Table S1: Crystal Data and Details of the Structure Determination for **3b**.

Crystal Data

Empirical Formula			C17 H28 I2 N4 O2 Pd1
Formula Weight			680.63
Crystal System			Monoclinic
Space group		P21/n	(No. 14)
a, b, c [Angstrom]	7.8058(3)	30.126(2)	9.906(6)
alpha, beta, gamma [deg]	90	103.543(3)	90
V [Ang**3]			2264.8(14)
Z			4
D(obs), D(calc) [g/cm**3]		not measured,	1.996
F(000) [Electrons]			1304
Mu(MoKa) [/mm]			3.56

Data Collection

Temperature (K)			100
Radiation [Angstrom]		MoKa	0.71073
Theta Min-Max [Deg]		3.62,	26.38
Reflexion range	0<=h<=8,	0<=k<=37,	-12<=l<=12
Detector			Nonius KappaCCD
Tot., Uniq. Data		3963,	3963

Refinement

Nref, Npar			2865, 320
R1, wR2, S [I>2sigma(I)]		0.036, 0.066,	0.97
Max. and Av. Shift/Error			0.00, 0.00

Table S2: Atom Coordinates for **3b**.

	x	y	z	U(eq)
Pd(1)	0.25954(5)	0.132576(13)	0.33251(4)	0.02201(12)
I(1)	0.20462(5)	0.110376(13)	0.07117(4)	0.03538(13)
I(2)	0.31905(4)	0.162772(12)	0.58820(4)	0.03040(12)
C(1)	0.4559(6)	0.1679(2)	0.3004(5)	0.0204(12)
N(2)	0.4755(5)	0.2093(2)	0.2570(5)	0.0255(11)
C(3)	0.6447(8)	0.2153(2)	0.2379(6)	0.034(2)
C(4)	0.7288(8)	0.1769(2)	0.2699(6)	0.030(2)
N(5)	0.6136(5)	0.1479(2)	0.3087(4)	0.0218(10)
C(6)	0.3425(7)	0.2466(2)	0.2282(6)	0.0327(14)
C(7)	0.3318(9)	0.2619(3)	0.0812(8)	0.049(2)
C(8)	0.1621(8)	0.2316(2)	0.2409(8)	0.044(2)
C(9)	0.4067(10)	0.2833(2)	0.3320(8)	0.053(2)
C(10)	0.6549(7)	0.1018(2)	0.3471(6)	0.0266(14)
N(11)	0.7055(5)	0.09541(14)	0.4969(4)	0.0214(10)
C(12)	0.6116(7)	0.0748(2)	0.5735(6)	0.0230(13)
N(13)	0.6981(5)	0.07653(14)	0.7047(4)	0.0221(10)
C(14)	0.8532(7)	0.0993(2)	0.7123(6)	0.0252(13)
C(15)	0.8593(7)	0.1113(2)	0.5835(6)	0.0221(13)
C(16)	0.6402(7)	0.0594(2)	0.8303(6)	0.0316(14)
C(17)	0.4569(9)	0.0385(3)	0.7781(8)	0.052(2)
C(18)	0.6323(9)	0.0988(3)	0.9243(7)	0.043(2)
C(19)	0.7738(10)	0.0247(3)	0.8987(7)	0.045(2)
C(20)	0.1044(5)	0.0519(2)	0.3717(4)	0.035(2)
C(21)	-0.0437(9)	0.0158(2)	0.3338(8)	0.038(2)
O(1)	0.0585(4)	0.08929(14)	0.3534(4)	0.0281(10)
O(2)	0.2601(5)	0.03542(13)	0.4099(4)	0.0369(11)
I(3)	0.1044(5)	0.0519(2)	0.3717(4)	0.035(2)

Table S3: Anisotropic atom thermal parameters for **3b**.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd(1)	0.0176(3)	0.0210(2)	0.0273(2)	0.0008(2)	0.0051(2)	-0.0019(2)
I(1)	0.0325(3)	0.0445(3)	0.0264(2)	-0.0021(2)	0.0013(2)	-0.0035(2)
I(2)	0.0265(2)	0.0322(2)	0.0330(2)	-0.0074(2)	0.0079(2)	-0.0022(2)
C(1)	0.017(3)	0.023(3)	0.018(3)	0.004(2)	-0.003(2)	0.000(2)
N(2)	0.017(3)	0.024(3)	0.033(3)	0.010(2)	0.001(2)	0.000(2)
C(3)	0.032(4)	0.033(4)	0.037(4)	0.009(3)	0.007(3)	-0.009(3)
C(4)	0.024(4)	0.039(4)	0.029(4)	0.004(3)	0.010(3)	-0.006(3)
N(5)	0.012(3)	0.023(2)	0.029(3)	0.003(2)	0.003(2)	0.003(2)
C(6)	0.030(4)	0.025(3)	0.040(4)	0.002(3)	0.002(3)	-0.002(3)
C(7)	0.042(5)	0.045(5)	0.056(5)	0.022(4)	0.000(4)	-0.004(3)
C(8)	0.039(4)	0.034(4)	0.059(5)	0.015(3)	0.011(4)	0.012(3)
C(9)	0.061(5)	0.034(4)	0.056(5)	0.005(4)	-0.002(4)	0.007(4)
C(10)	0.025(4)	0.027(3)	0.027(4)	-0.001(3)	0.005(3)	0.002(3)
N(11)	0.019(3)	0.024(3)	0.020(3)	-0.001(2)	0.002(2)	0.005(2)
C(12)	0.023(3)	0.024(3)	0.022(3)	0.000(3)	0.005(3)	-0.004(2)
N(13)	0.022(3)	0.024(3)	0.019(3)	-0.002(2)	0.002(2)	-0.001(2)
C(14)	0.015(3)	0.026(3)	0.034(4)	-0.002(3)	0.005(3)	-0.005(2)
C(15)	0.013(3)	0.026(3)	0.027(3)	-0.001(3)	0.003(2)	-0.001(2)
C(16)	0.031(4)	0.040(4)	0.026(3)	0.003(3)	0.010(3)	-0.007(3)
C(17)	0.045(5)	0.074(6)	0.043(5)	0.003(4)	0.021(4)	-0.027(4)
C(18)	0.043(4)	0.054(5)	0.038(4)	-0.002(4)	0.020(3)	0.006(3)
C(19)	0.059(5)	0.045(5)	0.030(4)	0.011(3)	0.007(4)	-0.007(4)
C(20)	0.032(4)	0.047(4)	0.030(3)	0.003(2)	0.014(2)	-0.009(2)
C(21)	0.027(4)	0.030(4)	0.058(5)	-0.003(4)	0.008(3)	-0.011(3)
O(1)	0.017(2)	0.028(3)	0.042(3)	-0.002(2)	0.011(2)	-0.004(2)
O(2)	0.030(3)	0.033(3)	0.042(3)	-0.004(2)	-0.001(2)	0.004(2)
I(3)	0.032(4)	0.047(4)	0.030(3)	0.003(2)	0.014(2)	-0.009(2)

