Table S1 Atomic coordinates of the palladium complex 2

	x	y	z	U(eq)
Pd	2602(1)	2526(1)	3108(1)	44(1)
I	1687(1)	3041(1)	2038(1)	57(1)
P	3539(2)	1721(2)	3908(1)	48(1)
N	1485(6)	1117(7)	3321(3)	48(2)
C(1)	3688(7)	3895(10)	3046(4)	45(2)
C(2)	3394(9)	5089(11)	3117(5)	63(3)
C(3)	4114(12)	6108(12)	3107(5)	83(4)
C(4)	5147(10)	5823(14)	3031(5)	77(3)
C(5)	5410(9)	4591(14)	2937(5)	75(4)
C(6)	4669(9)	3638(12)	2950(4)	65(3)
C(7)	513(9)	1142(10)	3285(4)	58(3)
C(10)	-172(8)	2262(9)	3128(5)	53(3)
C(11)	210(8)	3508(11)	3209(5)	64(3)
C(12)	-526(9)	4532(11)	3110(5)	74(3)
C(13)	-1565(9)	4283(13)	2932(6)	82(4)
C(14)	-1943(9)	3068(12)	2828(6)	86(4)
C(15)	-1258(8)	2040(12)	2947(5)	74(4)
C(20)	3429(8)	2507(11)	4583(4)	57(3)
C(21)	3372(12)	1857(14)	5053(6)	98(5)
C(22)	3360(15)	2568(16)	5577(6)	119(6)
C(23)	3341(17)	3864(19)	5590(7)	151(8)
C(24)	3366(19)	4395(15)	5098(8)	174(10)
C(25)	3422(15)	3826(12)	4587(6)	124(6)
C(30)	4938(8)	1399(10)	3947(4)	56(3)
C(31)	5690(8)	2007(12)	4311(5)	66(3)
C(32)	6702(11)	1782(17)	4267(6)	98(5)
C(33)	6996(11)	932(16)	3875(6)	92(5)
C(34)	6236(11)	371(15)	3521(6)	85(4)
C(35)	5236(9)	595(13)	3550(5)	73(3)
C(40)	2944(9)	134(9)	3897(4)	56(3)
C(41)	1977(8)	-46(10)	3569(4)	52(3)
C(42)	1518(9)	-1236(10)	3515(5)	64(3)
C(43)	2012(10)	-2280(11)	3784(6)	78(4)
C(44)	2988(12)	-2137(11)	4132(5)	79(4)
C(45)	3502(10)	-950(11)	4192(4)	70(3)

