

ORGANOMETALLICS

Organometallics, 1998, 17(9), 1812-1825, DOI:[10.1021/om970977l](https://doi.org/10.1021/om970977l)

Terms & Conditions

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



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1998 American Chemical Society

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

Crystal Data

Empirical Formula	C38 H30 N2 O8 Pd		
Formula Weight	749.08		
Crystal System	Orthorhombic		
Space group	Pbcn	(No. 60)	
a, b, c [Angstrom]	18.4348(13)	14.505(2)	12.110(2)
alpha, beta, gamma [deg]	90	90	90
V [Ang**3]	3238.2(7)		
Z	4		
D(calc) [g/cm**3]	1.536		
F(000) [Electrons]	1528		
Mu(MoKa) [/cm]	6.3		
Crystal Size [mm]	0.3 x 0.5 x 0.5		

Data Collection

Temperature (K)	150		
Radiation [Angstrom]	MoKa (graphite monochromator) 0.71073		
Theta Min-Max [Deg]	1.11, 27.50		
Scan, (Type & Range) [Deg]	Omega / 2 Theta, 0.77 + 0.35 Tan(Theta)		
Hor. and vert. aperture [mm]	3.22	4.00	
Reference Reflection(s)	6 0 2, 6 -2 0, 2 0 4		
Dataset	-23 : 23 ; -18 : 0 ; 0 : 15		
Tot., Uniq. Data, Rint	8317,	3717,	0.127

Refinement

Npar	224		
wR2, R1, S	0.1465, 0.0796 [for 1662 F > 4 sigma(F)], 0.928		
w	[sigma**2(F)+(0.0300P)**2]**-1, P=(Max(Fo**2,0)+2Fc**2)/3		
Max. and Av. Shift/Error	0.006, 0.000		
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]	-0.67, 0.73		

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal
Parameters of the non-Hydrogen atoms
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
Pd1	0	0.20653(6)	1/4	0.0159(2)
O1	0.1811(3)	0.2463(4)	0.2936(4)	0.0270(17)
O2	0.1804(3)	0.3452(4)	0.1535(5)	0.0300(19)
O3	0.0681(4)	0.5482(5)	0.1889(8)	0.093(4)
O4	0.1259(4)	0.4908(4)	0.3307(6)	0.043(2)
N1	0.0621(3)	0.0913(4)	0.1957(5)	0.017(2)
C1	0.1185(4)	0.1561(6)	0.0313(7)	0.024(3)
C2	0.1769(5)	0.1634(6)	-0.0396(7)	0.034(3)
C3	0.2398(5)	0.1155(6)	-0.0170(8)	0.034(3)
C4	0.2449(5)	0.0642(6)	0.0773(7)	0.033(3)
C5	0.1873(4)	0.0581(6)	0.1506(7)	0.024(3)
C6	0.1232(4)	0.1009(5)	0.1238(6)	0.017(2)
C7	0.0299(4)	0.0134(5)	0.2083(6)	0.018(2)
C8	0.0426(4)	-0.0748(6)	0.1472(6)	0.018(3)
C9	0.0742(4)	-0.0763(6)	0.0428(7)	0.022(3)
C10	0.0859(4)	-0.1577(6)	-0.0093(7)	0.027(3)
C11	0.0656(5)	-0.2402(6)	0.0401(8)	0.036(3)
C12	0.0324(5)	-0.2392(6)	0.1403(8)	0.033(3)
C13	0.0194(4)	-0.1569(5)	0.1976(6)	0.023(3)
C14	0.0691(4)	0.3131(5)	0.2378(8)	0.020(2)
C15	0.1477(4)	0.2982(6)	0.2334(6)	0.018(2)
C16	0.2556(4)	0.3265(6)	0.1399(8)	0.037(3)
C17	0.0403(4)	0.3981(5)	0.2465(11)	0.026(3)
C18	0.0788(4)	0.4873(5)	0.2510(12)	0.034(3)
C19	0.1592(5)	0.5790(6)	0.3502(9)	0.055(4)

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

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang^2]
H1	0.0750(4)	0.1891(6)	0.0164(7)	0.0290
H2	0.1738(5)	0.2012(6)	-0.1035(7)	0.0410
H3	0.2795(5)	0.1181(6)	-0.0669(8)	0.0410
H4	0.2886(5)	0.0321(6)	0.0928(7)	0.0400
H5	0.1921(4)	0.0250(6)	0.2179(7)	0.0290
H9	0.0875(4)	-0.0201(6)	0.0079(7)	0.0270
H10	0.1081(4)	-0.1584(6)	-0.0801(7)	0.0320
H11	0.0750(5)	-0.2972(6)	0.0040(8)	0.0440
H12	0.0176(5)	-0.2959(6)	0.1724(8)	0.0400
H16A	0.2746(8)	0.363(3)	0.078(3)	0.0550
H16B	0.2625(5)	0.2607(10)	0.125(5)	0.0550
H16C	0.2817(6)	0.343(4)	0.2076(19)	0.0550
H19A	0.2061(16)	0.5701(7)	0.387(5)	0.0820
H19B	0.1276(16)	0.6164(17)	0.397(4)	0.0820
H19C	0.167(3)	0.6106(19)	0.2795(10)	0.0820

=====

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

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
Pd1	0.0158(3)	0.0158(3)	0.0162(3)	0	0.0030(6)	
O1	0.023(3)	0.035(3)	0.023(3)	0.009(3)	0.000(3)	-0.002(3)
O2	0.026(3)	0.031(3)	0.033(4)	0.013(3)	0.013(3)	-0.003(3)
O3	0.090(6)	0.035(4)	0.153(9)	0.049(5)	-0.079(6)	-0.024(3)
O4	0.055(4)	0.020(3)	0.055(5)	-0.002(3)	-0.018(4)	-0.014(3)
N1	0.022(4)	0.012(3)	0.016(4)	0.000(3)	-0.005(3)	-0.002(3)
C1	0.016(4)	0.028(5)	0.028(5)	0.000(4)	-0.001(4)	0.008(3)
C2	0.053(6)	0.021(4)	0.027(5)	0.015(4)	0.014(5)	-0.002(3)
C3	0.029(5)	0.034(5)	0.040(6)	-0.006(5)	0.012(5)	-0.003(3)
C4	0.022(5)	0.033(6)	0.045(6)	0.007(5)	0.009(5)	0.011(3)
C5	0.021(5)	0.029(5)	0.022(5)	-0.001(4)	-0.004(4)	0.002(3)
C6	0.015(4)	0.018(4)	0.017(4)	0.000(3)	0.006(3)	-0.001(3)
C7	0.018(4)	0.021(4)	0.015(4)	-0.003(3)	-0.004(3)	0.007(3)
C8	0.015(4)	0.029(5)	0.010(4)	-0.003(3)	-0.007(3)	0.004(3)
C9	0.016(4)	0.028(5)	0.023(4)	-0.006(4)	0.004(4)	0.000(3)
C10	0.005(4)	0.048(6)	0.027(5)	-0.012(5)	-0.005(4)	-0.001(3)
C11	0.038(6)	0.032(5)	0.038(6)	-0.021(5)	-0.017(5)	0.013(3)
C12	0.045(5)	0.012(4)	0.043(6)	-0.006(4)	-0.018(5)	0.006(3)
C13	0.023(5)	0.021(4)	0.025(4)	-0.003(4)	-0.005(3)	0.003(3)
C14	0.019(3)	0.024(4)	0.017(5)	-0.002(4)	0.004(4)	0.002(3)
C15	0.023(3)	0.021(3)	0.010(5)	-0.002(4)	0.002(3)	-0.004(3)
C16	0.019(4)	0.044(6)	0.047(6)	0.012(5)	0.009(5)	0.000(3)
C17	0.021(4)	0.018(4)	0.038(5)	0.012(7)	-0.005(7)	-0.001(3)
C18	0.021(4)	0.029(5)	0.053(6)	0.019(8)	0.002(7)	0.003(3)
C19	0.060(7)	0.040(6)	0.064(8)	-0.027(6)	-0.011(6)	-0.019(3)