Table S4: Hydrogen atom parameters for **3b**.

	x	y	z	U(eq)
H(3)	0.684(7)	0.241(2)	0.201(5)	0.042
H(4)	0.819(7)	0.169(2)	0.275(7)	0.042
H(7A)	0.417(8)	0.275(2)	0.072(7)	0.053
H(7B)	0.248(7)	0.287(2)	0.063(6)	0.053
H(7C)	0.295(7)	0.237(2)	0.018(6)	0.053
H(8A)	0.150(7)	0.217(2)	0.331(6)	0.053
H(8B)	0.135(7)	0.210(2)	0.173(7)	0.053
H(8C)	0.082(7)	0.254(2)	0.201(6)	0.053
H(9A)	0.511(8)	0.297(2)	0.330(6)	0.053
H(9B)	0.412(7)	0.274(2)	0.424(6)	0.053
H(9C)	0.316(7)	0.312(2)	0.315(6)	0.053
H(10A)	0.749(7)	0.093(2)	0.304(6)	0.042
H(10B)	0.545(7)	0.084(2)	0.315(5)	0.042
H(12)	0.510(7)	0.060(2)	0.547(6)	0.042
H(14)	0.924(7)	0.107(2)	0.792(6)	0.042
H(15)	0.938(7)	0.124(2)	0.547(6)	0.042
H(17A)	0.370(7)	0.065(2)	0.729(6)	0.053
H(17B)	0.422(7)	0.032(2)	0.859(6)	0.053
H(17C)	0.473(7)	0.009(2)	0.715(6)	0.053
H(18A)	0.568(7)	0.126(2)	0.891(6)	0.053
H(18B)	0.745(8)	0.111(2)	0.961(6)	0.053
H(18C)	0.596(7)	0.087(2)	0.998(6)	0.053
H(19A)	0.779(7)	-0.002(2)	0.841(6)	0.053
H(19B)	0.746(8)	0.014(2)	0.956(7)	0.053
H(19C)	0.889(7)	0.040(2)	0.930(6)	0.053
H(21A)	-0.008(7)	-0.014(2)	0.347(6)	0.053
H(21B)	-0.101(7)	0.022(2)	0.238(7)	0.053
H(21C)	-0.138(8)	0.018(2)	0.392(7)	0.053

Table S5: Bond lengths (Å) for **3b**.

Pd(1)-C(1)	1.953(5)
Pd(1)-O(1)	2.088(4)
Pd(1)-I(1)	2.610(2)
Pd(1)-I(2)	2.628(2)
C(1)-N(2)	1.338(6)
C(1)-N(5)	1.356(6)
N(2)-C(3)	1.389(7)
N(2)-C(6)	1.513(7)
C(3)-C(4)	1.330(8)
C(3)-H(3)	0.93(5)
C(4)-N(5)	1.372(7)
C(4)-H(4)	0.73(5)
N(5)-C(10)	1.455(7)
C(6)-C(7)	1.511(9)
C(6)-C(8)	1.512(8)
C(6)-C(9)	1.513(9)
C(7)-H(7A)	0.80(6)
C(7)-H(7B)	0.98(6)
C(7)-H(7C)	0.98(6)
C(8)-H(8A)	1.02(6)
C(8)-H(8B)	0.92(6)
C(8)-H(8C)	0.94(6)
C(9)-H(9A)	0.91(6)
C(9)-H(9B)	0.94(6)
C(9)-H(9C)	1.11(6)
C(10)-N(11)	1.457(7)
C(10)-H(10A)	0.97(5)
C(10)-H(10B)	1.00(5)
N(11)-C(12)	1.326(6)
N(11)-C(15)	1.387(6)
C(12)-N(13)	1.319(6)
C(12)-H(12)	0.89(5)
N(13)-C(14)	1.378(6)
N(13)-C(16)	1.510(6)
C(14)-C(15)	1.338(8)
C(14)-H(14)	0.89(5)
C(15)-H(15)	0.87(5)
C(16)-C(18)	1.517(9)
C(16)-C(19)	1.520(9)
C(16)-C(17)	1.538(8)
C(17)-H(17A)	1.09(6)
C(17)-H(17B)	0.92(6)
C(17)-H(17C)	1.10(6)
C(18)-H(18A)	0.99(6)
C(18)-H(18B)	0.94(6)
C(18)-H(18C)	0.92(6)
C(19)-H(19A)	0.98(6)
C(19)-H(19B)	0.73(6)
C(19)-H(19C)	1.00(5)
C(20)-O(1)	1.183(5)
C(20)-O(2)	1.285(5)
C(20)-C(21)	1.568(7)
C(21)-H(21A)	0.94(6)
C(21)-H(21B)	0.96(6)
C(21)-H(21C)	1.04(6)

Table S6: Bond Angles (°) for **3b**.

