.6(4)
C(19)-C(20)-C(15)	120.6(4)	C(19)-C(20)-C(21)	120.5(4)
C(15)-C(20)-C(21)	118.9(4)	C(22)-C(21)-C(20)	120.4(5)
C(21)-C(22)-C(23)	119.5(5)	C(14)-C(23)-C(22)	124.2(5)
C(12)-C(11)-C(10)	119.9(12)	C(11)-C(12)-C(13)	119.8(9)
C(12)-C(13)-C(8)	121.8(7)	C(12)-C(13)-C(7)	120.5(5)
C(8)-C(13)-C(7)	117.8(7)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms.

<sup>a</sup> Estimated standard deviations in the least significant digits are given in parentheses.

Table 6.

Atomic coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for, [PdL<sup>6</sup>Cl], (2B)

	x	y	z	U(eq) <sup>a</sup>
Pd	3839.3(4)	3288.8(1)	1318.4(1)	42(1)
Cl(1)	3016(2)	3746.4(6)	417.8(5)	66(1)
S(1)	5539(1)	2674.1(6)	738.1(5)	50(1)
O(1)	1262(4)	4730(2)	3762(1)	62(1)
N(1)	4640(4)	2804(2)	2016(2)	43(1)
N(2)	4443(4)	2894(2)	2574(2)	44(1)
C(1)	5564(5)	2255(2)	1901(2)	49(1)
C(2)	6050(5)	2142(3)	1310(2)	50(1)
C(3)	6944(7)	1613(3)	1192(2)	65(1)
C(4)	7350(7)	1216(3)	1648(3)	78(2)
C(5)	6880(7)	1326(3)	2223(3)	78(2)
C(6)	6013(6)	1859(3)	2353(2)	66(1)
C(7)	4506(6)	2173(2)	206(2)	60(1)
C(8)	3861(10)	1072(3)	471(4)	113(3)
C(9)	2840(21)	646(5)	742(6)	206(9)
C(10)	1578(19)	851(9)	1023(5)	213(11)
C(14)	2599(5)	3839(2)	1860(2)	45(1)
C(15)	2685(5)	3817(2)	2486(2)	44(1)
C(16)	3579(5)	3368(2)	2810(2)	47(1)
C(17)	3629(5)	3385(2)	3443(2)	54(1)
C(18)	2893(6)	3820(2)	3776(2)	56(1)
C(19)	2019(5)	4269(2)	3480(2)	54(1)
C(20)	1867(5)	4269(2)	2851(2)	44(1)
C(21)	937(5)	4719(3)	2562(2)	58(1)
C(22)	810(6)	4724(2)	1955(2)	62(1)
C(23)	1632(6)	4291(2)	1616(2)	60(1)
C(24)	1454(7)	4794(3)	4396(2)	78(2)
C(11)	1206(12)	1489(7)	1022(3)	155(5)
C(12)	2145(7)	1917(4)	751(2)	85(2)
C(13)	3465(7)	1714(2)	488(2)	68(2)

<sup>a</sup> U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.



Table 7.

Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^6\text{Cl}]$  (2B)

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha)^*U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd	53(1)	36(1)	37(1)	-1(1)	-2(1)	-8(1)
Cl(1)	97(1)	60(1)	41(1)	4(1)	-9(1)	-4(1)
S(1)	59(1)	50(1)	41(1)	-3(1)	4(1)	-7(1)
O(1)	70(2)	61(2)	53(2)	-8(2)	15(2)	0(2)
N(1)	46(2)	40(2)	43(2)	-1(2)	3(2)	-6(2)
N(2)	47(2)	41(2)	43(2)	-4(2)	5(2)	-5(2)
C(1)	55(3)	51(3)	41(2)	0(2)	1(2)	6(2)
C(2)	53(3)	55(3)	41(2)	-4(2)	3(2)	-4(2)
C(3)	70(3)	72(4)	54(3)	-17(3)	4(3)	12(3)
C(4)	88(4)	79(4)	66(3)	-7(3)	6(3)	35(3)
C(5)	93(4)	75(4)	66(3)	7(3)	4(3)	32(3)
C(6)	82(4)	68(3)	47(3)	2(2)	8(2)	19(3)
C(7)	80(3)	56(3)	43(2)	-5(2)	-1(2)	-5(3)
C(8)	173(8)	56(4)	110(6)	9(4)	-73(5)	-18(5)
C(9)	381(22)	81(6)	156(11)	72(7)	-180(13)	-114(11)
C(10)	279(18)	272(20)	87(7)	82(10)	-81(9)	-227(18)
C(14)	51(2)	39(2)	45(2)	-1(2)	1(2)	-15(2)
C(15)	44(2)	43(2)	45(2)	0(2)	1(2)	-12(2)
C(16)	52(3)	43(2)	45(2)	-1(2)	1(2)	-8(2)
C(17)	64(3)	49(3)	49(3)	5(2)	-1(2)	-4(2)
C(18)	68(3)	55(3)	44(2)	-1(2)	4(2)	-2(3)
C(19)	59(3)	51(3)	51(2)	-8(2)	8(2)	-14(2)
C(20)	40(2)	40(2)	51(2)	-4(2)	6(2)	-13(2)
C(21)	57(3)	61(3)	56(3)	-6(2)	6(2)	-20(2)
C(22)	64(3)	56(3)	67(3)	5(3)	-3(3)	3(3)
C(23)	78(3)	45(3)	56(3)	-1(2)	5(3)	-5(3)
C(24)	98(4)	83(4)	55(3)	-21(3)	9(3)	11(4)
C(11)	176(9)	237(13)	51(4)	18(6)	-10(4)	-144(10)
C(12)	88(4)	111(5)	54(3)	1(3)	-8(3)	-43(4)
C(13)	100(4)	54(3)	50(3)	7(2)	-30(3)	-17(3)

Table 8.

Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $[\text{PdL}^6\text{Cl}]$  (2B)

	x	y	z	U(eq)
H(3A)	7264(7)	1531(3)	802(2)	79
H(4A)	7953(7)	867(3)	1567(3)	93
H(5A)	7138(7)	1046(3)	2528(3)	94
H(6A)	5740(6)	1946(3)	2748(2)	79
H(7A)	3932(6)	2442(2)	-62(2)	71
H(7B)	5229(6)	1942(2)	-36(2)	71
H(8A)	4748(10)	935(3)	290(4)	136
H(9A)	3041(21)	215(5)	728(6)	247
H(10A)	954(19)	563(9)	1217(5)	255
H(17A)	4200(5)	3081(2)	3641(2)	64
H(18A)	2968(6)	3819(2)	4192(2)	67
H(21A)	411(5)	5014(3)	2790(2)	69
H(22A)	178(6)	5014(2)	1767(2)	75
H(23A)	1531(6)	4305(2)	1200(2)	71
H(24A)	850(7)	5139(3)	4539(2)	118
H(24B)	2495(7)	4875(3)	4484(2)	118
H(24C)	1145(7)	4410(3)	4591(2)	118
H(11A)	322(12)	1626(7)	1204(3)	186
H(12A)	1892(7)	2344(4)	744(2)	102

APPENDIX : III

Table 1.

Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^{\circ}$ ] for  $[\text{PdL}^1(\text{PPh}_3)]$ , (1B).

