

1 Přílohy

1.1 Tabulky pro rentgenostrukturní analýzu

Tabulka S1: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur látek **9a–c**.

Sloučenina	9a	9b	9c
Vzorec	C ₃ H ₁₂ Cl ₂ N ₄	C ₃ H ₁₂ N ₆ O ₆	C ₃ H ₁₂ Cl ₂ N ₄ O ₈
M [g mol ⁻¹]	175.07	228.19	303.07
Krystalová třída	jednoklonná	trojklonná	jednoklonná
Prostorová grupa	<i>P</i> 2 ₁ ^a	<i>P</i> -1	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>
<i>T</i> [K]	150(2)	150(2)	150(2)
<i>a</i> [Å]	4.4825(5)	7.0662(6)	7.5663(2)
<i>b</i> [Å]	7.2665(8)	7.3115(6)	28.2516(5)
<i>c</i> [Å]	12.633(1)	19.205(2)	15.6899(3)
α [°]		82.052(3)	
β [°]	91.700(3)	84.841(3)	92.372(1)
γ [°]		81.133(4)	
<i>V</i> [Å ³]	411.29(8)	968.5(1)	3351.0(1)
<i>Z</i>	2	4	12
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.414	1.565	1.802
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	0.718	0.146	0.622
Celkem měřených difrakcí	2620	8150	26934
<i>R</i> _{int} [%] ^c	1.69	3.25	3.58
Nezávislé difrakce	1576	3784	7685
Pozorované difrakce ^d	1440	2508	5987
Počet parametrů	84	271	460
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{d,e}	2.27	5.06	4.11
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^e	2.49, 4.75	9.52, 11.07	5.87, 10.27
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	0.23, -0.22	0.22, -0.26	0.74, -0.69

^a Flackův parametr je 0.00(4).

^b Rozsah transmisních faktorů.

^c $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_c^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

^d Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^e $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)\} / \sum w(F_o^2)^{1/2}]$.

Tabulka S2: Vybrané vazebné délky a úhly pro látky **9a** a **9b** v Å a °.

9a		9b, molekula 1		9b, molekula 2	
N1–C1	1.486(3)	N1–C1	1.479(3)	N11–C11	1.490(3)
N2–C2	1.459(3)	N2–C2	1.455(3)	N12–C12	1.452(3)
N2–C3	1.332(2)	N2–C3	1.334(3)	N12–C13	1.336(4)
N3–C3	1.324(3)	N3–C3	1.328(3)	N13–C13	1.328(3)
N4–C3	1.329(3)	N4–C4	1.331(3)	N14–C13	1.323(4)
C2–N2–C3	124.6(2)	C2–N2–C3	122.9(2)	C12–N12–C13	124.2(2)
N2–C3–N3	119.5(2)	N2–C3–N3	119.2(2)	N12–C13–N13	118.2(2)
N2–C3–N4	121.4(2)	N2–C3–N4	120.5(2)	N12–C13–N14	122.2(2)
N3–C3–N4	119.1(2)	N3–C3–N4	120.2(2)	N13–C13–N14	119.6(2)

Tabulka S3: Vybrané vazebné délky a úhly pro látku **9c** v [Å] a °.

molekula 1		molekula 2		molekula 3	
N1–C1	1.486(3)	N11–C11	1.490(3)	N21–C21	1.489(3)
N2–C2	1.456(3)	N12–C12	1.453(3)	N22–C22	1.453(3)
N2–C3	1.327(3)	N12–C13	1.331(3)	N22–C23	1.330(3)
N3–C3	1.324(3)	N13–C13	1.332(3)	N23–C23	1.326(3)
N4–C3	1.318(3)	N14–C13	1.317(3)	N24–C23	1.322(3)
C2–N2–C3	123.6(2)	C12–N12–C13	123.8(2)	C22–N22–C23	123.9(2)
N2–C3–N3	118.8(2)	N12–C13–N13	119.3(2)	N22–C23–N23	119.4(2)
N2–C3–N4	121.8(2)	N12–C13–N14	121.0(2)	N22–C23–N24	121.0(2)
N3–C3–N4	119.5(2)	N13–C13–N14	119.7(2)	N23–C23–N24	119.7(2)

Tabulka S4: Vodíkové vazby v krystalech látky **9a**.

D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··Cl2 ⁱ	3.191(2)	147
N1–H1N··Cl1 ⁱⁱ	3.238(2)	112
N1–H2N··Cl1 ⁱⁱⁱ	3.162(2)	166
N1–H3N··Cl1 ^{iv}	3.157(2)	159
N2–H4N··Cl1 ^v	3.180(2)	160
N3–H5N··Cl2 ^{iv}	3.173(2)	150
N3–H6N··Cl2 ^{vi}	3.264(2)	158
N4–H7N··Cl2 ^{vi}	3.276(2)	154
N4–H8N··Cl2 ⁱ	3.263(2)	169

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 + x, 1 + y, z; (ii) 2 – x, 1/2 + y, 2 – z; (iii) 1 – x, 1/2 + y, 2 – z; (iv) x, y, z; (v) 1 – x, –1/2 + y, 2 – z; (vi) –x, 1/2 + y, 1 – z.

Tabulka S5: Vodíkové vazby v krystalech látky **9b**.