C(1)-Pd(1)-O(1)	173.6(2)
C(1)-Pd(1)-I(1)	86.1(2)
O(1)-Pd(1)-I(1)	89.18(11)
C(1)-Pd(1)-I(2)	90.0(2)
O(1)-Pd(1)-I(2)	95.04(11)
I(1)-Pd(1)-I(2)	174.51(2)
N(2)-C(1)-N(5)	105.2(4)
N(2)-C(1)-Pd(1)	135.5(4)
N(5)-C(1)-Pd(1)	118.9(4)
C(1)-N(2)-C(3)	110.5(4)
C(1)-N(2)-C(6)	128.9(4)
C(3)-N(2)-C(6)	120.6(4)
C(4)-C(3)-N(2)	106.6(5)
C(4)-C(3)-H(3)	128(3)
N(2)-C(3)-H(3)	125(3)
C(3)-C(4)-N(5)	107.5(5)
C(3)-C(4)-H(4)	136(5)
N(5)-C(4)-H(4)	116(5)
C(1)-N(5)-C(4)	110.2(5)
C(1)-N(5)-C(10)	125.6(4)
C(4)-N(5)-C(10)	124.2(5)
C(7)-C(6)-C(8)	109.3(5)
C(7)-C(6)-C(9)	111.5(6)
C(8)-C(6)-C(9)	109.2(6)
C(7)-C(6)-N(2)	106.8(5)
C(8)-C(6)-N(2)	111.9(5)
C(9)-C(6)-N(2)	108.1(5)
C(6)-C(7)-H(7A)	114(5)
C(6)-C(7)-H(7B)	107(4)
H(7A)-C(7)-H(7B)	97(6)
C(6)-C(7)-H(7C)	109(4)
H(7A)-C(7)-H(7C)	116(6)
H(7B)-C(7)-H(7C)	113(5)
C(6)-C(8)-H(8A)	119(3)
C(6)-C(8)-H(8B)	102(4)
H(8A)-C(8)-H(8B)	107(5)
C(6)-C(8)-H(8C)	107(4)
H(8A)-C(8)-H(8C)	119(5)
H(8B)-C(8)-H(8C)	100(5)
C(6)-C(9)-H(9A)	118(4)
C(6)-C(9)-H(9B)	111(4)
H(9A)-C(9)-H(9B)	109(5)
C(6)-C(9)-H(9C)	112(3)
H(9A)-C(9)-H(9C)	101(5)
H(9B)-C(9)-H(9C)	106(5)
N(5)-C(10)-N(11)	112.6(5)
N(5)-C(10)-H(10A)	106(3)
N(11)-C(10)-H(10A)	111(3)
N(5)-C(10)-H(10B)	108(3)
N(11)-C(10)-H(10B)	105(3)
H(10A)-C(10)-H(10B)	113(5)
C(12)-N(11)-C(15)	108.8(4)
C(12)-N(11)-C(10)	126.2(4)
C(15)-N(11)-C(10)	125.0(5)
N(13)-C(12)-N(11)	108.7(5)
N(13)-C(12)-H(12)	122(4)
N(11)-C(12)-H(12)	129(4)
C(12)-N(13)-C(14)	108.3(5)
C(12)-N(13)-C(16)	128.0(4)
C(14)-N(13)-C(16)	123.6(4)
C(15)-C(14)-N(13)	108.0(5)
C(15)-C(14)-H(14)	128(4)

N(13)-C(14)-H(14)	123(4)
C(14)-C(15)-N(11)	106.1(5)
C(14)-C(15)-H(15)	134(4)
N(11)-C(15)-H(15)	119(4)
N(13)-C(16)-C(18)	107.6(5)
N(13)-C(16)-C(19)	107.2(4)
C(18)-C(16)-C(19)	112.8(5)
N(13)-C(16)-C(17)	107.3(5)
C(18)-C(16)-C(17)	111.0(5)
C(19)-C(16)-C(17)	110.8(6)
C(16)-C(17)-H(17A)	106(3)
C(16)-C(17)-H(17B)	104(4)
H(17A)-C(17)-H(17B)	106(5)
C(16)-C(17)-H(17C)	107(3)
H(17A)-C(17)-H(17C)	119(5)
H(17B)-C(17)-H(17C)	114(5)
C(16)-C(18)-H(18A)	123(4)
C(16)-C(18)-H(18B)	112(4)
H(18A)-C(18)-H(18B)	100(5)
C(16)-C(18)-H(18C)	105(4)
H(18A)-C(18)-H(18C)	111(5)
H(18B)-C(18)-H(18C)	105(5)
C(16)-C(19)-H(19A)	114(3)
C(16)-C(19)-H(19B)	111(6)
H(19A)-C(19)-H(19B)	99(7)
C(16)-C(19)-H(19C)	107(3)
H(19A)-C(19)-H(19C)	114(5)
H(19B)-C(19)-H(19C)	112(6)
O(1)-C(20)-O(2)	130.1(4)
O(1)-C(20)-C(21)	116.4(4)
O(2)-C(20)-C(21)	113.3(5)
C(20)-C(21)-H(21A)	117(4)
C(20)-C(21)-H(21B)	105(4)
H(21A)-C(21)-H(21B)	112(5)
C(20)-C(21)-H(21C)	113(3)
H(21A)-C(21)-H(21C)	102(5)
H(21B)-C(21)-H(21C)	108(5)
C(20)-O(1)-Pd(1)	113.7(3)

Table S7: Crystal Data and Details of the Structure Determination for **4b**.