Bond lengths	( $\text{\AA}$ )	Bond lengths	( $\text{\AA}$ )
Pd(1)-C(8)	2.015(4)	Pd(1)-N(1)	2.032(3)
Pd(1)-O(1)	2.057(2)	Pd(1)-P(1)	2.2816(9)
P(1)-C(24)	1.818(4)	P(1)-C(18)	1.822(4)
P(1)-C(30)	1.835(4)	O(1)-C(12)	1.299(4)
N(1)-N(2)	1.276(4)	N(1)-C(1)	1.430(4)
N(2)-C(11)	1.374(4)	C(1)-C(2)	1.369(5)
C(1)-C(9)	1.416(5)	C(2)-C(3)	1.407(5)
C(2)-H(2B)	0.93	C(3)-C(4)	1.362(5)
C(3)-H(3A)	0.93	C(4)-C(10)	1.414(5)
C(4)-H(4A)	0.93	C(5)-C(6)	1.360(5)
C(5)-C(10)	1.416(5)	C(5)-H(5A)	0.93
C(6)-C(7)	1.409(5)	C(6)-H(6A)	0.93
C(7)-C(8)	1.380(5)	C(7)-H(7A)	0.93
C(8)-C(9)	1.436(5)	C(9)-C(10)	1.423(5)
C(11)-C(12)	1.421(5)	C(11)-C(16)	1.430(5)
C(12)-C(13)	1.419(5)	C(13)-C(14)	1.366(5)
C(13)-H(13A)	0.93	C(14)-C(15)	1.409(5)
C(14)-H(14A)	0.93	C(15)-C(16)	1.351(5)
C(15)-C(17)	1.515(5)	C(16)-H(16A)	0.93
C(17)-H(17A)	0.96	C(17)-H(17B)	0.96
C(17)-H(17C)	0.96	C(18)-C(23)	1.383(5)
C(18)-C(19)	1.384(5)	C(19)-C(20)	1.374(5)
C(19)-H(19A)	0.93	C(20)-C(21)	1.381(6)
C(20)-H(20A)	0.93	C(21)-C(22)	1.366(6)
C(21)-H(21A)	0.93	C(22)-C(23)	1.384(5)
C(22)-H(22A)	0.93	C(23)-H(23A)	0.93
C(24)-C(25)	1.386(5)	C(24)-C(29)	1.395(5)
C(25)-C(26)	1.392(5)	C(25)-H(25A)	0.93
C(26)-C(27)	1.374(5)	C(26)-H(26A)	0.93
C(27)-C(28)	1.374(5)	C(27)-H(27A)	0.93
C(28)-C(29)	1.379(5)	C(28)-H(28A)	0.93
C(29)-H(29A)	0.93	C(30)-C(31)	1.376(5)
C(30)-C(35)	1.387(5)	C(31)-C(32)	1.377(5)
C(31)-H(31A)	0.93	C(32)-C(33)	1.368(5)
C(32)-H(32A)	0.93	C(33)-C(34)	1.380(5)
C(33)-H(33A)	0.93	C(34)-C(35)	1.375(5)
C(34)-H(34A)	0.93	C(35)-H(35A)	0.93
<b>Bond angles</b>			
	( $^{\circ}$ )	<b>Bond angles</b>	( $^{\circ}$ )
C(8)-Pd(1)-N(1)	82.93(13)	C(8)-Pd(1)-O(1)	172.41(12)
N(1)-Pd(1)-O(1)	89.49(10)	C(8)-Pd(1)-P(1)	96.69(11)
N(1)-Pd(1)-P(1)	178.14(8)	O(1)-Pd(1)-P(1)	90.87(7)
C(24)-P(1)-C(18)	107.1(2)	C(24)-P(1)-C(30)	102.6(2)
C(18)-P(1)-C(30)	103.0(2)	C(24)-P(1)-Pd(1)	114.45(12)
C(18)-P(1)-Pd(1)	113.81(12)	C(30)-P(1)-Pd(1)	114.69(11)
C(12)-O(1)-Pd(1)	123.3(2)	N(2)-N(1)-C(1)	115.7(3)
N(2)-N(1)-Pd(1)	130.6(2)	C(1)-N(1)-Pd(1)	113.6(2)
N(1)-N(2)-C(11)	121.2(3)	C(2)-C(1)-C(9)	122.3(3)
C(2)-C(1)-N(1)	124.6(3)	C(9)-C(1)-N(1)	113.1(3)
C(1)-C(2)-C(3)	118.7(4)	C(1)-C(2)-H(2B)	120.7(2)
C(3)-C(2)-H(2B)	120.7(2)	C(4)-C(3)-C(2)	120.8(4)
C(4)-C(3)-H(3A)	119.6(2)	C(2)-C(3)-H(3A)	119.6(2)
C(3)-C(4)-C(10)	121.7(4)	C(3)-C(4)-H(4A)	119.1(2)
C(10)-C(4)-H(4A)	119.1(2)	C(6)-C(5)-C(10)	119.6(4)
C(6)-C(5)-H(5A)	120.2(2)	C(10)-C(5)-H(5A)	120.2(2)
C(5)-C(6)-C(7)	121.9(4)	C(5)-C(6)-H(6A)	119.0(2)
C(7)-C(6)-H(6A)	119.0(2)	C(8)-C(7)-C(6)	121.9(4)
C(8)-C(7)-H(7A)	119.0(2)	C(6)-C(7)-H(7A)	119.0(2)

C(7)-C(8)-C(9)	116.1(3)	C(7)-C(8)-Pd(1)	133.2(3)
C(9)-C(8)-Pd(1)	110.8(2)	C(1)-C(9)-C(10)	118.4(3)
C(1)-C(9)-C(8)	119.2(3)	C(10)-C(9)-C(8)	122.4(3)
C(4)-C(10)-C(5)	123.9(4)	C(4)-C(10)-C(9)	118.1(3)
C(5)-C(10)-C(9)	118.0(3)	N(2)-C(11)-C(12)	128.2(3)
N(2)-C(11)-C(16)	112.4(3)	C(12)-C(11)-C(16)	119.4(3)
O(1)-C(12)-C(13)	117.5(3)	O(1)-C(12)-C(11)	126.8(3)
C(13)-C(12)-C(11)	115.7(3)	C(14)-C(13)-C(12)	122.6(4)
C(14)-C(13)-H(13A)	118.7(2)	C(12)-C(13)-H(13A)	118.7(2)
C(13)-C(14)-C(15)	121.9(4)	C(13)-C(14)-H(14A)	119.0(2)
C(15)-C(14)-H(14A)	119.0(2)	C(16)-C(15)-C(14)	116.7(3)
C(16)-C(15)-C(17)	121.8(4)	C(14)-C(15)-C(17)	121.5(4)
C(15)-C(16)-C(11)	123.6(3)	C(15)-C(16)-H(16A)	118.2(2)
C(11)-C(16)-H(16A)	118.2(2)	C(15)-C(17)-H(17A)	109.5(2)
C(15)-C(17)-H(17B)	109.5(2)	H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(15)-C(17)-H(17C)	109.5(2)	H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5	C(23)-C(18)-C(19)	118.8(3)
C(23)-C(18)-P(1)	124.0(3)	C(19)-C(18)-P(1)	117.2(3)
C(20)-C(19)-C(18)	121.0(4)	C(20)-C(19)-H(19A)	119.5(3)
C(18)-C(19)-H(19A)	119.5(2)	C(19)-C(20)-C(21)	119.7(4)
C(19)-C(20)-H(20A)	120.1(3)	C(21)-C(20)-H(20A)	120.1(3)
C(22)-C(21)-C(20)	119.8(4)	C(22)-C(21)-H(21A)	120.1(3)
C(20)-C(21)-H(21A)	120.1(3)	C(21)-C(22)-C(23)	120.6(4)
C(21)-C(22)-H(22A)	119.7(3)	C(23)-C(22)-H(22A)	119.7(3)
C(18)-C(23)-C(22)	120.0(4)	C(18)-C(23)-H(23A)	120.0(2)
C(22)-C(23)-H(23A)	120.0(3)	C(25)-C(24)-C(29)	118.7(3)
C(25)-C(24)-P(1)	120.2(3)	C(29)-C(24)-P(1)	121.1(3)
C(24)-C(25)-C(26)	120.2(4)	C(24)-C(25)-H(25A)	119.9(2)
C(26)-C(25)-H(25A)	119.9(2)	C(27)-C(26)-C(25)	120.2(4)
C(27)-C(26)-H(26A)	119.9(2)	C(25)-C(26)-H(26A)	119.9(2)
C(26)-C(27)-C(28)	120.2(4)	C(26)-C(27)-H(27A)	119.9(2)
C(28)-C(27)-H(27A)	119.9(3)	C(27)-C(28)-C(29)	119.9(4)
C(27)-C(28)-H(28A)	120.0(3)	C(29)-C(28)-H(28A)	120.0(2)
C(28)-C(29)-C(24)	120.8(4)	C(28)-C(29)-H(29A)	119.6(2)
C(24)-C(29)-H(29A)	119.6(2)	C(31)-C(30)-C(35)	118.5(3)
C(31)-C(30)-P(1)	122.6(3)	C(35)-C(30)-P(1)	118.9(3)
C(30)-C(31)-C(32)	120.6(4)	C(30)-C(31)-H(31A)	119.7(2)
C(32)-C(31)-H(31A)	119.7(3)	C(33)-C(32)-C(31)	120.9(4)
C(33)-C(32)-H(32A)	119.6(3)	C(31)-C(32)-H(32A)	119.6(3)
C(32)-C(33)-C(34)	119.0(4)	C(32)-C(33)-H(33A)	120.5(3)
C(34)-C(33)-H(33A)	120.5(3)	C(35)-C(34)-C(33)	120.3(4)
C(35)-C(34)-H(34A)	119.8(3)	C(33)-C(34)-H(34A)	119.8(3)
C(34)-C(35)-C(30)	120.7(4)	C(34)-C(35)-H(35A)	119.7(3)
C(30)-C(35)-H(35A)	119.7(2)		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 2.