D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O51 ^{vii}	2.929(3)	175	N11–H11N··O41 ^{iv}	3.096(3)	132
N1–H1N··O53 ^{vii}	3.121(3)	125	N11–H11N··O51 ^{iv}	2.835(3)	130
N1–H2N··O33 ^{viii}	3.119(3)	120	N11–H12N··O43 ^{iv}	2.894(3)	136
N1–H2N··O43 ^{ix}	2.838(3)	156	N11–H12N··O52 ^{xiv}	2.974(3)	133
N1–H3N··O31 ^{viii}	2.912(3)	102	N11–H12N··O53 ^{xiv}	2.963(3)	104
N1–H3N··O41 ^{viii}	2.914(3)	170	N11–H13N··O21 ^{iv}	2.912(3)	127
N1–H3N··O42 ^{viii}	3.207(3)	122	N11–H13N··O42 ^{xiii}	2.980(3)	146
N2–H4N··O23 ^{xi}	2.840(3)	178	N12–H14N··O32 ^{viii}	2.851(3)	172
N3–H5N··O22 ^{xi}	2.928(3)	171	N13–H15N··O31 ^{viii}	2.890(3)	177
N3–H6N··O21 ^{xii}	2.907(3)	169	N13–H16N··O33 ^{xv}	2.909(3)	176
N4–H7N··O23 ^{xii}	2.890(3)	174	N14–H17N··O32 ^{xv}	2.899(3)	166
N4–H8N··O53 ^{viii}	2.978(3)	154	N14–H18N··O51 ^{iv}	3.034(3)	164

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 + x, 1 + y, z; (ii) 2 – x, 1/2 + y, 2 – z; (iii) 1 – x, 1/2 + y, 2 – z; (iv) x, y, z; (v) 1 – x, –1/2 + y, 2 – z; (vi) –x, 1/2 + y, 1 – z; (vii) 1 – x, 2 – y, 1 – z; (viii) 1 – x, 1 – y, 1 – z; (ix) 2 – x, 1 – y, 1 – z; (x) x, 1 + y, z; (xi) x, y, 1 + z; (xii) x, –1 + y, 1 + z; (xiii) x, 1 + y, z; (xiv) 1 + x, y, z; (xv) –x, 1 – y, 1 – z

Tabulka S6: Vodíkové vazby v krystalech látky **9c**.

D-H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H[°]	D-H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1-H1N··O43 ⁱ	2.872(3)	166	N12-H14N··O2 ^{vii}	3.310(3)	142
N1-H2N··O2 ⁱ	3.117(3)	115	N12-H14N··O33 ⁱⁱ	3.214(3)	142
N1-H2N··O41 ⁱⁱ	2.908(3)	143	N13-H15N··O31 ⁱⁱ	2.941(3)	171
N1-H3N··O31 ⁱⁱⁱ	3.011(3)	114	N13-H16N··O34 ⁱ	2.941(3)	148
N1-H3N··O34 ⁱⁱⁱ	3.064(3)	121	N14-H17N··O2 ⁱⁱⁱ	3.070(3)	117
N1-H3N··O44 ⁱⁱⁱ	2.940(4)	141	N14-H17N··O33 ⁱ	3.322(3)	154
N2-H4N··O24 ⁱⁱ	3.226(3)	149	N14-H17N··O34 ⁱ	3.217(3)	145
N3-H5N··O21 ⁱⁱ	2.940(3)	165	N14-H18N··O13 ^v	3.138(3)	171
N3-H6N··O22 ⁱ	3.088(3)	156	N21-H31N··O13 ⁱⁱⁱ	3.229(3)	133
N4-H7N··O22 ⁱ	3.150(3)	151	N21-H31N··O53 ^x	2.884(3)	143
N4-H7N··O24 ⁱ	3.294(3)	136	N21-H32N··O23 ^{ix}	3.153(3)	171
N4-H8N··O42 ⁱ	3.189(4)	133	N21-H32N··O24 ^{ix}	3.060(3)	129
N11-H11N··O13 ^v	3.005(3)	142	N21-H33N··O4 ^{viii}	2.906(3)	111
N11-H11N··O14 ^v	3.022(3)	118	N21-H33N··O51 ^{ix}	2.861(3)	144
N11-H12N··O12 ^{iv}	2.919(3)	135	N22-H34N··O23 ⁱⁱⁱ	3.164(3)	14
N11-H12N··O21 ^v	2.986(3)	116	N23-H35N··O4 ^x	2.927(3)	167
N11-H12N··O51 ^{vi}	3.122(3)	139	N23-H36N··O3 ^{ix}	2.981(3)	168
N11-H13N··O32 ^v	3.155(3)	172	N24-H37N··O1 ^{ix}	3.255(3)	167
N11-H13N··O33 ^v	3.165(3)	126	N24-H38N··O52 ^{ix}	3.075(3)	124

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 - x, -y, 1 - z; (ii) -x, -y, 1 - z; (iii) x, y, z; (iv) -1 + x, y, -1 + z; (v) x, y, -1 + z; (vi) -1/2 + x, 1/2 - y, -1/2 + z; (vii) -1 + x, y, z; (viii) x, y, 1 + z; (ix) 1/2 + x, 1/2 - y, 1/2 + z; (x) -1/2 + x, 1/2 - y, -1/2 + z.

Tabulka S7: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur látek **10b**, **10POb**, **10POc**, **10POd**, **11POe**, **12a·MeOH** a **12b**.