Crystal Data

Empirical Formula			C17 H28 I3 N5 Pd 1
Formula Weight			789.54
Crystal System			Monoclinic
Space group		P21	(No. 4)
a, b, c [Angstrom]	9.8088(2)	10.7198(4)	12.7248(4)
alpha, beta, gamma [deg]	90	108.249(2)	90
V [Ang**3]			1270.70(7)
Z			2
D(obs), D(calc) [g/cm**3]		not measured,	2.064
F(000) [Electrons]			740
Mu(MoKa) [/mm]			4.39

Data Collection

Temperature (K)			100
Radiation [Angstrom]		MoKa	0.71073
Theta Min-Max [Deg]			4.16, 26.39
Reflexion range	-16<=h<=0,	-13<=k<=0,	-15<=l<=15
Detector			Nonius KappaCCD
Tot., Uniq. Data			2529, 2529

Refinement

Nref, Npar			2524, 236
R1, wR2, S [I>2sigma(I)]		0.037, 0.103,	1.12
Absolute structure parameter			0.07(5)
Max. and Av. Shift/Error			0.00, 0.00
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]			-1.32, 1.27

Table S8: Atom Coordinates for **4b**.

	x	y	z	U(eq)
Pd(1)	0.40245(7)	0.01135(6)	0.20518(4)	0.0206(2)
I(1)	0.12550(7)	-0.00256(6)	0.17389(6)	0.0373(2)
I(2)	0.67661(6)	-0.00073(6)	0.22450(5)	0.0289(2)
I(3)	0.41175(6)	0.25715(7)	0.24852(5)	0.0296(2)
C(1)	0.3939(10)	-0.1697(9)	0.1690(7)	0.023(2)
N(2)	0.4101(9)	-0.2737(7)	0.2310(7)	0.028(2)
C(3)	0.3983(13)	-0.3789(9)	0.1653(10)	0.037(3)
C(4)	0.3779(13)	-0.3405(10)	0.0617(9)	0.036(2)
N(5)	0.3767(9)	-0.2122(7)	0.0639(6)	0.025(2)
C(6)	0.4350(13)	-0.2879(10)	0.3550(8)	0.033(2)
C(7)	0.570(2)	-0.360(2)	0.4019(10)	0.060(4)
C(8)	0.448(2)	-0.1626(11)	0.4107(8)	0.046(3)
C(9)	0.305(2)	-0.3576(14)	0.3685(13)	0.059(4)
C(10)	0.3648(13)	-0.1327(11)	-0.0296(8)	0.034(2)
N(11)	0.2287(9)	-0.1554(8)	-0.1178(6)	0.024(2)
C(12)	0.2154(10)	-0.1687(8)	-0.2244(7)	0.021(2)
N(13)	0.0773(9)	-0.1786(7)	-0.2808(6)	0.023(2)
C(14)	-0.0002(12)	-0.1728(11)	-0.2078(8)	0.035(2)
C(15)	0.0909(13)	-0.1548(12)	-0.1062(8)	0.038(3)
C(16)	0.0145(11)	-0.1965(9)	-0.4061(7)	0.027(2)
C(17)	-0.037(2)	-0.3288(12)	-0.4252(9)	0.043(3)
C(18)	-0.1082(13)	-0.1028(12)	-0.4467(9)	0.039(2)
C(19)	0.1299(13)	-0.167(2)	-0.4566(8)	0.053(4)
N(20)	0.155(3)	0.117(2)	0.738(2)	0.100(7)
C(21)	0.162(2)	0.1634(14)	0.8190(13)	0.058(4)
C(22)	0.167(3)	0.223(2)	0.9199(13)	0.085(6)