Atomic Coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^1(\text{PPh}_3)]$ , (1B).

	x	y	z	U(eq)
Pd(1)	2369(1)	2327(1)	1018(1)	35(1)
P(1)	3338(1)	1408(1)	522(1)	36(1)
O(1)	2461(2)	3827(2)	445(2)	46(1)
N(1)	1544(2)	3152(3)	1495(2)	36(1)
N(2)	1194(2)	4167(3)	1371(2)	39(1)
C(1)	1324(2)	2466(3)	2059(2)	37(1)
C(2)	844(3)	2855(3)	2509(2)	47(1)
C(3)	684(3)	2090(4)	3049(2)	52(1)
C(4)	973(3)	973(4)	3107(2)	50(1)
C(5)	1774(3)	-607(3)	2680(2)	52(1)
C(6)	2248(3)	-937(3)	2218(2)	53(1)
C(7)	2453(3)	-159(3)	1707(2)	48(1)
C(8)	2183(2)	981(3)	1646(2)	39(1)
C(9)	1662(2)	1321(3)	2120(2)	37(1)
C(10)	1461(3)	545(3)	2644(2)	42(1)
C(11)	1387(2)	4924(3)	869(2)	37(1)
C(12)	1997(2)	4759(3)	455(2)	38(1)
C(13)	2107(3)	5726(3)	16(2)	51(1)
C(14)	1629(3)	6738(3)	-38(2)	53(1)
C(15)	992(3)	6891(3)	341(2)	44(1)
C(16)	899(3)	5998(3)	787(2)	44(1)
C(17)	433(3)	8000(3)	246(3)	57(1)
C(18)	4293(2)	544(3)	1298(2)	39(1)
C(19)	4808(3)	1034(4)	2072(2)	56(1)
C(20)	5561(3)	457(4)	2685(3)	69(1)
C(21)	5791(3)	-642(5)	2538(3)	77(2)
C(22)	5280(3)	-1141(4)	1780(3)	69(1)
C(23)	4532(3)	-555(3)	1156(3)	51(1)
C(24)	2689(2)	480(3)	-366(2)	37(1)
C(25)	1737(3)	165(3)	-567(2)	43(1)
C(26)	1232(3)	-518(3)	-1260(2)	52(1)
C(27)	1677(3)	-891(3)	-1745(2)	56(1)
C(28)	2620(3)	-582(4)	-1554(3)	62(1)
C(29)	3124(3)	100(3)	-870(2)	53(1)
C(30)	4014(3)	2362(3)	136(2)	38(1)
C(31)	5010(3)	2467(3)	523(3)	55(1)
C(32)	5486(3)	3192(4)	209(3)	70(1)
C(33)	4983(3)	3825(4)	-492(3)	61(1)
C(34)	3985(3)	3723(3)	-887(3)	56(1)
C(35)	3505(3)	3000(3)	-577(2)	48(1)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

Table 3.

Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^1(\text{PPh}_3)]$ , (1B).

The anisotropic displacement factor exponent takes the form :

$$-2\pi^2 [ (ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^* b^* U_{12} ]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd(1)	37(1)	36(1)	34(1)	-2(1)	19(1)	0(1)
P(1)	36(1)	38(1)	36(1)	-1(1)	17(1)	3(1)
O(1)	57(3)	40(2)	55(2)	7(1)	37(1)	9(1)
N(1)	40(2)	36(2)	36(2)	-3(2)	21(2)	-3(1)
N(2)	44(2)	40(2)	39(2)	-2(2)	23(2)	2(2)
C(1)	38(2)	41(2)	33(2)	-1(2)	16(2)	-7(2)
C(2)	55(2)	42(2)	53(3)	-4(2)	32(2)	-1(2)
C(3)	60(3)	62(3)	48(3)	-4(2)	37(2)	-11(2)
C(4)	54(3)	58(3)	42(3)	7(2)	24(2)	-11(2)
C(5)	60(3)	48(3)	49(3)	10(2)	24(2)	-6(2)
C(6)	66(3)	39(2)	55(3)	6(2)	27(2)	2(2)
C(7)	55(2)	45(3)	50(3)	-1(2)	28(2)	-1(2)
C(8)	36(2)	39(2)	38(2)	-3(2)	11(2)	-5(2)
C(9)	31(2)	42(2)	35(2)	-2(2)	13(2)	-5(2)
C(10)	43(2)	47(3)	34(2)	0(2)	15(2)	-7(2)
C(11)	41(2)	37(2)	36(2)	0(2)	19(2)	-2(2)
C(12)	41(2)	41(2)	36(2)	-1(2)	19(2)	-2(2)
C(13)	58(3)	54(3)	53(3)	6(2)	36(2)	2(2)
C(14)	68(3)	42(2)	58(3)	13(2)	35(2)	3(2)
C(15)	47(2)	42(2)	41(2)	0(2)	15(2)	1(2)
C(16)	50(2)	44(2)	48(3)	-5(2)	30(2)	1(2)
C(17)	65(3)	46(3)	61(3)	6(2)	27(2)	7(2)
C(18)	38(2)	44(2)	37(2)	2(2)	18(2)	7(2)
C(19)	57(3)	59(3)	47(3)	-1(2)	19(2)	13(2)
C(20)	64(3)	98(4)	37(3)	9(3)	13(2)	18(3)
C(21)	68(3)	99(4)	61(4)	34(3)	25(3)	39(3)
C(22)	81(3)	58(3)	73(4)	22(3)	38(3)	31(3)
C(23)	59(3)	48(3)	47(3)	1(2)	25(2)	6(2)
C(24)	42(2)	36(2)	31(2)	3(2)	12(2)	3(2)
C(25)	45(2)	46(2)	39(2)	5(2)	20(2)	-1(2)
C(26)	50(2)	55(3)	43(3)	4(2)	10(2)	-11(2)
C(27)	71(3)	49(3)	38(3)	-7(2)	14(2)	-7(2)
C(28)	67(3)	76(3)	49(3)	-17(2)	30(2)	2(2)
C(29)	44(2)	68(3)	48(3)	-12(2)	21(2)	-2(2)
C(30)	40(2)	35(2)	42(2)	-2(2)	22(2)	4(2)
C(31)	44(2)	62(3)	58(3)	7(2)	20(2)	-1(2)
C(32)	48(3)	79(3)	81(4)	3(3)	28(3)	-12(3)
C(33)	72(3)	57(3)	69(3)	-4(3)	44(3)	-14(2)
C(34)	76(3)	49(3)	52(3)	7(2)	35(3)	1(2)
C(35)	46(2)	54(3)	47(3)	3(2)	23(2)	6(2)

Table 4.

Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $[\text{PdL}^1(\text{PPh}_3)]$ , (1B).

	x	y	z	U (eq)
H(2B)	628(3)	3611(3)	2457(2)	57
H(3A)	377(3)	2349(4)	3371(2)	62
H(4A)	846(3)	480(4)	3460(2)	60
H(5A)	1656(3)	-1136(3)	3018(2)	62
H(6A)	2443(3)	-1698(3)	2240(2)	64
H(7A)	2779(3)	-421(3)	1402(2)	58
H(13A)	2521(3)	5668(3)	-244(2)	61
H(14A)	1727(3)	7344(3)	-335(2)	64
H(16A)	496(3)	6087(3)	1055(2)	53
H(17A)	595(3)	8527(3)	-90(3)	86
H(17B)	601(3)	8332(3)	784(3)	86
H(17C)	-252(3)	7843(3)	-15(3)	86
H(19A)	4642(3)	1765(4)	2179(2)	67
H(20A)	5915(3)	805(4)	3196(3)	83
H(21A)	6292(3)	-1042(5)	2953(3)	92
H(22A)	5436(3)	-1882(4)	1683(3)	83
H(23A)	4191(3)	-900(3)	642(3)	61
H(25A)	1434(3)	411(3)	-239(2)	51
H(26A)	591(3)	-723(3)	-1396(2)	63
H(27A)	1339(3)	-1355(3)	-2204(2)	67
H(28A)	2918(3)	-831(4)	-1885(3)	74
H(29A)	3762(3)	309(3)	-744(2)	64
H(31A)	5364(3)	2044(3)	1001(3)	66
H(32A)	6159(3)	3253(4)	478(3)	83
H(33A)	5309(3)	4316(4)	-699(3)	74
H(34A)	3635(3)	4146(3)	-1366(3)	67
H(35A)	2832(3)	2938(3)	-848(2)	58

Table 5.

Bond lengths [Å] and angles [°] for [PdL<sup>1</sup>( $\gamma$ -pic)], (2B).

<i>Bond lengths</i>	(Å)	<i>Bond lengths</i>	(Å)
Pd(1)-N(1)	1.976(4)	Pd(1)-C(8)	1.987(4)
Pd(1)-O(1)	2.062(3)	Pd(1)-N(3)	2.068(4)
C(1)-C(2)	1.373(5)	C(1)-C(9)	1.413(5)
C(1)-N(1)	1.430(5)	C(2)-C(3)	1.403(6)
C(2)-H(2A)	0.93	C(3)-C(4)	1.371(6)
C(3)-H(3A)	0.93	C(4)-C(10)	1.406(6)
C(4)-H(4A)	0.93	C(5)-C(6)	1.344(7)
C(5)-C(10)	1.414(6)	C(5)-H(5A)	0.93
C(6)-C(7)	1.415(6)	C(6)-H(6A)	0.93
C(7)-C(8)	1.373(5)	C(7)-H(7A)	0.93
C(8)-C(9)	1.424(5)	C(9)-C(10)	1.418(5)
N(1)-N(2)	1.271(5)	N(2)-C(11)	1.377(5)
C(11)-C(16)	1.416(5)	C(11)-C(12)	1.439(5)
C(12)-O(1)	1.290(4)	C(12)-C(13)	1.416(5)
C(13)-C(14)	1.363(6)	C(13)-H(13A)	0.93
C(14)-C(15)	1.405(6)	C(14)-H(14A)	0.93
C(15)-C(16)	1.357(5)	C(15)-C(17)	1.516(6)
C(16)-H(16A)	0.93	C(17)-H(17A)	0.96
C(17)-H(17B)	0.96	C(17)-H(17C)	0.96
N(3)-C(18)	1.331(6)	N(3)-C(22)	1.340(6)
C(18)-C(19)	1.379(6)	C(18)-H(18A)	0.93
C(19)-C(20)	1.374(6)	C(19)-H(19A)	0.93
C(20)-C(21)	1.375(7)	C(20)-C(23)	1.517(7)
C(21)-C(22)	1.372(7)	C(21)-H(21A)	0.93
C(22)-H(22A)	0.93	C(23)-H(23A)	0.96
C(23)-H(23B)	0.96	C(23)-H(23C)	0.96
<i>Bond angles</i>			
	(°)	<i>Bond angles</i>	(°)
N(1)-Pd(1)-C(8)	83.1(2)	N(1)-Pd(1)-O(1)	91.12(12)
C(8)-Pd(1)-O(1)	173.96(13)	N(1)-Pd(1)-N(3)	177.36(12)
C(8)-Pd(1)-N(3)	97.3(2)	O(1)-Pd(1)-N(3)	88.39(12)
C(2)-C(1)-C(9)	121.9(4)	C(2)-C(1)-N(1)	125.3(4)
C(9)-C(1)-N(1)	112.8(3)	C(1)-C(2)-C(3)	118.4(4)
C(1)-C(2)-H(2A)	120.8(3)	C(3)-C(2)-H(2A)	120.8(3)
C(4)-C(3)-C(2)	121.4(4)	C(4)-C(3)-H(3A)	119.3(3)
C(2)-C(3)-H(3A)	119.3(3)	C(3)-C(4)-C(10)	121.0(4)
C(3)-C(4)-H(4A)	119.5(3)	C(10)-C(4)-H(4A)	119.5(3)
C(6)-C(5)-C(10)	120.7(4)	C(6)-C(5)-H(5A)	119.7(3)
C(10)-C(5)-H(5A)	119.7(3)	C(5)-C(6)-C(7)	121.8(5)
C(5)-C(6)-H(6A)	119.1(3)	C(7)-C(6)-H(6A)	119.1(3)
C(8)-C(7)-C(6)	121.3(4)	C(8)-C(7)-H(7A)	119.4(3)
C(6)-C(7)-H(7A)	119.4(3)	C(7)-C(8)-C(9)	116.2(4)
C(7)-C(8)-Pd(1)	131.9(3)	C(9)-C(8)-Pd(1)	111.8(3)
C(1)-C(9)-C(10)	118.9(4)	C(1)-C(9)-C(8)	117.7(4)
C(10)-C(9)-C(8)	123.4(4)	C(4)-C(10)-C(5)	124.9(4)
C(4)-C(10)-C(9)	118.4(4)	C(5)-C(10)-C(9)	116.6(4)
N(2)-N(1)-C(1)	115.4(3)	N(2)-N(1)-Pd(1)	129.9(3)
C(1)-N(1)-Pd(1)	114.6(3)	N(1)-N(2)-C(11)	122.4(3)
N(2)-C(11)-C(16)	112.6(3)	C(9)-C(10)-C(8)	118(2)
C(16)-C(11)-C(12)	119.6(4)	N(2)-C(11)-C(12)	127.8(4)
O(1)-C(12)-C(11)	125.5(3)	O(1)-C(12)-C(13)	119.1(4)
C(14)-C(13)-C(12)	122.5(4)	C(13)-C(12)-C(11)	115.4(4)
C(12)-C(13)-H(13A)	118.8(2)	C(14)-C(13)-H(13A)	118.8(3)
C(13)-C(14)-H(14A)	118.8(3)	C(13)-C(14)-C(15)	122.4(4)
C(16)-C(15)-C(14)	116.8(4)	C(15)-C(14)-H(14A)	118.8(2)
C(14)-C(15)-C(17)	121.1(4)	C(16)-C(15)-C(17)	122.2(4)
C(15)-C(16)-H(16A)	118.3(3)	C(15)-C(16)-C(11)	123.4(4)
C(15)-C(17)-H(17A)	109.5(3)	C(11)-C(16)-H(16A)	118.3(2)
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5	C(15)-C(17)-H(17B)	109.5(2)
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5	C(15)-C(17)-H(17C)	109.5(3)
C(12)-O(1)-Pd(1)	123.0(2)	H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5

C(18)-N(3)-Pd(1)	117.1(3)	C(18)-N(3)-C(22)	116.4(4)
N(3)-C(18)-C(19)	123.2(4)	C(22)-N(3)-Pd(1)	126.6(3)
C(19)-C(18)-H(18A)	118.4(3)	N(3)-C(18)-H(18A)	118.4(2)
C(20)-C(19)-H(19A)	119.8(3)	C(20)-C(19)-C(18)	120.4(4)
C(19)-C(20)-C(21)	116.4(4)	C(18)-C(19)-H(19A)	119.8(3)
C(21)-C(20)-C(23)	122.1(5)	C(19)-C(20)-C(23)	121.5(5)
C(22)-C(21)-H(21A)	119.7(3)	C(22)-C(21)-C(20)	120.5(4)
N(3)-C(22)-C(21)	123.1(5)	C(20)-C(21)-H(21A)	119.7(3)
C(21)-C(22)-H(22A)	118.4(3)	N(3)-C(22)-H(22A)	118.4(3)
C(20)-C(23)-H(23B)	109.5(3)	C(20)-C(23)-H(23A)	109.5(3)
C(20)-C(23)-H(23C)	109.5(3)	H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5	H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 6.