=====

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

Table S5 - Bond Distances (Angstrom)
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

Pd1	-N1	2.130(6)	C11	-C12	1.359(14)
Pd1	-C14	2.008(7)	C12	-C13	1.401(12)
O1	-C15	1.215(10)	C13	-C13_a	1.457(10)
O2	-C15	1.328(10)	C14	-C15	1.466(10)
O2	-C16	1.422(9)	C14	-C17	1.347(10)
O3	-C18	1.177(14)	C17	-C18	1.477(10)
O4	-C18	1.299(14)	C17	-C17_a	1.488(10)
O4	-C19	1.439(11)	C1	-H1	0.951(11)
N1	-C6	1.430(9)	C2	-H2	0.950(12)
N1	-C7	1.285(9)	C3	-H3	0.950(13)
C1	-C2	1.381(12)	C4	-H4	0.949(13)
C1	-C6	1.380(11)	C5	-H5	0.950(12)
C2	-C3	1.379(13)	C9	-H9	0.950(12)
C3	-C4	1.366(13)	C10	-H10	0.950(12)
C4	-C5	1.387(12)	C11	-H11	0.951(13)
C5	-C6	1.374(11)	C12	-H12	0.950(13)
C7	-C8	1.496(11)	C16	-H16A	0.98(4)
C7	-C7_a	1.495(10)	C16	-H16B	0.98(2)
C8	-C9	1.392(11)	C16	-H16C	0.98(3)
C8	-C13	1.405(11)	C19	-H19A	0.98(4)
C9	-C10	1.356(12)	C19	-H19B	0.98(4)
C10	-C11	1.389(12)	C19	-H19C	0.98(2)

Table S6 - Bond Angles (Degrees)
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

N1	-Pd1	-C14	103.9(3)	C11	-C12	-C13	121.9(1)
N1	-Pd1	-N1_a	76.6(2)	C8	-C13	-C12	117.1(1)
N1	-Pd1	-C14_a	165.4(3)	C8	-C13	-C13_a	121.9(1)
N1_a	-Pd1	-C14	165.4(3)	C12	-C13	-C13_a	121.0(1)
C14	-Pd1	-C14_a	79.4(3)	Pd1	-C14	-C15	121.1(1)
N1_a	-Pd1	-C14_a	103.9(3)	Pd1	-C14	-C17	116.7(1)
C15	-O2	-C16	115.4(6)	C15	-C14	-C17	121.8(1)
C18	-O4	-C19	116.2(7)	O1	-C15	-O2	121.7(1)
Pd1	-N1	-C6	122.3(4)	O1	-C15	-C14	124.8(1)
Pd1	-N1	-C7	113.9(5)	O2	-C15	-C14	113.5(1)
C6	-N1	-C7	121.4(6)	C14	-C17	-C18	128.0(1)
C2	-C1	-C6	120.0(7)	C14	-C17	-C17_a	113.5(1)
C1	-C2	-C3	119.6(8)	C17_a	-C17	-C18	118.5(1)
C2	-C3	-C4	119.9(9)	O3	-C18	-O4	123.9(1)
C3	-C4	-C5	121.1(8)	O3	-C18	-C17	123.6(1)
C4	-C5	-C6	118.6(8)	O4	-C18	-C17	112.5(1)
N1	-C6	-C1	120.1(6)	C2	-C1	-H1	120.0(1)
N1	-C6	-C5	119.3(7)	C6	-C1	-H1	119.9(1)
C1	-C6	-C5	120.5(7)	C1	-C2	-H2	120.2(1)
N1	-C7	-C8	128.4(7)	C3	-C2	-H2	120.2(1)
N1	-C7	-C7_a	114.9(6)	C2	-C3	-H3	120.1(1)
C7_a	-C7	-C8	116.7(6)	C4	-C3	-H3	120.0(1)
C7	-C8	-C9	121.9(7)	C3	-C4	-H4	119.4(1)
C7	-C8	-C13	117.5(6)	C5	-C4	-H4	119.5(1)
C9	-C8	-C13	120.6(8)	C4	-C5	-H5	120.7(1)
C8	-C9	-C10	120.2(8)	C6	-C5	-H5	120.7(1)
C9	-C10	-C11	120.5(8)	C8	-C9	-H9	119.9(1)
C10	-C11	-C12	119.8(8)	C10	-C9	-H9	119.9(1)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

C9	-C10	-H10	119.8(10)	H16A	-C16	-H16B	110(4)
C11	-C10	-H10	119.7(10)	H16A	-C16	-H16C	109(3)
C10	-C11	-H11	120.1(11)	H16B	-C16	-H16C	109(4)
C12	-C11	-H11	120.1(10)	O4	-C19	-H19A	109.5(10)
C11	-C12	-H12	119.0(10)	O4	-C19	-H19B	109.5(18)
C13	-C12	-H12	119.1(11)	O4	-C19	-H19C	110(2)
O2	-C16	-H16A	109.5(15)	H19A	-C19	-H19B	110(4)
O2	-C16	-H16B	109.5(9)	H19A	-C19	-H19C	109(4)
O2	-C16	-H16C	109.6(15)	H19B	-C19	-H19C	110(3)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees)
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