Sloučenina	10b	10POb	10POc	10POd	11POe	12a·MeOH	12b
Vzorec	C ₂₆ H ₂₅ FeN ₂ O ₂ P	C ₂₆ H ₂₅ FeN ₂ O ₃ P	C ₃₀ H ₂₅ FeN ₂ O ₃ P	C ₂₆ H ₂₅ FeN ₂ O ₃ P	C ₂₅ H ₂₃ FeN ₂ O ₃ P	C ₂₇ H ₃₀ FeN ₃ O ₃ P	C ₂₈ H ₃₀ FeN ₃ O ₂ P
M [g mol ⁻¹]	484.30	500.30	548.34	500.30	486.27	531.36	527.37
Krystalová třída	jednoklonná	trojklonná	trojklonná	jednoklonná	jednoklonná	trojklonná	trojklonná
Prostorová grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1
<i>T</i> [K]	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)
<i>a</i> [Å]	8.7238(4)	6.0775(1)	8.6294(6)	9.0515(2)	11.0972(2)	9.5194(3)	9.6347(2)
<i>b</i> [Å]	16.5104(8)	10.2909(2)	9.9715(8)	18.5835(4)	15.7999(3)	13.6748(5)	10.8477(3)
<i>c</i> [Å]	15.6442(8)	18.7810(4)	15.176(1)	13.6229(3)	12.8149(3)	20.0540(8)	14.0351(4)
α [°]		75.2051(7)	100.893(3)			102.161(2)	67.752(1)
β [°]	102.001(2)	82.6199(7)	93.341(3)	90.3751(8)	100.2871(8)	90.263(2)	71.279(1)
γ [°]		81.6714(7)	97.004(3)			97.168(2)	75.829(1)
<i>V</i> [Å ³]	2204.0(2)	1118.55(4)	1268.4(2)	2291.44(9)	2210.78(8)	2530.7(2)	1273.05(6)
<i>Z</i>	4	2	2	4	4	4	2
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.460	1.485	1.436	1.450	1.461	1.395	1.376
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	0.784	0.778	0.693	0.760	0.785	0.693	0.686
Celkem měřených difrakcí	15366	13962	5764	18107	15797	30936	21716
<i>R</i> _{int} [%] ^b	1.64	1.58	0.00	2.16	2.48	4.03	1.67
Nezávislé difrakce	5074	5126	5765	5263	5078	9929	5846
Pozorované difrakce ^c	4649	4835	4786	4754	4298	7182	5350
Počet parametrů	290	299	335	300	290	641	320
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	2.42	2.47	6.29	2.81	3.08	5.18	2.63
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	2.73, 6.45	2.65, 6.46	7.62, 18.18	3.25, 7.26	3.91, 7.94	8.08, 12.91	2.95, 7.16
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	0.30, -0.24	0.37, -0.32	0.99, -0.83	0.38, -0.39	0.41, -0.29	0.52, -0.32	0.63, -0.27

^a Rozsah transmisních faktorů.

^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\} / \sum w(F_o^2)^2]^{1/2}$.

Tabulka S8: Vybrané vazebné délky a úhly pro látky **10b**, **10POb**, **10POc**, **10POd** a **12a**·MeOH v Å a °.

	10b	10POb	10POc	10POd	11POe	12a ·MeOH, molekula 1		12a ·MeOH, molekula 2	
Fe–Cg(C) ^a	1.6438(6)	1.6539(6)	1.657(2)	1.6454(7)	1.6448(9)	Fe–Cg(C) ^a	1.652(2)	Fe–Cg(C) ^a	1.651(2)
Fe–Cg(P) ^a	1.6422(7)	1.6539(6)	1.648(3)	1.6415(7)	1.6437(9)	Fe–Cg(P) ^a	1.653(2)	Fe–Cg(P) ^a	1.653(2)
P–O3		1.488(1)	1.487(3)	1.496(1)	1.496(1)	P1–C6	1.814(3)	P2–C56	1.819(4)
P1–C6	1.816(1)	1.790(1)	1.785(5)	1.773(1)	1.780(2)	P1–C12	1.842(4)	P2–C62	1.834(4)
P1–C12	1.837(1)	1.812(1)	1.807(5)	1.800(2)	1.804(2)	P1–C18	1.837(4)	P2–C68	1.833(4)
P1–C18	1.842(1)	1.800(1)	1.799(5)	1.807(2)	1.805(2)	O11–C11	1.238(4)	O21–C61	1.237(4)
O1–C11	1.226(2)	1.230(2)	1.231(6)	1.218(2)	1.232(3)	O12–C26	1.250(4)	O22–C76	1.244(4)
O2–C24	1.231(2)	1.231(2)	1.212(6)	1.222(2)	1.218(3)	N11–C11	1.341(4)	N21–C61	1.342(4)
N1–N2					1.394(2)	N12–C26	1.351(5)	N22–C76	1.341(4)
N1–C11	1.377(2)	1.373(2)	1.379(6)	1.379(2)	1.357(2)	N13–C26	1.345(4)	N23–C76	1.353(4)
N1–C24	1.401(2)	1.414(2)	1.420(6)	1.411(2)		O11–C11–N11	122.4(3)	O21–C61–N21	122.5(3)
N2–C24	1.332(2)	1.331(2)	1.352(7)	1.350(2)	1.345(3)	O12–C26–N12	120.7(3)	O22–C76–N22	122.2(3)
C24–C25					1.518(4)	O12–C26–N13	122.6(3)	O22–C76–N23	121.8(3)
O1–C11–N1	123.0(1)	123.1(1)	123.9(4)	123.5(1)	123.20(2)	N12–C26–N13	116.7(3)	N22–C76–N23	116.0(3)
O2–C24–N1	119.3(1)	119.4(1)	118.5(5)	121.9(1)	122.8(2)				
O2–C24–N2	123.2(1)	124.4(1)	126.4(5)	122.7(1)					
N1–C24–N2	117.5(1)	116.3(1)	115.1(4)	115.3(1)					
O2–C24–C25					123.1(3)				
N2–C24–C25					114.1(2)				
∠ Cp(P), Cp(C)	4.35(8)	1.41(8)	1.4(3)	0.80(9)	0.1(1)	∠ Cp(P), Cp(C)	4.7(2)	∠ Cp(P), Cp(C)	4.6(2)
τ ^b	–79.47(9)	162.99(9)	164.6(3)	–73.1(1)	–75.8(1)	τ ^b	102.8(2)	τ ^b	–87.9(3)
φ ^c	15.7(2)	10.0(2)	3.9(5)	30.6(2)	24.2(3)	φ ^c	5.8(4)	φ ^c	6.7(4)

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkcí.

^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6).

^c φ je dihedralní úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S9: Vybrané vazebné délky a úhly pro látku **12b** v [Å] a °.