Table S9: Anisotropic atom thermal parameters for **4b**.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd(1)	0.0256(4)	0.0162(3)	0.0196(3)	-0.0016(2)	0.0066(3)	-0.0026(2)
I(1)	0.0296(4)	0.0355(4)	0.0489(4)	-0.0138(3)	0.0154(3)	-0.0059(3)
I(2)	0.0253(3)	0.0281(3)	0.0314(3)	0.0048(2)	0.0061(3)	-0.0008(2)
I(3)	0.0304(3)	0.0189(3)	0.0406(3)	-0.0053(2)	0.0130(3)	-0.0028(2)
C(1)	0.028(5)	0.019(4)	0.021(4)	0.001(3)	0.006(3)	0.000(3)
N(2)	0.039(5)	0.015(4)	0.029(4)	-0.003(3)	0.012(4)	-0.001(3)
C(3)	0.055(7)	0.010(4)	0.039(6)	-0.003(4)	0.003(5)	-0.002(4)
C(4)	0.053(7)	0.019(5)	0.030(5)	-0.005(4)	0.003(5)	0.006(4)
N(5)	0.035(4)	0.017(4)	0.022(3)	-0.010(3)	0.009(3)	-0.001(3)
C(6)	0.057(7)	0.024(4)	0.025(4)	0.006(4)	0.021(5)	0.005(4)
C(7)	0.060(9)	0.084(11)	0.031(6)	-0.001(6)	0.008(6)	0.015(8)
C(8)	0.091(10)	0.030(6)	0.020(4)	-0.003(4)	0.019(5)	-0.018(6)
C(9)	0.077(10)	0.048(7)	0.066(8)	-0.011(7)	0.043(8)	-0.028(7)
C(10)	0.045(7)	0.034(5)	0.026(4)	0.000(4)	0.014(5)	-0.006(4)
N(11)	0.027(4)	0.026(4)	0.020(3)	0.002(3)	0.010(3)	0.005(3)
C(12)	0.023(5)	0.019(4)	0.014(3)	-0.003(3)	-0.002(3)	0.005(3)
N(13)	0.026(4)	0.021(4)	0.022(4)	0.002(3)	0.005(3)	0.008(3)
C(14)	0.028(5)	0.044(6)	0.032(5)	-0.004(4)	0.007(4)	-0.007(5)
C(15)	0.041(6)	0.048(6)	0.029(5)	-0.010(4)	0.019(5)	-0.019(5)
C(16)	0.024(5)	0.033(5)	0.016(4)	0.002(3)	-0.004(4)	0.008(4)
C(17)	0.056(8)	0.034(6)	0.029(5)	-0.005(4)	-0.003(5)	0.002(5)
C(18)	0.041(6)	0.039(6)	0.033(5)	0.004(4)	0.005(5)	0.010(5)
C(19)	0.033(6)	0.106(12)	0.016(4)	-0.006(5)	0.003(4)	0.012(7)
N(20)	0.17(2)	0.062(10)	0.093(12)	-0.025(9)	0.074(13)	-0.043(11)
C(21)	0.079(11)	0.044(7)	0.057(8)	0.009(7)	0.032(8)	-0.008(7)
C(22)	0.16(2)	0.048(9)	0.057(8)	0.019(7)	0.043(11)	0.023(10)

Table S10: Hydrogen atom parameters for **4b**.

	x	y	z	U(eq)
H(3)	0.4036(13)	-0.4613(9)	0.1892(10)	0.045
H(4)	0.3666(13)	-0.3908(10)	0.0000(9)	0.044
H(7A)	0.561(2)	-0.440(2)	0.3661(10)	0.089
H(7B)	0.588(2)	-0.372(2)	0.4799(10)	0.089
H(7C)	0.649(2)	-0.315(2)	0.3901(10)	0.089
H(8A)	0.361(2)	-0.1166(11)	0.3800(8)	0.069
H(8B)	0.526(2)	-0.1172(11)	0.3989(8)	0.069
H(8C)	0.466(2)	-0.1741(11)	0.4886(8)	0.069
H(9A)	0.220(2)	-0.3088(14)	0.3374(13)	0.088
H(9B)	0.319(2)	-0.3716(14)	0.4457(13)	0.088
H(9C)	0.295(2)	-0.4363(14)	0.3308(13)	0.088
H(10A)	0.4445(13)	-0.1486(11)	-0.0576(8)	0.041
H(10B)	0.3695(13)	-0.0461(11)	-0.0066(8)	0.041
H(12)	0.2906(10)	-0.1706(8)	-0.2543(7)	0.025
H(14)	-0.0994(12)	-0.1802(11)	-0.2260(8)	0.042
H(15)	0.0679(13)	-0.1441(12)	-0.0412(8)	0.045
H(17A)	-0.110(2)	-0.3425(12)	-0.3914(9)	0.065
H(17B)	0.042(2)	-0.3844(12)	-0.3931(9)	0.065
H(17C)	-0.075(2)	-0.3443(12)	-0.5033(9)	0.065
H(18A)	-0.0707(13)	-0.0195(12)	-0.4329(9)	0.059
H(18B)	-0.1767(13)	-0.1160(12)	-0.4079(9)	0.059
H(18C)	-0.1542(13)	-0.1139(12)	-0.5246(9)	0.059
H(19A)	0.1587(13)	-0.082(2)	-0.4420(8)	0.079
H(19B)	0.0940(13)	-0.181(2)	-0.5350(8)	0.079
H(19C)	0.2110(13)	-0.221(2)	-0.4249(8)	0.079
H(22A)	0.264(3)	0.24(2)	0.963(7)	0.128
H(22B)	0.12(2)	0.171(8)	0.961(7)	0.128
H(22C)	0.12(2)	0.301(9)	0.9038(13)	0.128

Table S11: Bond lengths (Å) for **4b**.