Table S2 Anisotropic parameters of the palladium complex 2

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd	46(1)	36(1)	48(1)	3(1)	4(1)	4(1)
I	61(1)	51(1)	55(1)	9(1)	-2(1)	-6(1)
P	53(2)	40(2)	48(2)	2(1)	4(1)	5(1)
N	37(5)	44(5)	59(5)	-7(4)	2(4)	-1(4)
C(1)	43(6)	46(7)	44(5)	1(4)	3(4)	5(5)
C(2)	74(8)	48(7)	68(7)	-1(5)	13(6)	-2(6)
C(3)	120(12)	47(8)	81(9)	-4(6)	16(8)	-5(8)
C(4)	84(9)	61(9)	83(9)	11(7)	6(7)	-14(7)
C(5)	55(7)	89(11)	82(9)	17(7)	12(6)	-14(7)
C(6)	74(8)	58(7)	62(7)	0(6)	6(6)	4(6)
C(7)	82(8)	32(6)	58(7)	7(5)	8(5)	1(5)
C(10)	55(6)	38(7)	71(7)	7(5)	24(5)	2(5)
C(11)	57(7)	55(7)	83(8)	1(6)	20(5)	10(6)
C(12)	76(8)	37(7)	114(10)	6(6)	35(7)	2(6)
C(13)	54(8)	62(9)	133(12)	11(8)	23(7)	12(6)
C(14)	51(7)	51(8)	151(13)	19(8)	7(7)	5(6)
C(15)	48(7)	63(8)	116(11)	4(7)	26(6)	6(6)
C(20)	59(6)	65(7)	43(6)	-2(5)	-1(5)	5(5)
C(21)	160(14)	72(9)	68(9)	12(8)	40(9)	17(9)
C(22)	223(20)	79(11)	66(9)	11(8)	58(11)	40(12)
C(23)	277(24)	110(16)	64(11)	-20(10)	27(12)	71(16)
C(24)	394(32)	46(9)	100(13)	-27(9)	88(17)	-28(14)
C(25)	274(21)	36(8)	66(9)	-8(6)	44(11)	8(10)
C(30)	67(7)	53(7)	49(6)	16(5)	13(5)	23(6)
C(31)	41(6)	88(9)	65(7)	-6(6)	-2(5)	8(6)
C(32)	79(10)	122(14)	89(11)	18(10)	2(8)	-28(9)
C(33)	74(10)	128(13)	77(10)	30(9)	21(8)	42(9)
C(34)	80(10)	113(12)	66(9)	12(8)	19(7)	44(9)
C(35)	69(8)	81(9)	71(8)	5(7)	19(6)	20(7)
C(40)	86(8)	37(6)	46(6)	7(5)	18(5)	13(5)
C(41)	61(7)	43(6)	48(6)	-3(5)	-1(5)	9(5)
C(42)	76(8)	42(7)	73(8)	1(5)	9(6)	-2(6)
C(43)	85(9)	44(8)	104(11)	-1(7)	11(8)	-2(6)
C(44)	132(12)	30(7)	78(9)	12(5)	27(8)	10(7)
C(45)	94(9)	60(8)	52(7)	9(6)	7(6)	13(7)