Fe–Cg(C) ^a	1.6519(7)	O1–C11–N1	122.5(1)
Fe–Cg(P) ^a	1.6487(7)	O2–C26–N2	122.2(1)
P1–C6	1.813(2)	O2–C26–N3	122.2(1)
P1–C12	1.830(1)	N2–C26–N3	115.6(1)
P1–C18	1.832(2)	∠ Cp(P), Cp(C)	3.86(9)
O1–C11	1.245(2)	τ ^b	105.6(1)
O2–C26	1.242(2)	φ ^c	7.2(2)
N1–C11	1.339(2)		
N2–C26	1.354(2)		
N3–C26	1.349(2)		

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkcí. ^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6). ^c φ je dihedrální úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S10: Vybrané vodíkové vazby pro látky **10b**, **10POb**, **10POc**, **10POd**, **11POe**, **12a·MeOH** a **12b**.

10b			10POb		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O2 ⁱ	2.855(2)	166	N1–H1N··O2 ⁱⁱ	2.884(2)	168
N2–H2N··O1 ^b	2.654(2)	134	N2–H2N··O1 ^b	2.620(2)	138
10POc			10POd		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O3 ⁱⁱⁱ	2.826(5)	174	N1–H1N··O3 ^b	2.846(2)	169
N2–H2N··O1 ^b	2.621(5)	115			
11POe			12a·MeOH		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O3 ^b	2.895(2)	177	N11–H1N··O12 ^v	2.868(3)	155
N2–H2N··O1 ^{iv}	3.002(2)	161	O80–H1O··O12 ^v	2.730(4)	173
12b			N12–H2N··O11 ^b	3.181(4)	130
D··A [Å]	D··A [Å]	∠ na H [°]	N12–H2N··O11 ^{vi}	3.239(3)	144
N1–H1N··O2 ^{xi}	2.847(2)	159	O90–H2O··O22 ^{vii}	2.732(4)	176
N2–H2N··O1 ^b	3.113(2)	130	N13–H3N··O11 ^{vi}	2.869(4)	163
N3–H3N··O1 ^{xii}	2.860(2)	171	N13–H4N··O90 ^{vi}	2.853(5)	147
			N21–H5N··O22 ^{vii}	2.876(3)	158
			N22–H6N··O21 ^x	3.062(3)	147
			N23–H7N··O21 ^x	2.869(4)	155
			N23–H8N··O80 ^{ix}	2.835(4)	141

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) –x, 2 – y, –z; (ii) 2 – x, 2 – y, –z; (iii) –x, –y, –z; (iv) 1 – x, 1 – y, 2 – z.; (v) 1 – x, 1 – y, 1 – z; (vi) 2 – x, 1 – y, 1 – z; (vii) 2 – x, 1 – y, –z; (viii) 2 – x, 2 – y, –z; (ix) 1 – x, 1 – y, –z; (x) 1 – x, 2 – y, –z; (xi) 1 – x, 1 – y, 2 – z; (xii) 2 – x, 1 – y, 2 – z. ^bIntramolekulární vodíková vazba.

Tabulka S11: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur látky **14**·HCl.

Sloučenina	14 ·HCl
Vzorec	C ₂₅ H ₂₆ ClFeN ₂ OP
M [g mol ⁻¹]	492.75
Krystalová třída	trojklonná
Prostorová grupa	<i>P</i> -1
<i>T</i> [K]	150(2)
<i>a</i> [Å]	9.7031(3)
<i>b</i> [Å]	14.8055(4)
<i>c</i> [Å]	17.8543(5)
α [°]	70.331(1)
β [°]	76.110(1)
γ [°]	87.991(1)
<i>V</i> [Å ³]	2341.7(1)
<i>Z</i>	4
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.398
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	0.846
Celkem měřených difrakcí	29995
<i>R</i> _{int} [%] ^b	2.24
Nezávislé difrakce	10211
Pozorované difrakce ^c	8152
Počet parametrů	559
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	3.38
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	5.01, 8.19
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	0.59, -0.30

^a Rozsah transmisních faktorů.^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)\} / \sum w(F_o^2)]^{1/2}$.**Tabulka S12:** Vybrané vazebné délky a úhly pro látku **14**·HCl v [Å] a °.

molekula 1		molekula 2	
Fe–Cg(C) ^a	1.657(1)	Fe–Cg(C) ^a	1.649(1)
Fe–Cg(P) ^a	1.655(1)	Fe–Cg(P) ^a	1.651(1)
P1–C106	1.815(2)	P2–C206	1.816(2)
P1–C112	1.840(2)	P2–C212	1.834(2)
P1–C118	1.840(2)	P2–C218	1.843(2)
O11–C111	1.246(3)	O21–C211	1.239(3)
N11–C111	1.334(3)	N21–C211	1.338(3)
N11–C124	1.458(3)	N21–C224	1.451(3)
N12–C125	1.483(3)	N22–C225	1.475(3)
O11–C111–N11	121.2(2)	O21–C211–N21	121.2(2)
N11–C124–C125	111.3(2)	N11–C124–C125	110.8(2)
N12–C125–N124	109.9(2)	N12–C125–N124	110.2(2)
\angle Cp(P), Cp(C)	4.1(1)	\angle Cp(P), Cp(C)	5.3(1)
τ^b	23.6(2)	τ^b	-26.8(2)
φ^c	16.1(2)	φ^c	13.2(2)

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkcí. ^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6). ^c φ je dihedralní úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S13: Vybrané vodíkové vazby v krystalech látky **14**·HCl.