C14	-Pd1	-N1	-C6	-24.3(6)
C14	-Pd1	-N1	-C7	172.9(6)
N1_a	-Pd1	-N1	-C6	170.8(6)
N1_a	-Pd1	-N1	-C7	8.0(5)
N1	-Pd1	-C14	-C15	-19.8(8)
N1	-Pd1	-C14	-C17	167.5(8)
C14_a	-Pd1	-C14	-C15	174.8(8)
C14_a	-Pd1	-C14	-C17	2.1(9)
C16	-O2	-C15	-O1	3.4(11)
C16	-O2	-C15	-C14	-174.6(7)
C19	-O4	-C18	-O3	8.0(15)
C19	-O4	-C18	-C17	-172.3(8)
Pd1	-N1	-C6	-C1	-46.1(9)
Pd1	-N1	-C6	-C5	130.9(6)
C7	-N1	-C6	-C1	115.4(8)
C7	-N1	-C6	-C5	-67.6(10)
Pd1	-N1	-C7	-C8	156.3(6)
Pd1	-N1	-C7	-C7_a	-20.8(8)
C6	-N1	-C7	-C8	-6.7(11)
C6	-N1	-C7	-C7_a	176.2(6)
C6	-C1	-C2	-C3	-0.2(13)
C2	-C1	-C6	-N1	-178.3(7)
C2	-C1	-C6	-C5	4.7(12)
C1	-C2	-C3	-C4	-2.6(13)
C2	-C3	-C4	-C5	1.0(14)
C3	-C4	-C5	-C6	3.4(13)
C4	-C5	-C6	-N1	176.8(7)
C4	-C5	-C6	-C1	-6.2(12)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

N1	-C7	-C8	-C9	-22.6(12)
N1	-C7	-C8	-C13	159.3(7)
C7_a	-C7	-C8	-C9	154.5(7)
C7_a	-C7	-C8	-C13	-23.6(10)
N1	-C7	-C7_a	-N1_a	28.6(9)
N1	-C7	-C7_a	-C8_a	-148.8(7)
C8	-C7	-C7_a	-N1_a	-148.8(7)
C8	-C7	-C7_a	-C8_a	33.7(9)
C7	-C8	-C9	-C10	179.0(7)
C13	-C8	-C9	-C10	-3.0(11)
C7	-C8	-C13	-C12	-179.2(7)
C7	-C8	-C13	-C13_a	3.5(11)
C9	-C8	-C13	-C12	2.7(11)
C9	-C8	-C13	-C13_a	-174.7(7)
C8	-C9	-C10	-C11	0.9(12)
C9	-C10	-C11	-C12	1.4(13)
C10	-C11	-C12	-C13	-1.7(14)
C11	-C12	-C13	-C8	-0.3(12)
C11	-C12	-C13	-C13_a	177.0(8)
C8	-C13	-C13_a	-C8_a	7.0(11)
C8	-C13	-C13_a	-C12_a	-170.2(8)
C12	-C13	-C13_a	-C8_a	-170.2(8)
C12	-C13	-C13_a	-C12_a	12.6(12)
Pd1	-C14	-C15	-O1	-45.4(11)
Pd1	-C14	-C15	-O2	132.5(7)
C17	-C14	-C15	-O1	126.9(11)
C17	-C14	-C15	-O2	-55.2(13)
Pd1	-C14	-C17	-C18	173.8(11)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1032B MOKA 60KV150MA LNT MON 030394

Pd1	-C14	-C17	-C17_a	-5.4(14)
C15	-C14	-C17	-C18	1.2(19)
C15	-C14	-C17	-C17_a	-178.0(9)
C14	-C17	-C18	-O3	123.5(13)
C14	-C17	-C18	-O4	-56.2(18)
C17_a	-C17	-C18	-O3	-57.3(17)
C17_a	-C17	-C18	-O4	123.0(11)
C14	-C17	-C17_a	-C14_a	7.0(16)
C14	-C17	-C17_a	-C18_a	-172.3(12)
C18	-C17	-C17_a	-C14_a	-172.3(12)
C18	-C17	-C17_a	-C18_a	8.4(18)

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

Crystal Data				
Empirical Formula	C22 H20 N2 O8 Pd			
Formula Weight	546.83			
Crystal System	Orthorhombic			
Space group	Pbca	(No. 61)		
a, b, c [Angstrom]	15.4590(8)	13.5717(9)	20.4773(11)	
alpha, beta, gamma [deg]	90	90	90	
V [Ang**3]	4296.2(4)			
Z	8			
D(calc) [g/cm**3]	1.691			
F(000) [Electrons]	2208			
Mu(MoKa) [/cm]	9.2			
Crystal Size [mm]	0.13 x 0.13 x 0.18			

Data Collection

Temperature (K)	150			
Radiation [Angstrom]	MoKa (with monochromator)	0.71073		
Theta Min-Max [Deg]	2.0, 26.2			
Scan type, Scan, [Deg]	Omega,	0.70 + 0.35 Tan(Theta)		
Hor. and vert. aperture [mm]	3.00	4.00		
Reference Reflection(s)	2, 4, 0 ; 3, 2, -3			
Dataset	0: 18 ; 0: 17 ; -24: 0			
Tot., Uniq. Data, R(int)	3940,	3940,	0.00	
DIFABS transmission range	0.580, 1.000			

Refinement

Nref, Npar	3939,	302		
wR2, R1, S	0.1146, 0.0634 [for 2004 F > 4 sigma(F)], 1.04			
w	1/[s^2(Fo^2)+(0.0216P)^2], P=(Fo^2+2Fc^2)/3			
Max. and Av. Shift/Error	0.001, 0.000			
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]	-0.58, 0.70			

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal
Parameters of the non-Hydrogen atoms
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
Pd(1)	0.07300(4)	0.12320(5)	0.06539(3)	0.0157(2)
O(1)	0.1962(4)	0.1082(5)	0.2355(2)	0.0230(19)
O(2)	0.0886(4)	-0.0001(4)	0.2162(3)	0.024(2)
O(3)	0.2949(4)	-0.0742(5)	0.1797(3)	0.026(2)
O(4)	0.3822(4)	0.0281(5)	0.1237(3)	0.027(2)
O(5)	0.3312(4)	0.0336(4)	-0.0656(3)	0.026(2)
O(6)	0.3427(4)	-0.0814(4)	0.0136(3)	0.024(2)
O(7)	0.1371(4)	0.0054(4)	-0.1032(3)	0.022(2)
O(8)	0.1559(4)	0.1697(5)	-0.0966(3)	0.021(2)
N(1)	-0.0350(4)	0.1613(5)	0.0062(3)	0.013(2)
N(2)	-0.0081(5)	0.1980(5)	0.1320(3)	0.019(3)
C(1)	-0.0471(5)	0.1412(6)	-0.0567(4)	0.015(3)
C(2)	-0.1198(6)	0.1676(6)	-0.0899(4)	0.020(3)
C(3)	-0.1867(5)	0.2162(6)	-0.0585(4)	0.020(3)
C(4)	-0.1759(6)	0.2328(6)	0.0078(4)	0.017(3)
C(5)	-0.0995(5)	0.2070(6)	0.0391(4)	0.014(3)
C(6)	-0.0840(6)	0.2258(7)	0.1090(4)	0.022(3)
C(7)	-0.1451(6)	0.2732(7)	0.1477(4)	0.018(3)
C(8)	-0.1251(6)	0.2928(7)	0.2134(4)	0.028(3)
C(9)	-0.0456(6)	0.2671(7)	0.2362(4)	0.029(3)
C(10)	0.0125(6)	0.2206(6)	0.1949(4)	0.025(3)
C(11)	0.1766(6)	0.0990(7)	0.3037(4)	0.035(4)
C(12)	0.1452(6)	0.0529(7)	0.1954(4)	0.017(3)
C(13)	0.1629(5)	0.0678(6)	0.1255(4)	0.015(3)
C(14)	0.2364(6)	0.0321(6)	0.0986(4)	0.015(3)
C(15)	0.3060(6)	-0.0118(7)	0.1387(4)	0.021(3)
C(16)	0.4557(6)	-0.0147(9)	0.1556(5)	0.049(5)