Table S3 Complete bond distances and bond angles of the palladium complex 2

Pd-C(1)	2.032(10)	Pd-N	2.188(8)
Pd-P	2.235(3)	Pd-I	2.6697(9)
P-C(40)	1.829(11)	P-C(30)	1.833(10)
P-C(20)	1.835(11)	N-C(7)	1.250(12)
N-C(41)	1.449(12)	C(1)-C(2)	1.325(14)
C(1)-C(6)	1.361(13)	C(2)-C(3)	1.42(2)
C(3)-C(4)	1.42(2)	C(4)-C(5)	1.36(2)
C(5)-C(6)	1.39(2)	C(7)-C(10)	1.478(14)
C(10)-C(11)	1.396(14)	C(10)-C(15)	1.417(14)
C(11)-C(12)	1.426(14)	C(12)-C(13)	1.37(2)
C(13)-C(14)	1.37(2)	C(14)-C(15)	1.39(2)
C(20)-C(21)	1.32(2)	C(20)-C(25)	1.38(2)
C(21)-C(22)	1.46(2)	C(22)-C(23)	1.36(2)
C(23)-C(24)	1.30(2)	C(24)-C(25)	1.37(2)
C(30)-C(31)	1.35(2)	C(30)-C(35)	1.37(2)
C(31)-C(32)	1.36(2)	C(32)-C(33)	1.39(2)
C(33)-C(34)	1.32(2)	C(34)-C(35)	1.333(14)
C(40)-C(41)	1.370(14)	C(40)-C(45)	1.456(14)
C(41)-C(42)	1.375(14)	C(42)-C(43)	1.37(2)
C(43)-C(44)	1.39(2)	C(44)-C(45)	1.40(2)
C(1)-Pd-N	170.9(3)	C(1)-Pd-P	92.7(3)
N-Pd-P	80.3(2)	C(1)-Pd-I	89.1(2)
N-Pd-I	99.0(2)	P-Pd-I	166.56(7)
C(40)-P-C(30)	104.2(5)	C(40)-P-C(20)	108.7(5)
C(30)-P-C(20)	105.6(5)	C(40)-P-Pd	99.5(3)
C(30)-P-Pd	119.7(3)	C(20)-P-Pd	117.7(4)
C(7)-N-C(41)	114.3(8)	C(7)-N-Pd	132.3(7)
C(41)-N-Pd	113.4(6)	C(2)-C(1)-C(6)	120.5(10)
C(2)-C(1)-Pd	115.8(8)	C(6)-C(1)-Pd	123.7(8)
C(1)-C(2)-C(3)	119.9(11)	C(4)-C(3)-C(2)	119.1(12)
C(5)-C(4)-C(3)	119.4(12)	C(4)-C(5)-C(6)	118.7(12)
C(1)-C(6)-C(5)	122.3(11)	N-C(7)-C(10)	126.0(10)
C(11)-C(10)-C(15)	120.3(10)	C(11)-C(10)-C(7)	121.4(10)
C(15)-C(10)-C(7)	117.9(9)	C(10)-C(11)-C(12)	117.8(10)
C(13)-C(12)-C(11)	120.3(11)	C(12)-C(13)-C(14)	122.4(12)
C(13)-C(14)-C(15)	119.0(12)	C(14)-C(15)-C(10)	120.0(11)
C(21)-C(20)-C(25)	120.4(11)	C(21)-C(20)-P	122.5(10)
C(25)-C(20)-P	117.1(9)	C(20)-C(21)-C(22)	118.3(13)
C(23)-C(22)-C(21)	122.2(14)	C(24)-C(23)-C(22)	113.7(14)
C(23)-C(24)-C(25)	129(2)	C(24)-C(25)-C(20)	116.2(13)
C(31)-C(30)-C(35)	118.3(11)	C(31)-C(30)-P	123.0(9)
C(35)-C(30)-P	118.4(9)	C(30)-C(31)-C(32)	117.9(12)
C(31)-C(32)-C(33)	123.3(14)	C(34)-C(33)-C(32)	116.8(13)
C(33)-C(34)-C(35)	121.0(13)	C(34)-C(35)-C(30)	122.6(13)
C(41)-C(40)-C(45)	119.7(10)	C(41)-C(40)-P	118.3(7)
C(45)-C(40)-P	121.8(9)	C(40)-C(41)-C(42)	121.0(9)
C(40)-C(41)-N	114.2(9)	C(42)-C(41)-N	124.7(9)
C(43)-C(42)-C(41)	121.4(11)	C(42)-C(43)-C(44)	119.7(11)
C(43)-C(44)-C(45)	121.3(11)	C(44)-C(45)-C(40)	116.9(11)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table S4 Hydrogen coordinates of the palladium complex 2 (calculated)

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	2716(9)	5261(11)	3173(5)	76
H(3A)	3911(12)	6950(12)	3151(5)	100
H(4A)	5641(10)	6473(14)	3045(5)	92
H(5A)	6073(9)	4392(14)	2865(5)	90
H(6A)	4850(9)	2794(12)	2890(4)	78
H(7A)	191(9)	385(10)	3366(4)	69
H(11A)	922(8)	3666(11)	3324(5)	77
H(12A)	-297(9)	5373(11)	3167(5)	88
H(13A)	-2033(9)	4964(13)	2880(6)	99
H(14A)	-2647(9)	2931(12)	2680(6)	103
H(15A)	-1512(8)	1207(12)	2907(5)	89
H(21A)	3340(12)	968(14)	5049(6)	117
H(22A)	3365(15)	2118(16)	5914(6)	142
H(23A)	3312(17)	4331(19)	5919(7)	181
H(24A)	3342(19)	5285(15)	5093(8)	209
H(25A)	3454(15)	4302(12)	4261(6)	148
H(31A)	5521(8)	2565(12)	4585(5)	79
H(32A)	7224(11)	2218(17)	4511(6)	118
H(33A)	7696(11)	768(16)	3863(6)	111
H(34A)	6400(11)	-190(15)	3247(6)	102
H(35A)	4719(9)	189(13)	3290(5)	88
H(42A)	859(9)	-1332(10)	3292(5)	77
H(43A)	1698(10)	-3081(11)	3735(6)	94
H(44A)	3305(12)	-2843(11)	4329(5)	95
H(45A)	4167(10)	-860(11)	4410(4)	84