D-H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N11-H1N··Cl2 ⁱ	3.263(2)	172
N12-H2N··Cl1 ⁱⁱ	3.112(2)	162
N12-H3N··Cl1 ⁱⁱⁱ	3.151(2)	162
N12-H4N··O21 ⁱⁱⁱ	2.712(2)	165
N21-H5N··Cl1 ⁱ	3.268(2)	165
N22-H6N··Cl2 ⁱ	3.076(2)	163
N22-H7N··Cl2 ^v	3.139(2)	178
N22-H8N··O11 ^{iv}	2.718(2)	163

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 - x, 1 - y, 1 - z; (ii) -x, 1 - y, 1 - z; (iii) x, y, z; (iv) 1 + x, y, z; (v) x, 1+y, z.

Tabulka S14: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur látek **16b**·3CHCl₃, **16c**·2.5CHCl₃, **17e** a **18e**·0.5AcOEt·0.5MeOH.

Sloučenina	16b ·3CHCl ₃	16c ·2.5CHCl ₃	17e	18e ·0.5AcOEt·0.5MeOH
Vzorec	C ₃₈ H ₄₀ Cl ₁₀ FeN ₃ O ₂ PPd	C _{41.5} H _{40.5} Cl _{8.5} FeN ₃ O ₂ PPd	C ₃₄ H ₃₅ ClFeN ₃ O ₂ PPd	C _{38.5} H ₄₅ ClFeN ₃ O _{3.5} PPd
M [g mol ⁻¹]	1118.45	1107.81	746.32	834.45
Krystalová třída	trojklonná	trojklonná	trojklonná	jednoklonná
Prostorová grupa	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>
<i>T</i> [K]	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)
<i>a</i> [Å]	10.4145(3)	10.4294(3)	10.6376(2)	10.8251(3)
<i>b</i> [Å]	13.5225(3)	12.4281(4)	11.3276(3)	35.6384(9)
<i>c</i> [Å]	17.8999(4)	18.8943(6)	30.0027(7)	9.8847(3)
<i>α</i> [°]	110.4513(8)	71.901(1)	90.0679(7)	
<i>β</i> [°]	94.5317(9)	88.427(1)	90.2239(7)	93.641(1)
<i>γ</i> [°]	101.5632(9)	75.582(1)	116.7944(6)	
<i>V</i> [Å ³]	2283.3(1)	2251.2(1)	3227.1(1)	3805.7(2)
<i>Z</i>	2	2	4	4
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.627	1.634	1.536	1.456
μ(MoKα) [mm ⁻¹]	1.369	1.301	1.174	1.007
Celkem měřených difrakcí	37594	30082	32542	35419
<i>R</i> _{int} [%] ^b	2.08	2.10	2.17	4.83
Nezávislé difrakce	10487	10343	14806	8740
Pozorované difrakce ^c	9280	9103	13304	6873
Počet parametrů	473	507	781	409
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	3.42	2.97	4.26	3.69
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	3.85, 9.20	3.54, 7.22	4.86, 9.84	5.37, 7.87
Δρ [e Å ⁻³]	1.44, -2.19	1.17, -1.09	2.30, -1.25	0.44, -0.51

^a Rozsah transmisních faktorů.

^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)\} / \sum w(F_o^2)]^{1/2}$.

Tabulka S15: Vybrané vazebné délky a úhly pro látky **16b**·3CHCl₃, **16c**·2.5CHCl₃, **17e** a **18e**·0.5AcOEt·0.5MeOH v Å a °.

16b ·3CHCl ₃		16c ·2.5CHCl ₃		17e , molekula 1		17e , molekula 2		18e ·0.5AcOEt·0.5MeOH	
Pd–Cl	2.3999(7)	2.3989(5)	Pd1–Cl1	2.4159(9)	Pd2–Cl2	2.4123(9)	Pd–Cl	2.3910(7)	
Pd–P	2.2553(6)	2.2472(6)	Pd1–P1	2.255(1)	Pd2–P2	2.266(1)	Pd–P	2.2522(7)	
Pd–N3	2.153(2)	2.151(2)	Pd1–N13	2.142(4)	Pd2–N23	2.159(3)	Pd–N3	2.142(2)	
Pd–C40	2.005(3)	2.012(2)	Pd1–C140	2.014(4)	Pd2–C240	2.006(3)	Pd–C40	2.009(3)	
P–C6	1.814(2)	1.810(2)	P1–C106	1.810(4)	P2–C206	1.816(3)	P–C6	1.809(3)	
P–C12	1.826(2)	1.819(2)	P1–C112	1.821(3)	P2–C212	1.807(3)	P–C12	1.816(3)	
P–C18	1.820(2)	1.820(2)	P1–C118	1.824(3)	P2–C218	1.825(3)	P–C18	1.821(2)	
Fe–Cg(C) ^a	1.649(1)	1.647(1)	Fe(1)–Cg(C) ^a	1.643(2)	Fe(2)–Cg(C) ^a	1.646(2)	Fe–Cg(C) ^a	1.646(1)	
Fe–Cg(P) ^a	1.648(1)	1.647(1)	Fe(1)–Cg(P) ^a	1.652(2)	Fe(2)–Cg(P) ^a	1.644(2)	Fe–Cg(P) ^a	1.646(1)	
O1–C11	1.231(4)	1.227(3)	O11–C111	1.215(5)	O1–C211	1.219(4)	O1–C11	1.232(3)	
O2–C24	1.229(4)	1.223(3)	O12–C124	1.218(5)	O2–C224	1.216(5)	O2–C26	1.232(3)	
N1–C11	1.376(4)	1.377(3)	N11–N12	1.387(5)	N21–N22	1.390(5)	N1–C11	1.342(3)	
N1–C24	1.403(4)	1.403(3)	N11–C111	1.355(4)	N1–C211	1.352(4)	N1–C24	1.456(3)	
N2–C24	1.329(4)	1.349(3)	N12–C124	1.338(6)	N22–C224	1.355(6)	N2–C26	1.339(3)	
Cl–Pd–P	90.13(2)	91.58(2)	Cl1–Pd1–P1	93.83(4)	Cl2–Pd2–P2	90.59(3)	Cl–Pd–P	92.23(3)	
Cl–Pd–N3	91.86(6)	91.81(5)	Cl1–Pd1–N13	91.1(1)	Cl2–Pd2–N23	90.50(8)	Cl–Pd–N3	90.10(6)	
P–Pd–C40	98.37(6)	97.13(6)	P1–Pd1–C140	94.0(1)	P2–Pd2–C240	98.4(1)	P–Pd–C40	97.49(7)	
N3–Pd–C40	81.35(9)	81.79(8)	N13–Pd1–C140	82.1(2)	N23–Pd2–C240	82.0(1)	N3–Pd–C40	81.66(8)	
O1–C11–N1	122.2(3)	122.2(2)	O11–C111–N11	123.5(4)	O21–C211–N21	122.7(3)	O1–C11–N1	122.3(2)	
O2–C24–N1	118.8(3)	118.8(2)	O12–C124–N12	122.2(4)	O22–C224–N21	123.1(4)	O2–C26–N1	121.6(2)	
O2–C24–N2	123.5(3)	124.6(2)					O2–C26–C27	122.5(2)	
N1–C24–N2	117.7(3)	116.6(2)					N2–C26–C27	115.9(2)	
∠ Cp(P), Cp(C)	1.5(1)	1.1(1)	∠ Cp(P), Cp(C)	1.1(2)	∠ Cp(P), Cp(C)	3.0(2)	∠ Cp(P), Cp(C)	0.8(2)	
τ ^b	–81.7(2)	82.6(2)	τ ^b	–145.0(3)	τ ^b	–153.1(2)	τ ^b	–143.8(2)	
φ ^c	9.4(3)	10.6(2)	φ ^c	7.8(5)	φ ^c	10.8(4)	φ ^c	6.5(3)	