Pd(1)-C(1)	1.990(9)
Pd(1)-I(1)	2.6235(8)
Pd(1)-I(2)	2.6258(8)
Pd(1)-I(3)	2.6878(11)
C(1)-N(2)	1.346(12)
C(1)-N(5)	1.373(11)
N(2)-C(3)	1.387(13)
N(2)-C(6)	1.526(12)
C(3)-C(4)	1.33(2)
C(3)-H(3)	0.93
C(4)-N(5)	1.376(13)
C(4)-H(4)	0.93
N(5)-C(10)	1.438(12)
C(6)-C(7)	1.49(2)
C(6)-C(8)	1.50(2)
C(6)-C(9)	1.53(2)
C(7)-H(7A)	0.96
C(7)-H(7B)	0.96
C(7)-H(7C)	0.96
C(8)-H(8A)	0.96
C(8)-H(8B)	0.96
C(8)-H(8C)	0.96
C(9)-H(9A)	0.96
C(9)-H(9B)	0.96
C(9)-H(9C)	0.96
C(10)-N(11)	1.471(14)
C(10)-H(10A)	0.97
C(10)-H(10B)	0.97
N(11)-C(12)	1.329(11)
N(11)-C(15)	1.405(13)
C(12)-N(13)	1.324(13)
C(12)-H(12)	0.93
N(13)-C(14)	1.374(12)
N(13)-C(16)	1.531(11)
C(14)-C(15)	1.34(2)
C(14)-H(14)	0.93
C(15)-H(15)	0.93
C(16)-C(17)	1.50(2)
C(16)-C(19)	1.50(2)
C(16)-C(18)	1.528(14)
C(17)-H(17A)	0.96
C(17)-H(17B)	0.96
C(17)-H(17C)	0.96
C(18)-H(18A)	0.96
C(18)-H(18B)	0.96
C(18)-H(18C)	0.96
C(19)-H(19A)	0.96
C(19)-H(19B)	0.96
C(19)-H(19C)	0.96
N(20)-C(21)	1.12(2)
C(21)-C(22)	1.42(2)
C(22)-H(22A)	0.96
C(22)-H(22B)	0.96
C(22)-H(22C)	0.96

Table S12: Bond Angles (°) for **4b**.

C(1)-Pd(1)-I(1)	86.7(3)
C(1)-Pd(1)-I(2)	86.6(3)
I(1)-Pd(1)-I(2)	173.13(3)
C(1)-Pd(1)-I(3)	178.6(2)
I(1)-Pd(1)-I(3)	93.09(3)
I(2)-Pd(1)-I(3)	93.51(3)
N(2)-C(1)-N(5)	104.6(8)
N(2)-C(1)-Pd(1)	133.1(7)
N(5)-C(1)-Pd(1)	122.2(6)
C(1)-N(2)-C(3)	110.4(8)
C(1)-N(2)-C(6)	129.8(8)
C(3)-N(2)-C(6)	119.8(8)
C(4)-C(3)-N(2)	107.6(8)
C(4)-C(3)-H(3)	126.2(6)
N(2)-C(3)-H(3)	126.2(6)
C(3)-C(4)-N(5)	106.8(9)
C(3)-C(4)-H(4)	126.7(6)
N(5)-C(4)-H(4)	126.6(6)
C(4)-N(5)-C(1)	110.6(8)
C(4)-N(5)-C(10)	125.1(8)
C(1)-N(5)-C(10)	124.3(8)
C(7)-C(6)-C(8)	110.0(11)
C(7)-C(6)-N(2)	107.4(8)
C(8)-C(6)-N(2)	111.1(8)
C(7)-C(6)-C(9)	111.5(12)
C(8)-C(6)-C(9)	109.6(10)
N(2)-C(6)-C(9)	107.2(10)
C(6)-C(7)-H(7A)	109.6(8)
C(6)-C(7)-H(7B)	109.4(6)
H(7A)-C(7)-H(7B)	109.5
C(6)-C(7)-H(7C)	109.4(8)
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.5
H(7B)-C(7)-H(7C)	109.5
C(6)-C(8)-H(8A)	109.5(7)
C(6)-C(8)-H(8B)	109.4(6)
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
C(6)-C(8)-H(8C)	109.5(5)
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
C(6)-C(9)-H(9A)	109.4(8)
C(6)-C(9)-H(9B)	109.5(7)
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
C(6)-C(9)-H(9C)	109.5(7)
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
N(5)-C(10)-N(11)	110.6(8)
N(5)-C(10)-H(10A)	109.7(6)
N(11)-C(10)-H(10A)	109.6(5)
N(5)-C(10)-H(10B)	109.4(5)
N(11)-C(10)-H(10B)	109.4(6)
H(10A)-C(10)-H(10B)	108.1
C(12)-N(11)-C(15)	108.6(8)
C(12)-N(11)-C(10)	124.9(8)
C(15)-N(11)-C(10)	126.3(7)
N(13)-C(12)-N(11)	108.5(8)
N(13)-C(12)-H(12)	125.7(5)
N(11)-C(12)-H(12)	125.8(5)
C(12)-N(13)-C(14)	108.6(8)
C(12)-N(13)-C(16)	125.7(8)
C(14)-N(13)-C(16)	125.7(8)
C(15)-C(14)-N(13)	108.5(9)
C(15)-C(14)-H(14)	125.7(6)

N(13)-C(14)-H(14)	125.8(6)
C(14)-C(15)-N(11)	105.8(8)
C(14)-C(15)-H(15)	127.1(6)
N(11)-C(15)-H(15)	127.1(5)
C(17)-C(16)-C(19)	112.9(10)
C(17)-C(16)-C(18)	112.2(10)
C(19)-C(16)-C(18)	109.8(9)
C(17)-C(16)-N(13)	107.0(8)
C(19)-C(16)-N(13)	108.0(8)
C(18)-C(16)-N(13)	106.7(8)
C(16)-C(17)-H(17A)	109.5(7)
C(16)-C(17)-H(17B)	109.4(6)
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(16)-C(17)-H(17C)	109.5(6)
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
C(16)-C(18)-H(18A)	109.4(6)
C(16)-C(18)-H(18B)	109.6(6)
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
C(16)-C(18)-H(18C)	109.5(5)
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
C(16)-C(19)-H(19A)	109.4(8)
C(16)-C(19)-H(19B)	109.6(5)
H(19A)-C(19)-H(19B)	109.5
C(16)-C(19)-H(19C)	109.5(7)
H(19A)-C(19)-H(19C)	109.5
H(19B)-C(19)-H(19C)	109.5
N(20)-C(21)-C(22)	178(2)
C(21)-C(22)-H(22A)	109.7(12)
C(21)-C(22)-H(22B)	109.3(10)
H(22A)-C(22)-H(22B)	109.4
C(21)-C(22)-H(22C)	109.4(9)
H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5(2)
H(22B)-C(22)-H(22C)	109.46(8)

Table S13: Crystal Data and Details of the Structure Determination for **5b**.