Table S5 Atomic coordinates of the palladium complex 3

	x	y	z	U(eq)
I	7259(1)	1848(1)	1008(1)	65(1)
Pd	4720(1)	2216(1)	2044(1)	38(1)
P	2547(1)	2444(1)	2902(1)	39(1)
N	3514(4)	1838(3)	764(2)	44(1)
C(1)	5770(4)	2540(4)	3257(3)	46(1)
C(2)	5700(5)	3645(4)	3648(3)	57(1)
C(3)	6427(7)	3852(6)	4500(4)	82(2)
C(4)	7217(6)	2910(8)	4962(4)	94(2)
C(5)	7311(6)	1777(7)	4577(4)	91(2)
C(6)	6612(6)	1580(5)	3718(4)	68(1)
C(8)	2501(4)	1157(4)	786(3)	49(1)
C(10)	4047(4)	2257(4)	-232(3)	45(1)
C(11)	4039(5)	3508(4)	-410(3)	55(1)
C(12)	4583(5)	3926(5)	-1344(4)	62(1)
C(13)	5164(5)	3123(5)	-2075(4)	63(1)
C(14)	5173(5)	1889(5)	-1886(3)	62(1)
C(15)	4594(5)	1455(4)	-960(3)	52(1)
C(20)	1392(4)	3718(3)	2356(3)	41(1)
C(21)	2021(5)	4749(4)	2020(4)	59(1)
C(22)	1231(6)	5698(4)	1527(4)	71(1)
C(23)	-183(6)	5630(5)	1386(4)	73(1)
C(24)	-829(6)	4625(5)	1735(5)	79(2)
C(25)	-42(5)	3669(4)	2228(4)	60(1)
C(30)	2350(4)	2592(4)	4271(3)	44(1)
C(31)	3223(5)	1789(4)	4873(3)	56(1)
C(32)	3174(6)	1923(5)	5907(4)	65(1)
C(33)	2259(6)	2820(5)	6361(4)	67(1)
C(34)	1360(7)	3576(5)	5803(4)	77(2)
C(35)	1413(6)	3477(5)	4743(4)	67(1)
C(40)	1667(4)	1102(3)	2674(3)	42(1)
C(41)	1745(4)	643(4)	1695(3)	46(1)
C(42)	1030(5)	-353(4)	1529(4)	58(1)
C(43)	294(5)	-923(4)	2325(4)	65(1)
C(44)	208(5)	-477(4)	3277(4)	63(1)
C(45)	882(5)	535(4)	3453(3)	53(1)