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkcí.

^b τ je torzní úhel (např. Cl–Cg(C)–Cg(P)–C6).

^c φ je dihedralní úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S16: Vybrané vodíkové vazby v krystalech látek **16b**·3CHCl₃, **16c**·2.5CHCl₃, **17e** a **18e**·0.5AcOEt·0.5MeOH.

16b ·3CHCl ₃			16c ·2.5CHCl ₃		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O2 ⁱ	2.865(3)	169	N1–H1N··O2 ⁱⁱ	2.868(3)	176
N2–H2N··O1 ^b	2.657(3)	136	N2–H2N··O1 ^b	2.668(2)	140
17e			18e ·0.5AcOEt·0.5MeOH		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N11–H1N··Cl1 ⁱⁱⁱ	3.239(3)	163	N1–H1N··O1 ^{vi}	2.951(3)	146
N12–H2N··Cl1 ^{iv}	3.247(3)	171	N2–H2N··O2 ^{vi}	2.789(3)	154
N21–H3N··Cl2 ^v	3.277(3)	162			
N22–H4N··Cl2 ^{iv}	3.260(3)	162			

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 – x, 1 – y, 1 – z; (ii) 1 – x, –y, 1 – z; (iii) –x, 2 – y, 1 – z; (iv) 1 + x, 1 + y, z; (v) 2 – x, 2 – y, 2 – z; (vi) x, 1/2 – y, 1/2 + z. ^bIntramolekulární vodíková vazba.

Tabulka S17: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur **21b**·CHCl₃, **21c**·2CH₂Cl₂, **21e** a **22e**·2.5CHCl₃.

Sloučenina	21b ·CHCl ₃	21c ·2CH ₂ Cl ₂	21e	22e ·2.5CHCl ₃
Vzorec	C ₃₆ H ₃₈ Cl ₃ F ₆ FeN ₃ O ₂ PPdSb	C ₄₁ H ₄₁ Cl ₄ F ₆ FeN ₃ O ₂ PPdSb	C ₃₄ H ₃₄ F ₆ FeN ₂ O ₂ PPdSb	C _{36.5} H _{37.5} Cl _{7.5} F ₆ FeN ₃ O ₂ PPdSb
M [g mol ⁻¹]	1080.01	1178.54	931.60	1245.04
Krystalová třída	jednoklonná	jednoklonná	trojklonná	jednoklonná
Prostorová grupa	<i>P2₁/n</i>	<i>P2₁/c</i>	<i>P</i> -1	<i>P2₁/c</i>
<i>T</i> [K]	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)
<i>a</i> [Å]	11.1802(2)	11.6626(3)	10.5970(3)	11.4803(2)
<i>b</i> [Å]	16.8111(4)	17.0380(4)	11.0641(3)	17.1046(3)
<i>c</i> [Å]	21.8470(4)	22.7112(5)	16.4995(5)	23.3744(4)
α [°]			96.154(1)	
β [°]	102.0047(7)	101.596(1)	98.841(1)	94.6771(7)
γ [°]			112.636(1)	
<i>V</i> [Å ³]	4016.4(1)	4420.8(2)	1734.67(9)	4574.7(1)
<i>Z</i>	4	4	2	4
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.786	1.771	1.784	1.808
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	1.771	1.676	1.811	1.822
Celkem měřených difrakcí	33005	33259	19214	31971
<i>R</i> _{int} [%] ^b	3.21	2.48	2.24	2.26
Nezávislé difrakce	9236	10141	7980	10515
Pozorované difrakce ^c	7649	8618	6884	8911
Počet parametrů	464	552	436	481
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	2.88	2.60	2.68	2.88
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	3.74, 6.85	353, 5.86	3.44, 5.94	3.55, 7.09
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	1.06, -0.62	0.79, -0.65	1.04, -0.65	0.60, -0.80

^a Rozsah transmisních faktorů.

^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)\} / \sum w(F_o^2)]^{1/2}$.