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued) for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
C(17)	0.2353(6)	0.0383(7)	0.0268(4)	0.017(3)
C(18)	0.3077(6)	-0.0004(7)	-0.0142(4)	0.017(3)
C(19)	0.4170(6)	-0.1234(7)	-0.0195(4)	0.028(3)
C(20)	0.1629(6)	0.0744(7)	0.0012(4)	0.017(3)
C(21)	0.1533(5)	0.0905(6)	-0.0703(5)	0.014(3)
C(22)	0.1251(6)	0.0171(7)	-0.1726(4)	0.027(3)

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

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang^2]
H(1)	-0.0030(5)	0.1068(6)	-0.0795(4)	0.0180
H(2)	-0.1247(6)	0.1526(6)	-0.1351(4)	0.0240
H(3)	-0.2371(5)	0.2371(6)	-0.0811(4)	0.0240
H(4)	-0.2214(6)	0.2622(6)	0.0321(4)	0.0200
H(7)	-0.1994(6)	0.2920(7)	0.1300(4)	0.0220
H(8)	-0.1663(6)	0.3234(7)	0.2413(4)	0.0330
H(9)	-0.0299(6)	0.2810(7)	0.2801(4)	0.0350
H(10)	0.0682(6)	0.2039(6)	0.2109(4)	0.0290
H(11A)	0.121(2)	0.131(4)	0.3129(7)	0.0520
H(11B)	0.222(2)	0.131(4)	0.3295(4)	0.0520
H(11C)	0.173(4)	0.0291(7)	0.3154(7)	0.0520
H(16A)	0.458(3)	0.008(4)	0.2009(11)	0.0730
H(16B)	0.5086(6)	0.005(4)	0.133(2)	0.0730
H(16C)	0.451(2)	-0.0867(9)	0.155(3)	0.0730
H(19A)	0.4006(10)	-0.143(4)	-0.0639(10)	0.0420
H(19B)	0.437(2)	-0.181(3)	0.0046(15)	0.0420
H(19C)	0.4635(14)	-0.0744(15)	-0.022(2)	0.0420
H(22A)	0.123(4)	-0.0479(7)	-0.1933(5)	0.0400
H(22B)	0.1737(19)	0.055(4)	-0.1908(6)	0.0400
H(22C)	0.0710(18)	0.053(4)	-0.1808(4)	0.0400

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

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
Pd(1)	0.0155(3)	0.0161(3)	0.0154(3)	-0.0015(4)	0.0004(4)	0.0012(4)
O(1)	0.022(3)	0.033(4)	0.014(3)	-0.004(3)	-0.001(3)	-0.005(3)
O(2)	0.025(4)	0.026(4)	0.020(3)	0.002(3)	0.003(3)	0.001(3)
O(3)	0.023(4)	0.031(4)	0.025(4)	0.014(3)	0.004(3)	0.001(3)
O(4)	0.014(4)	0.036(4)	0.031(4)	0.012(3)	-0.006(3)	-0.007(3)
O(5)	0.031(4)	0.026(4)	0.020(3)	0.006(4)	0.012(4)	0.005(3)
O(6)	0.030(4)	0.016(4)	0.027(4)	0.006(3)	0.002(3)	0.010(3)
O(7)	0.030(4)	0.016(4)	0.020(3)	0.004(3)	-0.001(3)	0.000(3)
O(8)	0.022(4)	0.018(4)	0.022(4)	0.004(3)	0.000(3)	-0.002(3)
N(1)	0.014(4)	0.007(4)	0.018(4)	0.002(3)	-0.005(3)	0.000(3)
N(2)	0.018(4)	0.021(5)	0.019(4)	-0.003(4)	-0.004(4)	0.004(4)
C(1)	0.014(4)	0.018(5)	0.013(4)	0.003(4)	0.003(4)	-0.005(4)
C(2)	0.023(5)	0.024(5)	0.013(4)	0.002(4)	-0.001(4)	-0.008(5)
C(3)	0.021(5)	0.020(5)	0.020(5)	0.005(5)	-0.006(5)	-0.009(4)
C(4)	0.017(5)	0.010(6)	0.024(5)	0.001(4)	0.009(4)	0.002(4)
C(5)	0.015(5)	0.008(5)	0.020(5)	-0.003(4)	0.004(4)	0.000(4)
C(6)	0.027(6)	0.020(5)	0.019(5)	0.001(4)	-0.009(5)	-0.007(5)
C(7)	0.010(5)	0.025(6)	0.019(5)	-0.004(5)	0.000(4)	0.004(4)
C(8)	0.027(6)	0.027(6)	0.029(6)	-0.001(5)	0.009(5)	0.008(5)
C(9)	0.038(6)	0.032(6)	0.018(5)	-0.008(5)	-0.004(5)	0.014(5)
C(10)	0.028(6)	0.026(6)	0.020(5)	0.000(5)	-0.013(5)	0.000(5)
C(11)	0.032(6)	0.055(9)	0.018(5)	-0.007(5)	-0.007(5)	-0.013(6)
C(12)	0.020(5)	0.012(5)	0.020(5)	0.000(4)	-0.006(4)	0.005(4)
C(13)	0.014(5)	0.021(6)	0.011(5)	0.008(4)	-0.003(4)	0.005(5)
C(14)	0.014(5)	0.009(5)	0.021(5)	0.000(4)	-0.004(4)	0.001(4)
C(15)	0.026(6)	0.021(6)	0.017(5)	-0.003(5)	-0.012(5)	-0.002(5)
C(16)	0.014(6)	0.085(10)	0.048(7)	0.019(7)	-0.009(5)	0.012(6)

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters (continued)
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
C(17)	0.016(5)	0.021(6)	0.013(5)	-0.004(5)	-0.001(4)	-0.002(4)
C(18)	0.015(5)	0.016(5)	0.020(5)	0.004(5)	-0.008(4)	0.004(4)
C(19)	0.031(5)	0.026(5)	0.028(5)	-0.003(5)	0.010(5)	0.015(5)
C(20)	0.017(5)	0.013(5)	0.022(5)	-0.001(4)	-0.006(4)	0.000(4)
C(21)	0.006(4)	0.016(5)	0.019(5)	0.000(5)	-0.001(4)	0.006(4)
C(22)	0.041(7)	0.027(6)	0.013(5)	-0.004(5)	-0.011(5)	-0.010(5)