Crystal Data

Empirical Formula			C17 H27 I2 N5 Pd 1
Formula Weight			661.64
Crystal System			Orthorhombic
Space group		Pnma	(No. 62)
a, b, c [Angstrom]	13.5508(2)	16.8104(2)	10.13580(10)
alpha, beta, gamma [deg]	90	90	90
V [Ang**3]			2308.88(5)
Z			4
D(obs), D(calc) [g/cm**3]		not measured,	1.903
F(000) [Electrons]			1264
Mu(MoKa) [/mm]			3.49

Data Collection

Temperature (K)			100
Radiation [Angstrom]		MoKa	0.71073
Theta Min-Max [Deg]			2.35, 26.36
Reflexion range	-16<=h<=16,	-20<=k<=20,	-12<=l<=12
Detector			Nonius KappaCCD
Tot., Uniq. Data			4421, 2422

Refinement

Nref, Npar			2196, 123
R1, wR2, S [I>2sigma(I)]		0.027, 0.074,	1.06
Max. and Av. Shift/Error			0.00, 0.00
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]			-0.88, 0.88

Table S14: Atom Coordinates for **5b**.

	x	y	z	U(eq)
Pd(1)	0.17336(2)	0.2500	0.09561(3)	0.03224(12)
I(1)	0.10189(2)	0.136950(12)	0.25396(2)	0.05064(12)
C(1)	0.2554(2)	0.3293(2)	-0.0033(3)	0.0358(5)
N(2)	0.3545(2)	0.32034(14)	0.0155(2)	0.0366(5)
C(3)	0.4066(2)	0.3787(2)	-0.0493(3)	0.0459(7)
C(4)	0.3402(2)	0.4246(2)	-0.1079(3)	0.0498(8)
N(5)	0.2466(2)	0.39353(14)	-0.0822(2)	0.0394(5)
C(6)	0.3951(3)	0.2500	0.0794(4)	0.0383(9)
C(7)	0.1548(2)	0.4304(2)	-0.1398(3)	0.0467(7)
C(8)	0.1348(3)	0.5072(2)	-0.0630(4)	0.0644(10)
C(9)	0.1750(3)	0.4492(3)	-0.2851(4)	0.0708(11)
C(10)	0.0688(3)	0.3726(2)	-0.1298(4)	0.0586(9)
C(1S)	0.1694(6)	0.7500	0.0930(8)	0.092(2)
C(2S)	0.1546(6)	0.7500	-0.0449(7)	0.090(2)
N(S)	0.1787(10)	0.7500	0.2033(9)	0.178(5)

Table S15: Anisotropic atom thermal parameters for **5b**.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pd(1)	0.0309(2)	0.0270(2)	0.0387(2)	0.000	0.00396(10)	0.000
I(1)	0.0601(2)	0.0329(2)	0.0590(2)	0.00690(8)	0.01777(9)	0.00179(8)
C(1)	0.0359(12)	0.0322(13)	0.0394(13)	0.0002(11)	0.0008(11)	-0.0005(11)
N(2)	0.0321(11)	0.0322(12)	0.0454(12)	0.0023(10)	0.0003(9)	-0.0027(9)
C(3)	0.0367(14)	0.043(2)	0.058(2)	0.0064(14)	0.0050(13)	-0.0078(12)
C(4)	0.045(2)	0.044(2)	0.060(2)	0.015(2)	0.0062(13)	-0.0076(13)
N(5)	0.0350(11)	0.0353(12)	0.0479(13)	0.0092(10)	0.0006(10)	-0.0005(10)
C(6)	0.033(2)	0.035(2)	0.047(2)	0.000	-0.005(2)	0.000
C(7)	0.043(2)	0.044(2)	0.053(2)	0.0120(14)	-0.0056(13)	0.0033(12)
C(8)	0.058(2)	0.046(2)	0.090(3)	0.005(2)	-0.007(2)	0.013(2)
C(9)	0.073(2)	0.080(3)	0.060(2)	0.023(2)	-0.012(2)	-0.004(2)
C(10)	0.046(2)	0.060(2)	0.070(2)	0.015(2)	-0.015(2)	-0.001(2)
C(1S)	0.132(7)	0.061(4)	0.084(5)	0.000	-0.017(4)	0.000
C(2S)	0.109(6)	0.085(5)	0.077(4)	0.000	0.001(4)	0.000
N(S)	0.31(2)	0.146(8)	0.083(5)	0.000	-0.055(7)	0.000

Table S16: Hydrogen atom parameters for **5b**.

	x	y	z	U(eq)
H(3)	0.4748(2)	0.3848(2)	-0.0516(3)	0.055
H(4)	0.3536(2)	0.4698(2)	-0.1577(3)	0.060
H(6A)	0.4664(3)	0.2500	0.0719(4)	0.046
H(6B)	0.3780(3)	0.2500	0.1723(4)	0.046
H(8A)	0.1904(3)	0.5422(2)	-0.0714(4)	0.097
H(8B)	0.1244(3)	0.4949(2)	0.0284(4)	0.097
H(8C)	0.0771(3)	0.5328(2)	-0.0980(4)	0.097
H(9A)	0.2293(3)	0.4857(3)	-0.2915(4)	0.106
H(9B)	0.1173(3)	0.4728(3)	-0.3239(4)	0.106
H(9C)	0.1910(3)	0.4010(3)	-0.3312(4)	0.106
H(10A)	0.0561(3)	0.3608(2)	-0.0387(4)	0.088
H(10B)	0.0848(3)	0.3244(2)	-0.1759(4)	0.088
H(10C)	0.0111(3)	0.3962(2)	-0.1686(4)	0.088
H(2S1)	0.095(2)	0.778(3)	-0.0653(8)	0.135
H(2S2)	0.150(4)	0.69617(6)	-0.0759(11)	0.135
H(2S3)	0.209(2)	0.776(3)	-0.0872(8)	0.135

Table S17: Bond lengths (Å) for **5b**.