Atomic Coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^1(\gamma\text{-pic})]$ , (2B).

	x	y	z	U(eq)
Pd(1)	3777(1)	56(1)	7406(1)	34(1)
C(1)	2086(3)	868(5)	7910(2)	37(1)
C(2)	1156(3)	1084(5)	7943(3)	46(1)
C(3)	987(3)	1929(6)	8602(3)	54(1)
C(4)	1727(4)	2495(6)	9211(3)	55(1)
C(5)	3491(4)	2804(6)	9791(3)	55(1)
C(6)	4380(4)	2589(6)	9706(3)	58(1)
C(7)	4547(3)	1785(6)	9030(2)	50(1)
C(8)	3806(3)	1165(5)	8434(2)	38(1)
C(9)	2868(3)	1422(5)	8529(2)	39(1)
C(10)	2684(3)	2242(5)	9197(2)	45(1)
N(1)	2378(3)	114(4)	7266(2)	35(1)
N(2)	1701(2)	-344(4)	6679(2)	39(1)
C(11)	1864(3)	-1094(5)	6014(2)	36(1)
C(12)	2770(3)	-1438(5)	5852(2)	38(1)
C(13)	2720(3)	-2277(6)	5124(2)	47(1)
C(14)	1873(3)	-2739(6)	4613(3)	52(1)
C(15)	985(3)	-2386(5)	4764(2)	46(1)
C(16)	1006(3)	-1562(5)	5451(2)	44(1)
C(17)	56(3)	-2920(7)	4184(3)	66(1)
O(1)	3597(2)	-1023(4)	6302(2)	43(1)
N(3)	5235(3)	96(4)	7521(2)	39(1)
C(18)	5524(3)	693(6)	6910(3)	44(1)
C(19)	6474(3)	827(6)	6913(3)	48(1)
C(20)	7180(3)	312(5)	7562(3)	48(1)
C(21)	6880(4)	-340(6)	8186(3)	52(1)
C(22)	5923(3)	-426(6)	8151(3)	47(1)
C(23)	8231(4)	456(7)	7583(4)	69(2)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.



**Table 7.**  
Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^1(\gamma\text{-pic})]$ , (2B).

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^*b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd(1)	34(1)	38(1)	31(1)	-1(1)	10(1)	-1(1)
C(1)	43(3)	34(2)	38(2)	1(2)	19(2)	1(2)
C(2)	46(3)	49(3)	47(2)	3(2)	18(2)	1(2)
C(3)	50(3)	56(3)	66(3)	-7(2)	32(3)	2(2)
C(4)	65(3)	58(3)	52(3)	-9(2)	32(3)	0(3)
C(5)	68(4)	58(3)	43(3)	-12(2)	19(3)	-2(2)
C(6)	62(3)	67(3)	43(3)	-17(2)	9(2)	-10(3)
C(7)	47(3)	57(3)	44(3)	-10(2)	12(2)	-6(2)
C(8)	51(3)	33(2)	34(2)	0(2)	16(2)	-2(2)
C(9)	45(3)	35(2)	38(2)	3(2)	15(2)	-1(2)
C(10)	57(3)	45(3)	38(2)	-3(2)	20(2)	-2(2)
N(1)	37(2)	38(2)	32(2)	1(2)	11(2)	-2(1)
N(2)	36(2)	42(2)	38(2)	2(2)	11(2)	-1(2)
C(11)	38(2)	33(2)	35(2)	2(2)	7(2)	-1(2)
C(12)	41(3)	39(2)	33(2)	2(2)	8(2)	3(2)
C(13)	45(3)	59(3)	39(2)	-6(2)	12(2)	5(2)
C(14)	58(3)	58(3)	38(3)	-10(2)	7(2)	4(2)
C(15)	46(3)	45(2)	41(3)	-3(2)	-1(2)	3(2)
C(16)	43(3)	43(2)	44(3)	5(2)	9(2)	0(2)
C(17)	56(3)	72(3)	62(3)	-16(3)	0(3)	3(3)
O(1)	38(2)	56(2)	35(2)	-8(1)	10(1)	0(1)
N(3)	38(2)	44(2)	33(2)	-3(2)	7(2)	0(2)
C(18)	38(3)	55(3)	38(2)	2(2)	7(2)	-1(2)
C(19)	43(3)	52(3)	53(3)	-2(2)	17(2)	-4(2)
C(20)	40(3)	40(3)	61(3)	-19(2)	10(2)	0(2)
C(21)	46(3)	50(3)	52(3)	-7(2)	-4(2)	9(2)
C(22)	51(3)	49(3)	38(3)	1(2)	6(2)	3(2)
C(23)	49(3)	62(3)	96(4)	-29(3)	21(3)	-4(2)

**Table 8.**

Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $[\text{PdL}^1(\gamma\text{-pic})]$ , (2B).

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	650(3)	680(5)	7538(3)	55
H(3A)	360(3)	2110(6)	8625(3)	65
H(4A)	1594(4)	3053(6)	9639(3)	66
H(5A)	3405(4)	3328(6)	10245(3)	67
H(6A)	4898(4)	2979(6)	10102(3)	70
H(7A)	5171(3)	1675(6)	8988(2)	60
H(13A)	3286(3)	-2521(6)	4990(2)	57
H(14A)	1883(3)	-3308(6)	4148(3)	63
H(16A)	427(3)	-1291(5)	5558(2)	53
H(17A)	193(3)	-3481(7)	3738(3)	100
H(17B)	-330(3)	-1914(7)	4009(3)	100
H(17C)	-284(3)	-3703(7)	4438(3)	100
H(18A)	5062(3)	1037(6)	6460(3)	53
H(19A)	6639(3)	1268(6)	6473(3)	58
H(21A)	7329(4)	-726(6)	8635(3)	63
H(22A)	5744(3)	-867(6)	8584(3)	56
H(23A)	8614(4)	35(7)	8081(4)	103
H(23B)	8388(4)	1644(7)	7519(4)	103
H(23C)	8358(4)	-221(7)	7163(4)	103

Table 9.

Bond lengths [Å] and angles [°] for [PdL<sup>2</sup>( $\gamma$ -pic)], (4C).