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

Table S5 - Bond Distances (Angstrom)
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

Pd(1)	-N(1)	2.127(6)	C(9)	-C(10)	1.386(12)
Pd(1)	-N(2)	2.113(7)	C(12)	-C(13)	1.471(12)
Pd(1)	-C(13)	2.003(8)	C(13)	-C(14)	1.352(12)
Pd(1)	-C(20)	2.024(9)	C(14)	-C(15)	1.479(13)
O(1)	-C(11)	1.434(9)	C(14)	-C(17)	1.473(12)
O(1)	-C(12)	1.363(11)	C(17)	-C(18)	1.494(13)
O(2)	-C(12)	1.210(11)	C(17)	-C(20)	1.329(13)
O(3)	-C(15)	1.205(11)	C(20)	-C(21)	1.488(13)
O(4)	-C(15)	1.332(11)	C(1)	-H(1)	0.949(11)
O(4)	-C(16)	1.434(12)	C(2)	-H(2)	0.951(12)
O(5)	-C(18)	1.205(10)	C(3)	-H(3)	0.950(11)
O(6)	-C(18)	1.351(11)	C(4)	-H(4)	0.950(12)
O(6)	-C(19)	1.450(11)	C(7)	-H(7)	0.949(13)
O(7)	-C(21)	1.360(10)	C(8)	-H(8)	0.951(13)
O(7)	-C(22)	1.442(10)	C(9)	-H(9)	0.950(12)
O(8)	-C(21)	1.203(11)	C(10)	-H(10)	0.949(13)
N(1)	-C(1)	1.330(10)	C(11)	-H(11A)	0.98(4)
N(1)	-C(5)	1.354(10)	C(11)	-H(11B)	0.98(3)
N(2)	-C(6)	1.319(12)	C(11)	-H(11C)	0.980(14)
N(2)	-C(10)	1.362(10)	C(16)	-H(16A)	0.98(3)
C(1)	-C(2)	1.361(12)	C(16)	-H(16B)	0.98(3)
C(2)	-C(3)	1.385(12)	C(16)	-H(16C)	0.980(17)
C(3)	-C(4)	1.386(12)	C(19)	-H(19A)	0.98(3)
C(4)	-C(5)	1.389(12)	C(19)	-H(19B)	0.97(4)
C(5)	-C(6)	1.474(12)	C(19)	-H(19C)	0.98(2)
C(6)	-C(7)	1.391(13)	C(22)	-H(22A)	0.979(14)
C(7)	-C(8)	1.406(12)	C(22)	-H(22B)	0.98(4)
C(8)	-C(9)	1.360(13)	C(22)	-H(22C)	0.98(4)

Table S6 - Bond Angles (Degrees)
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

N(1)	-Pd(1)	-N(2)	77.6(3)	N(2)	-C(10)	-C(9)	121.9(8)
N(1)	-Pd(1)	-C(13)	170.4(3)	O(1)	-C(12)	-O(2)	122.2(7)
N(1)	-Pd(1)	-C(20)	104.4(3)	O(1)	-C(12)	-C(13)	113.7(7)
N(2)	-Pd(1)	-C(13)	101.3(3)	O(2)	-C(12)	-C(13)	124.0(8)
N(2)	-Pd(1)	-C(20)	169.7(3)	Pd(1)	-C(13)	-C(12)	121.4(6)
C(13)	-Pd(1)	-C(20)	78.5(3)	Pd(1)	-C(13)	-C(14)	117.8(6)
C(11)	-O(1)	-C(12)	114.6(7)	C(12)	-C(13)	-C(14)	120.2(8)
C(15)	-O(4)	-C(16)	115.5(7)	C(13)	-C(14)	-C(15)	122.0(8)
C(18)	-O(6)	-C(19)	116.1(7)	C(13)	-C(14)	-C(17)	112.1(8)
C(21)	-O(7)	-C(22)	114.7(7)	C(15)	-C(14)	-C(17)	125.9(8)
Pd(1)	-N(1)	-C(1)	127.8(5)	O(3)	-C(15)	-O(4)	124.9(8)
Pd(1)	-N(1)	-C(5)	113.9(5)	O(3)	-C(15)	-C(14)	124.5(8)
C(1)	-N(1)	-C(5)	118.2(7)	O(4)	-C(15)	-C(14)	110.6(7)
Pd(1)	-N(2)	-C(6)	115.8(5)	C(14)	-C(17)	-C(18)	122.1(8)
Pd(1)	-N(2)	-C(10)	125.5(6)	C(14)	-C(17)	-C(20)	115.1(8)
C(6)	-N(2)	-C(10)	118.8(7)	C(18)	-C(17)	-C(20)	122.6(8)
N(1)	-C(1)	-C(2)	123.1(7)	O(5)	-C(18)	-O(6)	124.0(8)
C(1)	-C(2)	-C(3)	120.7(8)	O(5)	-C(18)	-C(17)	125.6(8)
C(2)	-C(3)	-C(4)	116.2(8)	O(6)	-C(18)	-C(17)	110.4(7)
C(3)	-C(4)	-C(5)	120.9(8)	Pd(1)	-C(20)	-C(17)	116.3(6)
N(1)	-C(5)	-C(4)	120.8(7)	Pd(1)	-C(20)	-C(21)	121.5(6)
N(1)	-C(5)	-C(6)	116.3(7)	C(17)	-C(20)	-C(21)	121.7(8)
C(4)	-C(5)	-C(6)	122.9(8)	O(7)	-C(21)	-O(8)	122.9(8)
N(2)	-C(6)	-C(5)	116.2(7)	O(7)	-C(21)	-C(20)	112.4(7)
N(2)	-C(6)	-C(7)	122.2(8)	O(8)	-C(21)	-C(20)	124.6(8)
C(5)	-C(6)	-C(7)	121.5(8)	N(1)	-C(1)	-H(1)	118.4(5)
C(6)	-C(7)	-C(8)	118.9(8)	C(2)	-C(1)	-H(1)	118.5(5)
C(7)	-C(8)	-C(9)	118.6(8)	C(1)	-C(2)	-H(2)	119.7(10)
C(8)	-C(9)	-C(10)	119.5(8)	C(3)	-C(2)	-H(2)	119.6(10)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