Table S6 Anisotropic parameters of the palladium complex 3

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I	39(1)	93(1)	65(1)	-30(1)	7(1)	-13(1)
Pd	34(1)	39(1)	42(1)	-5(1)	-1(1)	-4(1)
P	36(1)	39(1)	41(1)	-5(1)	0(1)	-4(1)
N	45(2)	46(2)	41(2)	-3(1)	-1(1)	-5(1)
C(1)	40(2)	52(2)	43(2)	0(2)	0(2)	-4(2)
C(2)	60(3)	61(3)	53(2)	-1(2)	-4(2)	-19(2)
C(3)	81(4)	91(4)	78(4)	-31(3)	-6(3)	-24(3)
C(4)	58(3)	163(7)	65(3)	-37(4)	-14(3)	-11(4)
C(5)	69(4)	133(6)	66(3)	0(4)	-22(3)	22(4)
C(6)	67(3)	68(3)	68(3)	-3(2)	-13(2)	11(2)
C(8)	46(2)	54(2)	49(2)	-10(2)	0(2)	-11(2)
C(10)	38(2)	54(2)	43(2)	1(2)	-4(2)	-7(2)
C(11)	50(2)	56(3)	58(3)	-1(2)	1(2)	-11(2)
C(12)	58(3)	64(3)	65(3)	10(2)	-4(2)	-16(2)
C(13)	57(3)	85(3)	48(2)	13(2)	-3(2)	-18(2)
C(14)	63(3)	82(3)	40(2)	-9(2)	1(2)	-6(2)
C(15)	59(3)	54(2)	43(2)	-4(2)	-4(2)	-6(2)
C(20)	41(2)	39(2)	42(2)	-5(2)	-1(2)	0(2)
C(21)	46(2)	49(2)	81(3)	3(2)	4(2)	-5(2)
C(22)	73(3)	47(3)	87(4)	7(2)	8(3)	2(2)
C(23)	87(4)	54(3)	74(3)	-2(2)	-19(3)	17(3)
C(24)	60(3)	68(3)	112(4)	-12(3)	-39(3)	4(3)
C(25)	51(3)	47(2)	84(3)	-2(2)	-18(2)	-5(2)
C(30)	43(2)	49(2)	43(2)	-6(2)	3(2)	-12(2)
C(31)	53(3)	64(3)	51(2)	-2(2)	-4(2)	-4(2)
C(32)	67(3)	79(3)	50(3)	4(2)	-12(2)	-15(3)
C(33)	77(3)	82(3)	47(2)	-8(2)	1(2)	-28(3)
C(34)	93(4)	76(3)	57(3)	-24(3)	5(3)	9(3)
C(35)	76(3)	66(3)	55(3)	-8(2)	-3(2)	10(2)
C(40)	35(2)	41(2)	49(2)	-7(2)	0(2)	-4(2)
C(41)	41(2)	44(2)	52(2)	-5(2)	5(2)	-7(2)
C(42)	61(3)	57(3)	60(3)	-22(2)	8(2)	-20(2)
C(43)	66(3)	52(3)	79(3)	-15(2)	13(3)	-25(2)
C(44)	69(3)	61(3)	62(3)	-2(2)	14(2)	-28(2)
C(45)	54(2)	54(2)	51(2)	-4(2)	5(2)	-16(2)