Bond lengths	(Å)	Bond lengths	(Å)
Pd(1)-N(2)	1.962(13)	Pd(1)-C(2)	1.99(2)
Pd(1)-N(3)	2.038(11)	Pd(1)-O(1)	2.113(12)
N(1)-N(2)	1.28(2)	N(1)-C(1)	1.40(3)
N(2)-C(11)	1.39(2)	N(3)-C(18)	1.31(2)
N(3)-C(22)	1.35(2)	O(1)-C(12)	1.29(2)
C(1)-C(8)	1.35(3)	C(1)-C(2)	1.45(3)
C(2)-C(3)	1.39(3)	C(3)-C(9)	1.43(3)
C(3)-H(3A)	0.93	C(4)-C(5)	1.38(4)
C(4)-C(9)	1.40(4)	C(4)-H(4A)	0.93
C(5)-C(6)	1.30(4)	C(5)-H(5A)	0.93
C(6)-C(7)	1.37(3)	C(6)-H(6A)	0.93
C(7)-C(10)	1.44(3)	C(7)-H(7A)	0.93
C(8)-C(10)	1.41(3)	C(8)-H(8A)	0.93
C(9)-C(10)	1.37(3)	C(11)-C(12)	1.42(3)
C(11)-C(16)	1.43(3)	C(12)-C(13)	1.44(3)
C(13)-C(14)	1.43(4)	C(13)-H(13A)	0.93
C(14)-C(15)	1.38(4)	C(14)-H(14A)	0.93
C(15)-C(16)	1.33(4)	C(15)-C(17)	1.48(4)
C(16)-H(16A)	0.93	C(17)-H(17A)	0.96
C(17)-H(17B)	0.96	C(17)-H(17C)	0.96
C(18)-C(19)	1.37(2)	C(18)-H(18A)	0.93
C(19)-C(20)	1.36(3)	C(19)-H(19A)	0.93
C(20)-C(21)	1.41(3)	C(20)-C(23)	1.52(2)
C(21)-C(22)	1.34(2)	C(21)-H(21A)	0.93
C(22)-H(22A)	0.93	C(23)-H(23A)	0.96
C(23)-H(23B)	0.96	C(23)-H(23C)	0.96
<i>Bond angles</i>			
N(2)-Pd(1)-C(2)	79.7(8)	N(2)-Pd(1)-N(3)	177(2)
C(2)-Pd(1)-N(3)	102.1(8)	N(2)-Pd(1)-O(1)	82.0(7)
C(2)-Pd(1)-O(1)	161.7(7)	N(3)-Pd(1)-O(1)	96.1(6)
N(2)-N(1)-C(1)	110(2)	N(1)-N(2)-C(11)	124(2)
N(1)-N(2)-Pd(1)	121.9(14)	C(11)-N(2)-Pd(1)	113.9(13)
C(18)-N(3)-C(22)	114.8(14)	C(18)-N(3)-Pd(1)	126.4(14)
C(22)-N(3)-Pd(1)	118.8(13)	C(12)-O(1)-Pd(1)	107.7(12)
C(8)-C(1)-N(1)	120(2)	C(8)-C(1)-C(2)	121(2)
N(1)-C(1)-C(2)	118(2)	C(3)-C(2)-C(1)	118(2)
C(3)-C(2)-Pd(1)	132.4(14)	C(1)-C(2)-Pd(1)	110(2)
C(2)-C(3)-C(9)	120(2)	C(2)-C(3)-H(3A)	120.2(11)
C(9)-C(3)-H(3A)	120.2(14)	C(5)-C(4)-C(9)	119(3)
C(5)-C(4)-H(4A)	120(2)	C(9)-C(4)-H(4A)	120(2)
C(6)-C(5)-C(4)	123(3)	C(6)-C(5)-H(5A)	118(2)
C(4)-C(5)-H(5A)	118(2)	C(5)-C(6)-C(7)	119(2)
C(5)-C(6)-H(6A)	120(2)	C(7)-C(6)-H(6A)	120(2)
C(6)-C(7)-C(10)	120(2)	C(6)-C(7)-H(7A)	120(2)
C(10)-C(7)-H(7A)	120(2)	C(1)-C(8)-C(10)	122(2)
C(1)-C(8)-H(8A)	119.3(13)	C(10)-C(8)-H(8A)	119.3(12)
C(10)-C(9)-C(4)	119(2)	C(10)-C(9)-C(3)	122(2)
C(4)-C(9)-C(3)	120(2)	C(9)-C(10)-C(8)	118(2)
C(9)-C(10)-C(7)	118(2)	C(8)-C(10)-C(7)	123(2)
N(2)-C(11)-C(12)	113(2)	N(2)-C(11)-C(16)	122(2)
C(12)-C(11)-C(16)	125(2)	O(1)-C(12)-C(11)	123(2)
O(1)-C(12)-C(13)	123(2)	C(11)-C(12)-C(13)	114(2)
C(14)-C(13)-C(12)	119(2)	C(14)-C(13)-H(13A)	120(2)
C(12)-C(13)-H(13A)	120(2)	C(15)-C(14)-C(13)	123(2)
C(15)-C(14)-H(14A)	118(2)	C(13)-C(14)-H(14A)	118(2)
C(16)-C(15)-C(14)	120(3)	C(16)-C(15)-C(17)	122(3)
C(14)-C(15)-C(17)	118(3)	C(15)-C(16)-C(11)	119(2)
C(15)-C(16)-H(16A)	121(2)	C(11)-C(16)-H(16A)	120.6(13)
C(15)-C(17)-H(17A)	110(2)	C(15)-C(17)-H(17B)	110(2)
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5	C(15)-C(17)-H(17C)	110(2)
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.47(7)	H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5

N(3)-C(18)-C(19)	123(2)	N(3)-C(18)-H(18A)	118.7(10)
C(19)-C(18)-H(18A)	118.7(12)	C(20)-C(19)-C(18)	122(2)
C(20)-C(19)-H(19A)	118.8(11)	C(18)-C(19)-H(19A)	118.8(12)
C(19)-C(20)-C(21)	115(2)	C(19)-C(20)-C(23)	124(2)
C(21)-C(20)-C(23)	120(2)	C(22)-C(21)-C(20)	118(2)
C(22)-C(21)-H(21A)	120.9(11)	C(20)-C(21)-H(21A)	120.9(11)
C(21)-C(22)-N(3)	126(2)	C(21)-C(22)-H(22A)	116.8(11)
N(3)-C(22)-H(22A)	116.8(10)	C(20)-C(23)-H(23A)	109.5(13)
C(20)-C(23)-H(23B)	110(2)	H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5
C(20)-C(23)-H(23C)	110(2)	H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5		

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 10.

Atomic Coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^2(\gamma\text{-pic})]$ , (4C).

	x	y	z	U(eq)
Pd(1)	6183(1)	8124(1)	5808(1)	58(1)
N(1)	7392(14)	8292(50)	7958(11)	69(1)
N(2)	7603(14)	7926(44)	7061(11)	55(5)
N(3)	4727(12)	8193(59)	4489(9)	54(3)
O(1)	7725(14)	7172(18)	5111(10)	71(4)
C(1)	6087(23)	8949(24)	7868(150)	63(5)
C(2)	5203(22)	8981(24)	6859(13)	59(5)
C(3)	3919(22)	9652(26)	6781(15)	67(6)
C(4)	2197(37)	10872(350)	7613(24)	94(9)
C(5)	1771(31)	11313(33)	8499(26)	93(9)
C(6)	2560(38)	11339(32)	9407(21)	99(9)
C(7)	3849(29)	10738(28)	9524(17)	87(8)
C(8)	5671(23)	9542(29)	8709(16)	74(6)
C(9)	3504(23)	10235(26)	7689(17)	66(5)
C(10)	4358(24)	10187(28)	8641(15)	66(6)
C(11)	8817(19)	7298(25)	6885(16)	60(5)
C(12)	8778(23)	6927(28)	5831(20)	75(6)
C(13)	9985(24)	6105934	5650(20)	92(7)
C(14)	11078(22)	5791(34)	6504(30)	108(11)
C(15)	11062(33)	6315(385)	7498(18)	94(9)
C(16)	9967(22)	7044(27)	7709(19)	74(6)
C(17)	12288(28)	5992(41)	8303(27)	111(11)
C(18)	3463(21)	7764(41)	4400(13)	71(9)
C(19)	2560(190)	7755(47)	3469(14)	71(9)
C(20)	2911(17)	8204(55)	2569(12)	65(5)
C(21)	4241(20)	8798(23)	2670(15)	63(5)
C(22)	5054(18)	8747(27)	3605(14)	68(7)
C(23)	1946(17)	8266(63)	1527(12)	88(8)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

Table 11.

Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PdL}^2(\gamma\text{-pic})]$ , (4C).

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [(ha')^2U_{11} + \dots + 2hka'b'U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd(1)	71(1)	53(1)	51(1)	0(2)	16(1)	-2(2)
N(1)	78(10)	76(15)	51(8)	-16(15)	6(7)	-16(18)
N(2)	55(8)	29(13)	71(9)	5(11)	-8(6)	-11(12)
N(3)	54(8)	73(10)	38(7)	6(20)	14(6)	10(20)
O(1)	77(10)	78(9)	63(9)	-10(7)	25(8)	9(7)
C(1)	99(17)	37(9)	57(13)	7(9)	23(12)	-2(10)
C(2)	99(15)	42(10)	39(10)	-6(8)	24(10)	-21(10)
C(3)	90(16)	57(12)	63(13)	-19(10)	36(12)	-2(11)
C(4)	129(26)	75(19)	87(20)	-19(16)	44(20)	-21(18)
C(5)	123(23)	54(15)	128(26)	-34(16)	86(21)	-11(14)
C(6)	186(31)	61(15)	71(18)	-4(13)	78(20)	-3(18)
C(7)	136(22)	59(15)	76(17)	-38(12)	49(17)	-8(15)
C(8)	84(16)	78(15)	53(13)	12(11)	1(12)	-14(13)
C(9)	77(15)	42(11)	81(16)	1(11)	25(13)	-2(11)
C(10)	95(17)	58(13)	51(13)	2(10)	31(12)	-19(12)
C(11)	49(12)	56(12)	73(14)	7(10)	6(10)	-9(9)
C(12)	74(15)	59(14)	96(18)	-8(13)	28(14)	0(12)
C(13)	74(16)	102(19)	102(19)	-6(15)	26(15)	6(15)
C(14)	45(14)	81(19)	197(35)	36(21)	22(19)	6(12)
C(15)	134(27)	85(19)	50(14)	26(13)	-10(16)	-38(19)
C(16)	59(14)	57(13)	103(18)	2(12)	10(14)	11(11)
C(17)	86(19)	96(24)	143(30)	51(22)	3(21)	10(18)
C(18)	106(15)	70(27)	46(10)	-7(11)	37(11)	-20(14)
C(19)	61(11)	91(30)	61(12)	5(14)	13(9)	4(14)
C(20)	80(12)	58(12)	53(10)	-19(20)	6(8)	14(24)
C(21)	86(14)	53(13)	56(12)	4(8)	33(11)	-5(10)
C(22)	51(10)	99(22)	51(11)	-17(10)	4(9)	-7(10)
C(23)	74(12)	122(23)	57(10)	-30(23)	-11(9)	29(24)

Table 12.

Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $[\text{PdL}^2(\gamma\text{-pic})]$ , (4C).

	x	y	z	U(eq)
H(3A)	3330(22)	9723(26)	6141(15)	81
H(4A)	1622(37)	10997(35)	6971(24)	113
H(5A)	872(31)	11606(33)	8443(26)	112
H(6A)	2251(38)	11764(32)	9973(21)	118
H(7A)	4401(29)	10683(28)	10179(17)	104
H(8A)	6266(23)	9524(29)	9347(16)	89
H(13A)	10050(24)	5782(34)	4986(20)	110
H(14A)	11836(22)	5208(34)	6384(30)	130
H(16A)	9945(22)	7385(27)	8380(19)	89
H(17A)	12963(28)	5458(41)	7995(27)	167
H(17B)	12083(28)	5196(41)	8817(27)	167
H(17C)	12613(28)	7112(41)	8619(27)	167
H(18A)	3165(21)	7453(41)	4991(13)	85
H(19A)	1676(19)	7431(47)	3453(14)	85
H(21A)	4546(20)	9215(23)	2101(15)	75
H(22A)	5932(18)	9132(27)	3652(14)	82
H(23A)	2421(17)	8615(63)	1008(12)	132
H(23B)	1249(17)	9122(63)	1549(12)	132
H(23C)	1556(17)	7099(63)	1365(12)	132

## APPENDIX : IV

Table 1.

Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ]<sup>a</sup> for  $[\text{PtL}^6\text{Cl}]$ , (1)

<i>Bond lengths</i>	( $\text{\AA}$ )	<i>Bond lengths</i>	( $\text{\AA}$ )
Pt(1)-N(2)	1.945(5)	Pt(1)-C(2)	1.987(6)
Pt(1)-Cl(1)	2.304(2)	Pt(1)-S(1)	2.363(2)
S(1)-C(13)	1.796(7)	S(1)-C(18)	1.835(7)
N(1)-N(2)	1.306(7)	N(1)-C(1)	1.381(8)
N(2)-C(12)	1.420(8)	C(1)-C(10)	1.410(9)
C(1)-C(2)	1.414(9)	C(2)-C(3)	1.413(9)
C(3)-C(4)	1.380(9)	C(3)-H(3A)	0.93
C(4)-O(1)	1.354(8)	C(4)-C(9)	1.430(9)
O(1)-C(11)	1.432(8)	C(11)-H(11A)	0.96
C(11)-H(11B)	0.96	C(11)-H(11C)	0.96
C(5)-C(6)	1.356(11)	C(5)-C(9)	1.403(10)
C(5)-H(5A)	0.93	C(6)-C(7)	1.421(11)
C(6)-H(6A)	0.93	C(7)-C(8)	1.351(10)
C(7)-H(7A)	0.93	C(8)-C(10)	1.409(9)
C(8)-H(8A)	0.93	C(9)-C(10)	1.422(10)
C(12)-C(17)	1.384(9)	C(12)-C(13)	1.386(9)
C(13)-C(14)	1.373(9)	C(14)-C(15)	1.365(9)
C(14)-H(14A)	0.93	C(15)-C(16)	1.364(10)
C(15)-H(15A)	0.93	C(16)-C(17)	1.391(9)
C(16)-H(16A)	0.93	C(17)-H(17A)	0.93
C(18)-C(19)	1.493(10)	C(18)-H(18A)	0.97
C(18)-H(18B)	0.97	C(19)-C(24)	1.380(10)
C(19)-C(20)	1.403(10)	C(20)-C(21)	1.363(12)
C(20)-H(20A)	0.93	C(21)-C(22)	1.374(12)
C(21)-H(21A)	0.93	C(22)-C(23)	1.360(11)
C(22)-H(22A)	0.93	C(23)-C(24)	1.356(11)
C(23)-H(23A)	0.93	C(24)-H(24A)	0.93
<i>Bond angles</i>			
( $^\circ$ )			
N(2)-Pt(1)-C(2)	79.1(2)	N(2)-Pt(1)-Cl(1)	178.4(2)
C(2)-Pt(1)-Cl(1)	99.5(2)	N(2)-Pt(1)-S(1)	85.5(2)
C(2)-Pt(1)-S(1)	164.4(2)	Cl(1)-Pt(1)-S(1)	95.95(6)
C(13)-S(1)-C(18)	100.3(3)	C(13)-S(1)-Pt(1)	96.0(2)
C(18)-S(1)-Pt(1)	107.5(2)	N(2)-N(1)-C(1)	110.9(5)
N(1)-N(2)-C(12)	117.4(6)	N(1)-N(2)-Pt(1)	121.0(4)
C(12)-N(2)-Pt(1)	121.6(4)	N(1)-C(1)-C(10)	119.6(6)
N(1)-C(1)-C(2)	117.6(6)	C(10)-C(1)-C(2)	122.6(6)
C(3)-C(2)-C(1)	118.0(6)	C(3)-C(2)-Pt(1)	130.5(5)
C(1)-C(2)-Pt(1)	111.3(5)	C(4)-C(3)-C(2)	120.1(7)
C(4)-C(3)-H(3A)	120.0(4)	C(2)-C(3)-H(3A)	120.0(4)
O(1)-C(4)-C(3)	124.2(7)	O(1)-C(4)-C(9)	113.3(6)
C(3)-C(4)-C(9)	122.5(7)	C(4)-O(1)-C(11)	119.4(6)
O(1)-C(11)-H(11A)	109.5(4)	O(1)-C(11)-H(11B)	109.5(5)
H(11A)-C(11)-H(11B)	109.5	O(1)-C(11)-H(11C)	109.5(4)
H(11A)-C(11)-H(11C)	109.5	H(11B)-C(11)-H(11C)	109.5
C(6)-C(5)-C(9)	120.4(8)	C(6)-C(5)-H(5A)	119.8(5)
C(9)-C(5)-H(5A)	119.8(5)	C(5)-C(6)-C(7)	119.6(8)
C(5)-C(6)-H(6A)	120.2(5)	C(7)-C(6)-H(6A)	120.2(5)
C(8)-C(7)-C(6)	120.9(8)	C(8)-C(7)-H(7A)	119.5(5)
C(6)-C(7)-H(7A)	119.5(5)	C(7)-C(8)-C(10)	120.8(8)
C(7)-C(8)-H(8A)	119.6(5)	C(10)-C(8)-H(8A)	119.6(4)
C(5)-C(9)-C(10)	120.1(7)	C(5)-C(9)-C(4)	122.0(7)
C(10)-C(9)-C(4)	117.9(7)	C(8)-C(10)-C(1)	123.3(7)
C(8)-C(10)-C(9)	117.9(7)	C(1)-C(10)-C(9)	118.7(7)
C(17)-C(12)-C(13)	120.8(6)	C(17)-C(12)-N(2)	121.6(6)
C(13)-C(12)-N(2)	117.6(6)	C(14)-C(13)-C(12)	119.4(7)
C(14)-C(13)-S(1)	121.3(6)	C(12)-C(13)-S(1)	119.3(5)
C(15)-C(14)-C(13)	120.6(7)	C(15)-C(14)-H(14A)	119.7(4)
C(13)-C(14)-H(14A)	119.7(4)	C(16)-C(15)-C(14)	119.6(7)
C(16)-C(15)-H(15A)	120.2(4)	C(14)-C(15)-H(15A)	120.2(4)
C(15)-C(16)-C(17)	121.6(7)	C(15)-C(16)-H(16A)	119.2(4)
C(17)-C(16)-H(16A)	119.2(4)	C(12)-C(17)-C(16)	117.7(7)