C(2)	-C(3)	-H(3)	121.9(9)	O(4)	-C(16)	-H(16A)	109(3)
C(4)	-C(3)	-H(3)	121.8(9)	O(4)	-C(16)	-H(16B)	110(2)
C(3)	-C(4)	-H(4)	119.5(10)	O(4)	-C(16)	-H(16C)	110(3)
C(5)	-C(4)	-H(4)	119.6(10)	H(16A)	-C(16)	-H(16B)	109(4)
C(6)	-C(7)	-H(7)	120.5(10)	H(16A)	-C(16)	-H(16C)	109(5)
C(8)	-C(7)	-H(7)	120.6(10)	H(16B)	-C(16)	-H(16C)	109(4)
C(7)	-C(8)	-H(8)	120.7(10)	O(6)	-C(19)	-H(19A)	109.6(15)
C(9)	-C(8)	-H(8)	120.7(10)	O(6)	-C(19)	-H(19B)	109(2)
C(8)	-C(9)	-H(9)	120.3(10)	O(6)	-C(19)	-H(19C)	109.8(18)
C(10)	-C(9)	-H(9)	120.2(11)	H(19A)	-C(19)	-H(19B)	110(4)
N(2)	-C(10)	-H(10)	119.0(10)	H(19A)	-C(19)	-H(19C)	109(3)
C(9)	-C(10)	-H(10)	119.1(9)	H(19B)	-C(19)	-H(19C)	110(3)
O(1)	-C(11)	-H(11A)	109.5(14)	O(7)	-C(22)	-H(22A)	109.4(11)
O(1)	-C(11)	-H(11B)	109.6(15)	O(7)	-C(22)	-H(22B)	109.4(12)
O(1)	-C(11)	-H(11C)	109.5(13)	O(7)	-C(22)	-H(22C)	109.4(9)
H(11A)	-C(11)	-H(11B)	109(3)	H(22A)	-C(22)	-H(22B)	109(4)
H(11A)	-C(11)	-H(11C)	109(5)	H(22A)	-C(22)	-H(22C)	110(4)
H(11B)	-C(11)	-H(11C)	110(4)	H(22B)	-C(22)	-H(22C)	109(4)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees)
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

N(2)	-Pd(1)	-N(1)	-C(1)	-179.4(7)
N(2)	-Pd(1)	-N(1)	-C(5)	-3.0(5)
C(20)	-Pd(1)	-N(1)	-C(1)	11.0(8)
C(20)	-Pd(1)	-N(1)	-C(5)	-172.6(6)
N(1)	-Pd(1)	-N(2)	-C(6)	3.8(6)
N(1)	-Pd(1)	-N(2)	-C(10)	-174.9(7)
C(13)	-Pd(1)	-N(2)	-C(6)	-166.5(6)
C(13)	-Pd(1)	-N(2)	-C(10)	14.8(7)
N(2)	-Pd(1)	-C(13)	-C(12)	22.4(7)
N(2)	-Pd(1)	-C(13)	-C(14)	-166.3(6)
C(20)	-Pd(1)	-C(13)	-C(12)	-168.1(8)
C(20)	-Pd(1)	-C(13)	-C(14)	3.2(7)
N(1)	-Pd(1)	-C(20)	-C(17)	-174.9(7)
N(1)	-Pd(1)	-C(20)	-C(21)	13.0(8)
C(13)	-Pd(1)	-C(20)	-C(17)	-4.2(7)
C(13)	-Pd(1)	-C(20)	-C(21)	-176.3(8)
C(11)	-O(1)	-C(12)	-O(2)	-0.6(12)
C(11)	-O(1)	-C(12)	-C(13)	176.6(7)
C(16)	-O(4)	-C(15)	-O(3)	5.9(13)
C(16)	-O(4)	-C(15)	-C(14)	-174.9(8)
C(19)	-O(6)	-C(18)	-O(5)	4.7(12)
C(19)	-O(6)	-C(18)	-C(17)	-176.7(7)
C(22)	-O(7)	-C(21)	-O(8)	1.3(11)
C(22)	-O(7)	-C(21)	-C(20)	178.6(7)
Pd(1)	-N(1)	-C(1)	-C(2)	178.8(6)
C(5)	-N(1)	-C(1)	-C(2)	2.5(12)
Pd(1)	-N(1)	-C(5)	-C(4)	-177.3(6)
Pd(1)	-N(1)	-C(5)	-C(6)	1.9(9)
C(1)	-N(1)	-C(5)	-C(4)	-0.5(12)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

C(1)	-N(1)	-C(5)	-C(6)	178.7(7)
Pd(1)	-N(2)	-C(6)	-C(5)	-4.0(10)
Pd(1)	-N(2)	-C(6)	-C(7)	178.1(7)
C(10)	-N(2)	-C(6)	-C(5)	174.8(7)
C(10)	-N(2)	-C(6)	-C(7)	-3.1(13)
Pd(1)	-N(2)	-C(10)	-C(9)	-177.8(6)
C(6)	-N(2)	-C(10)	-C(9)	3.5(12)
N(1)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	-1.2(13)
C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	-2.0(12)
C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	3.8(12)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-N(1)	-2.7(12)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(6)	178.2(8)
N(1)	-C(5)	-C(6)	-N(2)	1.4(11)
N(1)	-C(5)	-C(6)	-C(7)	179.3(8)
C(4)	-C(5)	-C(6)	-N(2)	-179.5(8)
C(4)	-C(5)	-C(6)	-C(7)	-1.6(14)
N(2)	-C(6)	-C(7)	-C(8)	0.5(14)
C(5)	-C(6)	-C(7)	-C(8)	-177.3(8)
C(6)	-C(7)	-C(8)	-C(9)	1.8(14)
C(7)	-C(8)	-C(9)	-C(10)	-1.5(14)
C(8)	-C(9)	-C(10)	-N(2)	-1.2(13)
O(1)	-C(12)	-C(13)	-Pd(1)	-117.0(7)
O(1)	-C(12)	-C(13)	-C(14)	71.9(11)
O(2)	-C(12)	-C(13)	-Pd(1)	60.1(11)
O(2)	-C(12)	-C(13)	-C(14)	-111.0(10)
Pd(1)	-C(13)	-C(14)	-C(15)	-179.0(7)
Pd(1)	-C(13)	-C(14)	-C(17)	-1.8(10)
C(12)	-C(13)	-C(14)	-C(15)	-7.6(13)
C(12)	-C(13)	-C(14)	-C(17)	169.6(8)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: s1225b C22 H20 N2 O8 Pd