Tabulka S18: Vybrané vazebné délky a úhly pro látky **21b**·CHCl₃, **21c**·2CH₂Cl₂, **21e** a **22e**·2.5CHCl₃ v [Å] a °.

	21b ·CHCl ₃	21c ·2CH ₂ Cl ₂	21e	22e ·2.5CHCl ₃
Pd–P	2.2574(7)	2.2459(6)	2.2724(7)	2.2515(6)
Pd–O1	2.152(2)	2.177(1)	2.167(2)	2.140(2)
Pd–N3	2.145(2)	2.136(2)	2.134(2)	2.136(2)
Pd–C40	1.992(2)	1.992(2)	1.988(2)	1.995(2)
P–C6	1.791(2)	1.791(2)	1.812(2)	1.789(2)
P–C12	1.826(3)	1.820(2)	1.817(3)	1.824(2)
P–C18	1.827(3)	1.834(2)	1.821(2)	1.831(2)
Fe–Cg(C) ^a	1.658(1)	1.654(1)	1.646(1)	1.654(2)
Fe–Cg(P) ^a	1.652(1)	1.649(1)	1.650(1)	1.652(1)
O1–C11	1.246(3)	1.248(3)	1.241(3)	1.252(3)
O2–C24	1.235(3)	1.223(3)	1.218(4)	1.237(3)
N1–C11	1.353(3)	1.355(3)	1.372(3)	1.390(3)
N1–C24	1.412(4)	1.409(3)		1.325(3)
N2–C24	1.318(4)	1.339(3)	1.394(4)	1.336(3)
P–Pd–O1	89.83(5)	89.77(4)	95.78(5)	89.18(5)
P–Pd–C40	98.38(7)	97.35(7)	92.47(7)	98.20(7)
O1–Pd–N3	89.65(7)	90.46(6)	90.95(7)	89.73(7)
N3–Pd–C40	82.24(9)	83.22(8)	81.25(8)	83.03(9)
O1–C11–N1	120.6(2)	121.2(2)	120.3(3)	118.8(2)
O2–C24–N1	117.0(2)	117.4(2)	117.9(3)	121.0(2)
O2–C24–N2/N2B	124.0(3), 121.4(8)	125.9(2)	121.5(3)	123.0(2)
N1–C24–N2/N2B	118.9(2), 113.8(8)	116.6(2)	120.6(3)	116.0(2)
∠ Cp(P), Cp(C)	6.1(1)	6.8(1)	5.9(2)	6.8(2)
τ ^b	–5.5(2)	–9.9(2)	–61.2(2)	–2.4(2)
φ ^c	37.5(3)	31.1(2)	17.9(3)	33.7(3)

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkcí. ^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6). ^c φ je dihedrální úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S19: Vybrané vodíkové vazby pro **21b**·CHCl₃, **21c**·2CH₂Cl₂, **21e** a **22e**·2.5CHCl₃.

21b ·CHCl ₃			21c ·2CH ₂ Cl ₂		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O2 ⁱ	2.758(3)	166	N1–H1N··O2 ⁱⁱⁱ	2.806(2)	157
N2–H2N··F4 ⁱⁱ	2.911(3)	127	N2–H2N··O1 ^b	2.708(2)	130
N2–H2N··O1 ^b	2.731(3)	129			
21e			22e ·2.5CHCl ₃		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O2 ^{iv}	2.923(3)	170	N1–H1N··O2 ^v	2.787(3)	152
			N2–H2N··F1 ⁱⁱ	2.987(3)	157
			N2–H2N··O1 ^b	2.610(3)	103

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 – x, –y, 1 – z; (ii) x, y, z; (iii) 2 – x, 1 – y, 1 – z; (iv) 2 – x, 2 – y, 1 – z; (v) 1 – x, 2 – y, –z. ^bIntramolekulární vodíková vazba.

Tabulka S20: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur **23b**·2CHCl₃, **23c**·2CHCl₃, **23e**·2CHCl₃, **24c**·4CH₂Cl₂·2MeOH a **24e**·4MeOH.

Sloučenina	23b ·2CHCl ₃	23c ·2CHCl ₃	23e ·2CHCl ₃	24c ·4CH ₂ Cl ₂ ·2MeOH	24e ·4MeOH
Vzorec	C ₅₄ H ₅₂ Cl ₈ Fe ₂ N ₄ O ₄ P ₂ Pd	C ₆₂ H ₅₂ Cl ₈ Fe ₂ N ₄ O ₄ P ₂ Pd	C ₅₂ H ₄₆ Cl ₈ Fe ₂ N ₂ O ₄ P ₂ Pd	C ₆₆ H ₆₈ C ₁₁₀ Fe ₂ N ₆ O ₆ P ₂ Pd	C ₅₄ H ₆₂ Cl ₂ Fe ₂ N ₄ O ₈ P ₂ Pd
M [g mol ⁻¹]	1384.64	1480.72	1462.93	1675.80	1246.02
Krystalová třída	trojklonná	trojklonná	trojklonná	trojklonná	trojklonná
Prostorová grupa	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1	<i>P</i> -1
<i>T</i> [K]	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)	150(2)
<i>a</i> [Å]	11.4278(3)	9.4533(2)	11.4520(4)	10.2783(3)	9.3161(2)
<i>b</i> [Å]	12.3244(3)	12.5241(3)	12.2444(4)	12.3884(4)	9.6797(3)
<i>c</i> [Å]	12.7464(3)	13.5320(3)	12.3747(4)	14.2852(5)	17.1429(5)
<i>α</i> [°]	88.051(1)	100.267(1)	64.948(1)	105.124(1)	74.3642(9)
<i>β</i> [°]	70.232(1)	100.093(1)	70.613(1)	91.556(1)	88.8046(9)
<i>γ</i> [°]	64.119(1)	96.099(1)	73.113(1)	94.468(1)	67.8856(9)
<i>V</i> [Å ³]	1506.22(6)	1536.35(6)	1459.84(8)	1748.5(1)	1373.53(7)
<i>Z</i>	1	1	1	1	1
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.526	1.600	1.664	1.592	1.506
<i>μ</i> (MoKα) [mm ⁻¹]	1.225	1.207	1.259	1.147	1.057
Celkem měřených difrakcí	16922	21390	18620	28339	18998
<i>R</i> _{int} [%] ^b	2.60	1.74	2.71	2.87	1.90
Nezávislé difrakce	5915	7054	6694	8011	6318
Pozorované difrakce ^c	4959	6197	5378	6515	5669
Počet parametrů	296	380	287	422	315
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	3.00	3.32	3.18	4.28	2.33
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	3.78, 7.74	3.97, 8.76	4.42, 7.38	5.58, 12.67	2.69, 6.15
<i>Δρ</i> [e Å ⁻³]	0.66, -0.50	1.00, -1.21	0.48, -0.61	1.13, -1.302	0.69, -0.32