Pd(1)-C(1)#1	2.004(3)
Pd(1)-C(1)	2.004(3)
Pd(1)-I(1)	2.6694(3)
Pd(1)-I(1)#1	2.6694(3)
C(1)-N(5)	1.350(3)
C(1)-N(2)	1.364(3)
N(2)-C(3)	1.376(4)
N(2)-C(6)	1.456(3)
C(3)-C(4)	1.325(5)
C(3)-H(3)	0.93
C(4)-N(5)	1.396(4)
C(4)-H(4)	0.93
N(5)-C(7)	1.507(4)
C(6)-N(2)#1	1.456(3)
C(6)-H(6A)	0.97
C(6)-H(6B)	0.97
C(7)-C(10)	1.520(5)
C(7)-C(9)	1.532(5)
C(7)-C(8)	1.532(5)
C(8)-H(8A)	0.96
C(8)-H(8B)	0.96
C(8)-H(8C)	0.96
C(9)-H(9A)	0.96
C(9)-H(9B)	0.96
C(9)-H(9C)	0.96
C(10)-H(10A)	0.96
C(10)-H(10B)	0.96
C(10)-H(10C)	0.96
C(1S)-N(S)	1.125(10)
C(1S)-C(2S)	1.412(10)
C(2S)-H(2S1)	0.96
C(2S)-H(2S2)	0.96
C(2S)-H(2S3)	0.96

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:
#1 x,-y+1/2,z

Table S18: Bond Angles (°) for **5b**.

C(1)#1-Pd(1)-C(1)	83.3(2)
C(1)#1-Pd(1)-I(1)	91.65(7)
C(1)-Pd(1)-I(1)	167.27(8)
C(1)#1-Pd(1)-I(1)#1	167.27(8)
C(1)-Pd(1)-I(1)#1	91.65(7)
I(1)-Pd(1)-I(1)#1	90.786(12)
N(5)-C(1)-N(2)	104.9(2)
N(5)-C(1)-Pd(1)	141.2(2)
N(2)-C(1)-Pd(1)	113.8(2)
C(1)-N(2)-C(3)	111.1(2)
C(1)-N(2)-C(6)	121.5(2)
C(3)-N(2)-C(6)	126.7(3)
C(4)-C(3)-N(2)	106.2(3)
C(4)-C(3)-H(3)	126.9(2)
N(2)-C(3)-H(3)	126.9(2)
C(3)-C(4)-N(5)	108.4(3)
C(3)-C(4)-H(4)	125.8(2)
N(5)-C(4)-H(4)	125.8(2)
C(1)-N(5)-C(4)	109.2(2)
C(1)-N(5)-C(7)	129.2(2)
C(4)-N(5)-C(7)	121.6(2)
N(2)#1-C(6)-N(2)	108.6(3)
N(2)#1-C(6)-H(6A)	110.0(2)
N(2)-C(6)-H(6A)	110.0(2)
N(2)#1-C(6)-H(6B)	110.0(2)
N(2)-C(6)-H(6B)	110.0(2)
H(6A)-C(6)-H(6B)	108.4
N(5)-C(7)-C(10)	110.2(3)
N(5)-C(7)-C(9)	108.1(3)
C(10)-C(7)-C(9)	109.4(3)
N(5)-C(7)-C(8)	107.2(3)
C(10)-C(7)-C(8)	111.7(3)
C(9)-C(7)-C(8)	110.2(3)
C(7)-C(8)-H(8A)	109.5(2)
C(7)-C(8)-H(8B)	109.5(2)
H(8A)-C(8)-H(8B)	109.5
C(7)-C(8)-H(8C)	109.5(2)
H(8A)-C(8)-H(8C)	109.5
H(8B)-C(8)-H(8C)	109.5
C(7)-C(9)-H(9A)	109.5(2)
C(7)-C(9)-H(9B)	109.5(2)
H(9A)-C(9)-H(9B)	109.5
C(7)-C(9)-H(9C)	109.5(2)
H(9A)-C(9)-H(9C)	109.5
H(9B)-C(9)-H(9C)	109.5
C(7)-C(10)-H(10A)	109.5(2)
C(7)-C(10)-H(10B)	109.5(2)
H(10A)-C(10)-H(10B)	109.5
C(7)-C(10)-H(10C)	109.5(2)
H(10A)-C(10)-H(10C)	109.5
H(10B)-C(10)-H(10C)	109.5
N(S)-C(1S)-C(2S)	178.3(12)
C(1S)-C(2S)-H(2S1)	109.5(4)
C(1S)-C(2S)-H(2S2)	109.471(11)
H(2S1)-C(2S)-H(2S2)	109.5
C(1S)-C(2S)-H(2S3)	109.5(4)
H(2S1)-C(2S)-H(2S3)	109.5
H(2S2)-C(2S)-H(2S3)	109.5

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:
#1 x,-y+1/2,z