C(13)	-C(14)	-C(15)	-O(3)	49.8(13)
C(13)	-C(14)	-C(15)	-O(4)	-129.5(9)
C(17)	-C(14)	-C(15)	-O(3)	-127.0(10)
C(17)	-C(14)	-C(15)	-O(4)	53.7(12)
C(13)	-C(14)	-C(17)	-C(18)	-177.4(8)
C(13)	-C(14)	-C(17)	-C(20)	-1.9(12)
C(15)	-C(14)	-C(17)	-C(18)	-0.3(14)
C(15)	-C(14)	-C(17)	-C(20)	175.2(9)
C(14)	-C(17)	-C(18)	-O(5)	-147.5(9)
C(14)	-C(17)	-C(18)	-O(6)	34.0(12)
C(20)	-C(17)	-C(18)	-O(5)	37.3(15)
C(20)	-C(17)	-C(18)	-O(6)	-141.2(9)
C(14)	-C(17)	-C(20)	-Pd(1)	4.6(11)
C(14)	-C(17)	-C(20)	-C(21)	176.6(8)
C(18)	-C(17)	-C(20)	-Pd(1)	-179.9(8)
C(18)	-C(17)	-C(20)	-C(21)	-7.9(14)
Pd(1)	-C(20)	-C(21)	-O(7)	-110.3(7)
Pd(1)	-C(20)	-C(21)	-O(8)	66.9(11)
C(17)	-C(20)	-C(21)	-O(7)	78.0(11)
C(17)	-C(20)	-C(21)	-O(8)	-104.8(11)

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

Crystal Data	
Empirical Formula	C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)
Formula Weight	1185.90
Crystal System	Orthorhombic
Space group	Fddd (No. 70)
a, b, c [Angstrom]	17.7381(13) 22.2113(14) 27.600(2)
V [Ang**3]	10874.0(13)
Z	8
D(calc) [g/cm**3]	1.449
F(000) [Electrons]	4832
Mu(MoKa) [/cm]	7.2
Crystal Size [mm]	0.50 x 0.28 x 0.25
Data Collection	
Temperature (K)	150
Radiation [Angstrom]	MoKa (with monochromator) 0.71073
Theta Min-Max [Deg]	1.6, 27.5
Scan type	Omega/2Theta
Scan, [Deg]	0.96 + 0.35 Tan(Theta)
Hor. and vert. aperture [mm]	3.46 4.00
Reference Reflection(s)	-2, 0, 10 ; -8, 2, 2 ; 8, 2, 2
Dataset	-23: 0 ; -27: 28 ; 0: 35
Tot., Uniq. Data	5715, 3129
R(int) = 0.0442	R(sigma) = 0.0603
	Friedel opposites merged
Refinement	
Nref, Npar	3129, 143
wR2, R1, S	0.0719, 0.0318 [for 2265 F > 4 sigma(F)], 0.94
w	1/[\s^2(fo^2)+(0.0331P)^2^], P=(Fo^2+2Fc^2)/3
Max. and Av. Shift/Error	0.000, 0.000
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]	-0.33, 0.53

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters of the non-Hydrogen atoms
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
----	---	---	---	-----
Pd(1)	0.25965(1)	1/8	1/8	0.0175(1)
O(1)	0.00193(12)	-0.07902(9)	0.05283(7)	0.0377(7)
O(2)	0.03453(12)	-0.05702(8)	0.12912(7)	0.0369(6)
N(1)	0.18313(11)	0.07456(9)	0.08200(7)	0.0178(6)
N(2)	0.3992(2)	-0.00725(12)	0.13320(9)	0.0437(12)
N(3)	0.4034(2)	0.12833(15)	0.01839(10)	0.0530(12)
C(1)	0.1951(2)	0.07975(12)	0.03381(9)	0.0237(8)
C(2)	0.1543(2)	0.04727(13)	0.00036(9)	0.0280(8)
C(3)	0.1014(2)	0.00633(12)	0.01676(9)	0.0263(8)
C(4)	0.0887(2)	0.00040(11)	0.06645(9)	0.0215(7)
C(5)	0.1302(2)	0.03610(10)	0.09815(8)	0.0173(6)
C(6)	0.0362(2)	-0.04927(11)	0.08116(10)	0.0255(7)
C(7)	-0.0096(2)	-0.1074(2)	0.14630(14)	0.0537(12)
C(8)	0.3675(2)	0.10131(12)	0.10674(9)	0.0279(8)
C(9)	0.3858(2)	0.04065(14)	0.12118(11)	0.0325(9)
C(10)	0.3886(2)	0.11633(13)	0.05752(11)	0.0341(11)

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

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang ²]
H(1)	0.2329(2)	0.10670(12)	0.02265(9)	0.0280
H(2)	0.1623(2)	0.05290(13)	-0.03337(9)	0.0340
H(3)	0.0739(2)	-0.01763(12)	-0.00564(9)	0.0320
H(7A)	-0.0036(11)	-0.1113(7)	0.1815(2)	0.0800
H(7B)	0.0077(9)	-0.1444(2)	0.1305(7)	0.0800
H(7C)	-0.0629(3)	-0.1007(5)	0.1386(8)	0.0800

=====

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

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

Atom	U(1,1) or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
Pd(1)	0.0179(1)	0.0178(1)	0.0168(1)	0.0028(1)		0
O(1)	0.0424(12)	0.0356(11)	0.0350(11)	-0.0066(9)	-0.0117(10)	-0.0134(10)
O(2)	0.0491(12)	0.0338(10)	0.0277(10)	0.0057(9)	-0.0090(10)	-0.0239(10)
N(1)	0.0218(10)	0.0152(9)	0.0163(10)	0.0009(8)	-0.0001(8)	0.0022(8)
N(2)	0.053(2)	0.040(2)	0.038(2)	0.0117(12)	0.0049(12)	0.0155(12)
N(3)	0.057(2)	0.057(2)	0.045(2)	0.020(2)	0.0212(14)	0.019(2)
C(1)	0.0269(14)	0.0243(13)	0.0200(12)	0.0026(10)	0.0057(11)	0.0039(11)
C(2)	0.0381(15)	0.0319(14)	0.0140(11)	-0.0048(11)	0.0000(11)	0.0075(15)
C(3)	0.0334(15)	0.0259(13)	0.0195(12)	-0.0094(11)	-0.0053(11)	0.0050(11)
C(4)	0.0254(13)	0.0188(11)	0.0203(12)	-0.0010(10)	-0.0029(11)	0.0032(11)
C(5)	0.0191(11)	0.0142(10)	0.0185(11)	-0.0003(9)	-0.0040(11)	0.0067(11)
C(6)	0.0283(13)	0.0178(11)	0.0303(14)	-0.0018(11)	-0.0053(12)	0.0018(12)
C(7)	0.060(2)	0.045(2)	0.056(2)	0.019(2)	-0.011(2)	-0.034(2)
C(8)	0.0197(13)	0.0325(14)	0.0316(13)	0.0124(12)	0.0036(11)	0.0029(12)
C(9)	0.0273(14)	0.040(2)	0.0303(14)	0.0088(13)	0.0037(14)	0.0086(14)
C(10)	0.032(2)	0.0303(15)	0.040(2)	0.0124(13)	0.0057(12)	0.0081(12)

=====

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

Table S5 - Bond Distances (Angstrom)
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