C(12)-C(17)-H(17A)	121.2(4)	C(16)-C(17)-H(17A)	121.2(4)
C(19)-C(18)-S(1)	115.3(5)	C(19)-C(18)-H(18A)	108.4(4)
S(1)-C(18)-H(18A)	108.4(2)	C(19)-C(18)-H(18B)	108.4(4)
S(1)-C(18)-H(18B)	108.4(2)	H(18A)-C(18)-H(18B)	107.5
C(24)-C(19)-C(20)	116.9(8)	C(24)-C(19)-C(18)	122.4(7)
C(20)-C(19)-C(18)	120.7(7)	C(21)-C(20)-C(19)	121.1(9)
C(21)-C(20)-H(20A)	119.5(6)	C(19)-C(20)-H(20A)	119.5(5)
C(20)-C(21)-C(22)	119.9(9)	C(20)-C(21)-H(21A)	120.0(6)
C(22)-C(21)-H(21A)	120.0(5)	C(23)-C(22)-C(21)	119.7(8)
C(23)-C(22)-H(22A)	120.1(6)	C(21)-C(22)-H(22A)	120.1(5)
C(24)-C(23)-C(22)	120.6(9)	C(24)-C(23)-H(23A)	119.7(5)
C(22)-C(23)-H(23A)	119.7(6)	C(23)-C(24)-C(19)	121.7(8)
C(23)-C(24)-H(24A)	119.1(5)	C(19)-C(24)-H(24A)	119.1(5)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms.  
<sup>a</sup> Estimated standard deviations in the least significant digits are given in parentheses.

Table 2.

Atomic coordinates [ $\times 10^4$ ] and equivalent isotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for,  $[\text{PtL}^6\text{Cl}](1)$

Atom	x	y	z	U(eq) <sup>a</sup>
Pt(1)	5059(1)	1131(1)	1110(1)	36(1)
S(1)	6513(2)	-16(2)	1893(1)	41(1)
Cl(1)	5930(2)	3010(2)	1416(1)	61(1)
N(1)	3309(6)	-505(5)	351(3)	43(2)
N(2)	4306(6)	-437(5)	826(3)	38(2)
C(1)	2901(7)	645(6)	126(4)	37(2)
C(2)	3610(6)	1658(6)	414(3)	35(2)
C(3)	3162(7)	2840(6)	218(4)	43(2)
C(4)	2038(8)	2982(6)	-216(4)	45(2)
O(1)	1514(6)	4076(4)	-408(3)	63(2)
C(11)	2074(9)	5170(7)	-94(5)	80(3)
C(5)	162(8)	2122(8)	-944(4)	59(2)
C(6)	-497(9)	1140(9)	-1221(5)	74(3)
C(7)	-3(9)	-53(9)	-1088(4)	72(3)
C(8)	1090(8)	-227(7)	-661(4)	55(2)
C(9)	1314(7)	1966(7)	-514(4)	46(2)
C(10)	1782(7)	773(6)	-348(4)	43(2)
C(12)	4831(7)	-1552(6)	1110(4)	39(2)
C(13)	5870(7)	-1485(6)	1629(4)	42(2)
C(14)	6390(7)	-2541(6)	1930(4)	50(2)
C(15)	5878(8)	-3650(6)	1734(5)	54(2)
C(16)	4892(8)	-3715(6)	1198(5)	56(2)
C(17)	4340(7)	-2670(6)	874(4)	43(2)
C(18)	6058(7)	102(7)	2829(4)	48(2)
C(19)	4728(7)	-219(6)	2907(4)	42(2)
C(20)	4414(10)	-1380(7)	3154(5)	69(3)
C(21)	3200(10)	-1692(8)	3209(5)	69(3)
C(22)	2259(9)	-866(9)	3014(5)	67(3)
C(23)	2549(8)	272(9)	2786(4)	61(2)
C(24)	3755(8)	587(7)	2730(4)	49(2)

<sup>a</sup> U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

Table 3.

Anisotropic displacement parameters [ $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ] for  $[\text{PtL}^6\text{Cl}]$ , (I)  
 The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  
 $-2\pi^2 [ (ha^*)^2 U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12} ]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pt(1)	39(1)	30(1)	39(1)	-2(1)	0(1)	-3(1)
S(1)	34(1)	37(1)	51(1)	-1(1)	0(1)	-4(1)
Cl(1)	60(1)	34(1)	85(2)	-4(1)	-15(1)	-9(1)
N(1)	41(4)	40(4)	46(4)	-2(3)	-1(3)	-3(3)
N(2)	41(4)	30(3)	43(3)	-3(3)	6(3)	2(3)
C(1)	39(5)	40(4)	32(4)	4(3)	2(4)	-3(4)
C(2)	37(4)	40(4)	28(4)	-3(3)	4(3)	-7(4)
C(3)	54(5)	41(4)	32(4)	1(3)	-4(4)	-1(4)
C(4)	56(5)	47(5)	30(4)	9(3)	-1(4)	2(4)
O(1)	77(4)	44(3)	61(4)	8(3)	-23(3)	10(3)
C(11)	105(8)	41(5)	84(7)	-1(5)	-30(6)	11(5)
C(5)	58(6)	59(5)	54(5)	8(4)	-16(5)	-7(5)
C(6)	60(6)	92(8)	63(6)	18(5)	-22(5)	-10(6)
C(7)	73(7)	79(7)	59(6)	1(5)	-25(5)	-21(6)
C(8)	61(6)	53(5)	50(5)	-3(4)	0(5)	-17(5)
C(9)	53(5)	55(5)	29(4)	1(4)	2(4)	-6(4)
C(10)	46(5)	49(5)	34(4)	0(3)	3(4)	0(4)
C(12)	38(5)	35(4)	44(4)	-5(3)	4(4)	-1(4)
C(13)	40(5)	35(4)	52(5)	2(3)	9(4)	3(4)
C(14)	37(5)	45(5)	66(5)	2(4)	-2(4)	6(4)
C(15)	49(5)	39(5)	71(6)	12(4)	-6(5)	1(4)
C(16)	53(6)	33(5)	84(6)	-3(4)	13(5)	-7(4)
C(17)	45(5)	31(4)	52(5)	5(3)	-5(4)	-6(4)
C(18)	46(5)	51(5)	44(4)	-2(4)	-9(4)	-5(4)
C(19)	49(5)	43(4)	33(4)	-1(3)	-1(4)	-2(4)
C(20)	79(7)	52(6)	77(6)	-6(5)	10(6)	7(5)
C(21)	83(7)	58(6)	74(6)	-16(5)	38(6)	-31(6)
C(22)	46(6)	96(7)	59(6)	-17(5)	11(5)	-17(6)
C(23)	47(6)	88(7)	48(5)	7(5)	4(5)	-2(5)
C(24)	57(6)	48(5)	41(5)	1(4)	3(4)	0(5)

Table 4.

Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for  $[\text{PtL}^6\text{Cl}]$ , (I)

	x	y	z	U(eq)
H(3A)	3626(7)	3523(6)	383(4)	51
H(11A)	1597(9)	5864(7)	-283(5)	120
H(11B)	2916(9)	5236(7)	-220(5)	120
H(11C)	2084(9)	5142(7)	432(5)	120
H(5A)	-151(8)	2904(8)	-1040(4)	71
H(6A)	-1269(9)	1246(9)	-1497(5)	88
H(7A)	-437(9)	-723(9)	-1298(4)	87
H(8A)	1389(8)	-1016(7)	-573(4)	66
H(14A)	7099(7)	-2501(6)	2270(4)	60
H(15A)	6199(8)	-4357(6)	1965(5)	64
H(16A)	4582(8)	-4477(6)	1045(5)	68
H(17A)	3664(7)	-2721(6)	512(4)	52
H(18A)	6597(7)	-429(7)	3148(4)	57
H(18B)	6207(7)	933(7)	3000(4)	57
H(20A)	5045(10)	-1947(7)	3282(5)	83
H(21A)	3008(10)	-2463(8)	3378(5)	83
H(22A)	1428(9)	-1083(9)	3038(5)	80
H(23A)	1914(8)	838(9)	2668(4)	73
H(24A)	3931(8)	1366(7)	2567(4)	59