Table S7 Complete bond distances and bond angles of the palladium complex 3

I-Pd	2.6374(9)	Pd-C(1)	2.008(4)
Pd-N	2.182(3)	Pd-P	2.2362(12)
P-C(30)	1.811(4)	P-C(20)	1.823(4)
P-C(40)	1.827(4)	N-C(8)	1.277(5)
N-C(10)	1.443(5)	C(1)-C(2)	1.337(6)
C(1)-C(6)	1.387(6)	C(2)-C(3)	1.397(7)
C(3)-C(4)	1.351(9)	C(4)-C(5)	1.361(9)
C(5)-C(6)	1.389(7)	C(8)-C(41)	1.470(5)
C(10)-C(15)	1.362(6)	C(10)-C(11)	1.391(6)
C(11)-C(12)	1.377(6)	C(12)-C(13)	1.373(7)
C(13)-C(14)	1.374(7)	C(14)-C(15)	1.385(6)
C(20)-C(25)	1.370(6)	C(20)-C(21)	1.384(6)
C(21)-C(22)	1.375(6)	C(22)-C(23)	1.359(8)
C(23)-C(24)	1.373(8)	C(24)-C(25)	1.379(6)
C(30)-C(35)	1.367(6)	C(30)-C(31)	1.394(6)
C(31)-C(32)	1.374(6)	C(32)-C(33)	1.355(7)
C(33)-C(34)	1.347(7)	C(34)-C(35)	1.402(7)
C(40)-C(45)	1.386(5)	C(40)-C(41)	1.400(6)
C(41)-C(42)	1.389(6)	C(42)-C(43)	1.379(6)
C(43)-C(44)	1.361(7)	C(44)-C(45)	1.384(6)
C(1)-Pd-N	177.84(14)	C(1)-Pd-P	93.61(12)
N-Pd-P	84.47(9)	C(1)-Pd-I	87.88(11)
N-Pd-I	94.00(9)	P-Pd-I	177.39(3)
C(30)-P-C(20)	106.9(2)	C(30)-P-C(40)	104.9(2)
C(20)-P-C(40)	104.4(2)	C(30)-P-Pd	121.75(13)
C(20)-P-Pd	110.50(13)	C(40)-P-Pd	107.01(13)
C(8)-N-C(10)	116.2(3)	C(8)-N-Pd	126.6(3)
C(10)-N-Pd	116.6(2)	C(2)-C(1)-C(6)	117.9(4)
C(2)-C(1)-Pd	123.1(3)	C(6)-C(1)-Pd	119.0(3)
C(1)-C(2)-C(3)	122.4(5)	C(4)-C(3)-C(2)	119.6(5)
C(3)-C(4)-C(5)	119.3(5)	C(4)-C(5)-C(6)	120.9(6)
C(1)-C(6)-C(5)	119.9(5)	N-C(8)-C(41)	127.0(4)
C(15)-C(10)-C(11)	120.9(4)	C(15)-C(10)-N	121.3(4)
C(11)-C(10)-N	117.8(4)	C(12)-C(11)-C(10)	118.8(4)
C(13)-C(12)-C(11)	120.7(5)	C(12)-C(13)-C(14)	119.9(4)
C(13)-C(14)-C(15)	120.1(5)	C(10)-C(15)-C(14)	119.6(4)
C(25)-C(20)-C(21)	119.5(4)	C(25)-C(20)-P	122.6(3)
C(21)-C(20)-P	117.9(3)	C(22)-C(21)-C(20)	120.4(4)
C(23)-C(22)-C(21)	119.7(5)	C(22)-C(23)-C(24)	120.5(5)
C(23)-C(24)-C(25)	120.0(5)	C(20)-C(25)-C(24)	119.8(4)
C(35)-C(30)-C(31)	118.2(4)	C(35)-C(30)-P	123.1(3)
C(31)-C(30)-P	118.7(3)	C(32)-C(31)-C(30)	120.4(4)
C(33)-C(32)-C(31)	120.7(5)	C(34)-C(33)-C(32)	120.1(5)
C(33)-C(34)-C(35)	120.3(5)	C(30)-C(35)-C(34)	120.3(5)
C(45)-C(40)-C(41)	118.6(4)	C(45)-C(40)-P	121.2(3)
C(41)-C(40)-P	120.2(3)	C(42)-C(41)-C(40)	119.4(4)
C(42)-C(41)-C(8)	115.3(4)	C(40)-C(41)-C(8)	125.2(4)
C(43)-C(42)-C(41)	120.7(4)	C(44)-C(43)-C(42)	120.0(4)
C(43)-C(44)-C(45)	120.2(4)	C(44)-C(45)-C(40)	121.0(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table S8 Hydrogen coordinates of the palladium complex 3 (calculated)

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	5148(5)	4298(4)	3343(3)	68
H(3A)	6366(7)	4634(6)	4747(4)	98
H(4A)	7692(6)	3034(8)	5536(4)	113
H(5A)	7850(6)	1125(7)	4895(4)	110
H(6A)	6708(6)	806(5)	3451(4)	82
H(8A)	2210(4)	965(4)	159(3)	59
H(11A)	3674(5)	4053(4)	92(3)	66
H(12A)	4556(5)	4762(5)	-1481(4)	74
H(13A)	5550(5)	3414(5)	-2697(4)	76
H(14A)	5568(5)	1344(5)	-2380(3)	74
H(15A)	4580(5)	621(4)	-837(3)	63
H(21A)	2984(5)	4800(4)	2128(4)	71
H(22A)	1661(6)	6384(4)	1292(4)	85
H(23A)	-717(6)	6270(5)	1050(4)	88
H(24A)	-1798(6)	4588(5)	1638(5)	95
H(25A)	-483(5)	2993(4)	2473(4)	72
H(31A)	3842(5)	1159(4)	4572(3)	68
H(32A)	3776(6)	1392(5)	6299(4)	77
H(33A)	2252(6)	2914(5)	7059(4)	80
H(34A)	701(7)	4165(5)	6122(4)	92
H(35A)	808(6)	4017(5)	4360(4)	81
H(42A)	1047(5)	-639(4)	875(4)	70
H(43A)	-144(5)	-1613(4)	2211(4)	78
H(44A)	-304(5)	-852(4)	3810(4)	76
H(45A)	805(5)	840(4)	4104(3)	63