Pd(1)	-N(1)	2.123(2)	C(4)	-C(5)	1.391(4)
Pd(1)	-C(8)	2.047(3)	C(4)	-C(6)	1.500(4)
O(1)	-C(6)	1.191(4)	C(5)	-C(5)c	1.494(3)
O(2)	-C(6)	1.335(3)	C(8)	-C(9)	1.442(4)
O(2)	-C(7)	1.446(5)	C(8)	-C(10)	1.448(4)
N(1)	-C(1)	1.352(3)	C(8)	-C(8)b	1.457(4)
N(1)	-C(5)	1.345(4)	C(1)	-H(1)	0.950(4)
N(2)	-C(9)	1.140(4)	C(2)	-H(2)	0.950(4)
N(3)	-C(10)	1.143(4)	C(3)	-H(3)	0.950(4)
C(1)	-C(2)	1.377(4)	C(7)	-H(7A)	0.981(7)
C(2)	-C(3)	1.383(4)	C(7)	-H(7B)	0.980(11)
C(3)	-C(4)	1.396(4)	C(7)	-H(7C)	0.980(8)

Table S6 - Bond Angles (Degrees)
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

N(1)	-Pd(1)	-C(8)	108.92(9)	O(2)	-C(6)	-C(4)	112.1(2)
N(1)	-Pd(1)	-N(1)b	100.50(7)	Pd(1)	-C(8)	-C(9)	112.5(2)
N(1)	-Pd(1)	-C(8)b	150.56(9)	Pd(1)	-C(8)	-C(10)	114.4(2)
N(1)b	-Pd(1)	-C(8)	150.56(9)	Pd(1)	-C(8)	-C(8)b	69.15(19)
C(8)	-Pd(1)	-C(8)b	41.70(11)	C(9)	-C(8)	-C(10)	114.6(3)
N(1)b	-Pd(1)	-C(8)b	108.92(9)	C(8)b	-C(8)	-C(9)	118.9(2)
C(6)	-O(2)	-C(7)	115.9(2)	C(8)b	-C(8)	-C(10)	118.9(2)
Pd(1)	-N(1)	-C(1)	113.87(18)	N(2)	-C(9)	-C(8)	178.7(4)
Pd(1)	-N(1)	-C(5)	126.59(16)	N(3)	-C(10)	-C(8)	178.3(4)
C(1)	-N(1)	-C(5)	119.3(2)	N(1)	-C(1)	-H(1)	118.9(3)
N(1)	-C(1)	-C(2)	122.2(3)	C(2)	-C(1)	-H(1)	118.9(3)
C(1)	-C(2)	-C(3)	118.8(2)	C(1)	-C(2)	-H(2)	120.6(4)
C(2)	-C(3)	-C(4)	119.5(3)	C(3)	-C(2)	-H(2)	120.6(3)
C(3)	-C(4)	-C(5)	118.6(3)	C(2)	-C(3)	-H(3)	120.2(3)
C(3)	-C(4)	-C(6)	115.8(2)	C(4)	-C(3)	-H(3)	120.2(3)
C(5)	-C(4)	-C(6)	125.3(2)	O(2)	-C(7)	-H(7A)	109.5(11)
N(1)	-C(5)	-C(4)	121.5(2)	O(2)	-C(7)	-H(7B)	109.5(9)
N(1)	-C(5)	-C(5)c	114.5(2)	O(2)	-C(7)	-H(7C)	109.5(9)
C(4)	-C(5)	-C(5)c	124.0(3)	H(7A)	-C(7)	-H(7B)	109.4(15)
O(1)	-C(6)	-O(2)	124.6(3)	H(7A)	-C(7)	-H(7C)	109.4(15)
O(1)	-C(6)	-C(4)	123.2(3)	H(7B)	-C(7)	-H(7C)	109.4(14)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees)
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

C(8)	-Pd(1)	-N(1)	-C(1)	-54.8(2)
C(8)	-Pd(1)	-N(1)	-C(5)	119.8(2)
N(1)b	-Pd(1)	-N(1)	-C(1)	126.26(19)
N(1)b	-Pd(1)	-N(1)	-C(5)	-59.1(2)
C(8)b	-Pd(1)	-N(1)	-C(1)	-51.7(3)
C(8)b	-Pd(1)	-N(1)	-C(5)	123.0(2)
N(1)	-Pd(1)	-C(8)	-C(9)	-68.6(2)
N(1)	-Pd(1)	-C(8)	-C(10)	64.4(2)
N(1)	-Pd(1)	-C(8)	-C(8)b	177.66(14)
N(1)b	-Pd(1)	-C(8)	-C(9)	109.2(2)
N(1)b	-Pd(1)	-C(8)	-C(10)	-117.7(2)
C(8)b	-Pd(1)	-C(8)	-C(9)	113.7(3)
C(8)b	-Pd(1)	-C(8)	-C(10)	-113.2(3)
N(1)	-Pd(1)	-C(8)b	-C(8)	-4.5(3)
C(7)	-O(2)	-C(6)	-O(1)	3.2(4)
C(7)	-O(2)	-C(6)	-C(4)	-174.8(3)
Pd(1)	-N(1)	-C(1)	-C(2)	175.7(2)
C(5)	-N(1)	-C(1)	-C(2)	0.6(4)
Pd(1)	-N(1)	-C(5)	-C(4)	-172.7(2)
Pd(1)	-N(1)	-C(5)	-C(5)c	8.1(3)
C(1)	-N(1)	-C(5)	-C(4)	1.6(4)
C(1)	-N(1)	-C(5)	-C(5)c	-177.6(2)
N(1)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	-2.5(5)
C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	2.3(5)
C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	-0.2(5)
C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(6)	-174.1(3)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-N(1)	-1.8(4)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(5)c	177.3(3)
C(6)	-C(4)	-C(5)	-N(1)	171.5(3)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: s1142a C40 H24 N12 O8 Pd2 . 2(C6 H14)

C(6)	-C(4)	-C(5)	-C(5)c	-9.5(5)
C(3)	-C(4)	-C(6)	-O(1)	-6.2(5)
C(3)	-C(4)	-C(6)	-O(2)	171.9(3)
C(5)	-C(4)	-C(6)	-O(1)	-179.6(3)
C(5)	-C(4)	-C(6)	-O(2)	-1.5(4)
N(1)	-C(5)	-C(5)c	-N(1)c	91.5(3)
N(1)	-C(5)	-C(5)c	-C(4)c	-87.7(3)
C(4)	-C(5)	-C(5)c	-N(1)c	-87.7(3)
C(4)	-C(5)	-C(5)c	-C(4)c	93.2(4)
C(9)	-C(8)	-C(8)b	-Pd(1)	-104.9(3)
C(9)	-C(8)	-C(8)b	-C(9)b	150.2(3)
C(9)	-C(8)	-C(8)b	-C(10)b	2.3(5)
C(10)	-C(8)	-C(8)b	-Pd(1)	107.2(3)
C(10)	-C(8)	-C(8)b	-C(9)b	2.3(5)
C(10)	-C(8)	-C(8)b	-C(10)b	-145.7(3)