^a Rozsah transmisních faktorů.

^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)\} / \sum w(F_o^2)^2]^{1/2}$.

Tabulka S21: Vybrané vazebné délky a úhly pro látku **23b**·2CHCl₃, **23c**·2CHCl₃ a **23e**·2CHCl₃ v Å a °.

23b ·2CHCl ₃		23c ·2CHCl ₃		23e ·2CHCl ₃	
Pd–Cl1a	2.2920(6)	Pd–Cl1	2.301(2)	Pd–Cl	2.3027(6)
		Pd–Cl1b	2.265(8)	Pd–P	2.3317(6)
Pd–P	2.3316(7)	Pd–P	2.3391(5)	P–C6	1.802(2)
P–C6	1.799(2)	P–C6	1.803(2)	P–C12	1.814(2)
P–C12	1.821(2)	P–C12	1.820(2)	P–C18	1.825(2)
P–C18	1.826(2)	P–C18	1.819(2)	Fe–Cg(C) ^a	1.648(1)
Fe–Cg(C) ^a	1.648(1)	Fe–Cg(C) ^a	1.643(1)	Fe–Cg(P) ^a	1.648(1)
Fe–Cg(P) ^a	1.641(1)	Fe–Cg(P) ^a	1.644(1)	O1–C11	1.222(3)
O1–C11	1.219(3)	O1–C11	1.227(3)	O2–C24	1.211(3)
O2–C24	1.231(3)	O2–C24	1.221(3)	N1–C11	1.377(3)
N1–C11	1.378(3)	N1–C11	1.377(3)	N1–C24	1.380(3)
N1–C24	1.406(4)	N1–C24	1.399(3)		
N2–C24	1.337(3)	N2–C24	1.340(3)		
Cl–Pd–P/a	86.12(2)/93.88(2)	Cl1/B–Pd–P	90.90(4)/85.9(2)	Cl–Pd–P/a	85.90(2)/94.10(2)
		P–Pd–Cl1a/Ba	89.10(4)/94.1(2)		
O1–C11–N1	123.8(2)	O1–C11–N1	122.6(2)	O1–C11–N1	122.7(2)
O2–C24–N1	117.9(2)	O2–C24–N1	119.1(2)	O2–C24–N1	118.4(2)
O2–C24–N2	125.2(3)	O2–C24–N2	124.4(2)	∠ Cp(P), Cp(C)	3.1(2)
N1–C24–N2	116.9(2)	N1–C24–N2	116.5(2)	τ ^b	–153.2(2)
∠ Cp(P), Cp(C)	4.7(1)	∠ Cp(P), Cp(C)	3.5(2)	φ ^c	10.8(3)
τ ^b	–137.0(1)	τ ^b	–145.1(2)		
φ ^c	13.6(3)	φ ^c	16.3(3)		

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkcí.

^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6).

^c φ je dihedrální úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S22: Vybrané vazebné délky a úhly pro látky **24c**·4CH₂Cl₂·2MeOH a **24e**·4MeOH

v Å a °.

24c ·4CH ₂ Cl ₂ ·2MeOH		24e ·4MeOH	
Pd–Cl	2.3042(7)	Pd–Cl	2.2941(4)
Pd–P	2.3250(8)	Pd–P	2.3303(4)
P–C6	1.793(3)	P–C6	1.801(2)
P–C12	1.817(3)	P–C12	1.815(2)
P–C18	1.822(3)	P–C18	1.829(2)
Fe–Cg(C) ^a	1.648(2)	Fe–Cg(C) ^a	1.6438(9)
Fe–Cg(P) ^a	1.648(2)	Fe–Cg(P) ^a	1.6453(8)
O1–C11	1.240(4)	O1–C11	1.238(3)
O2–C24	1.227(4)	O2–C24	1.227(2)
N1–N2	1.384(5)	N1–N2	1.390(2)
N1–C11	1.351(4)	N1–C11	1.341(2)
N2–C24	1.372(5)	N2–C24	1.343(3)
N3–C24	1.353(5)	C24–C25	1.508(3)
Cl–Pd–P	93.52(3)	Cl–Pd–P	88.44(2)
Cl–Pd–P ^a	86.48(3)	Cl–Pd–P ^a	91.56(2)
O1–C11–N1	122.4(3)	O1–C11–N1	122.0(2)
O2–C24–N2	122.0(3)	O2–C24–N2	122.9(2)
O2–C24–N3	125.5(3)	O2–C24–N3	123.4(2)
N1–C24–N2	112.5(3)	N1–C24–N2	113.8(2)
∠ Cp(P), Cp(C)	6.2(2)	∠ Cp(P), Cp(C)	3.7(1)
τ ^b	141.7(2)	τ ^b	146.2(1)
φ ^c	8.1(4)	φ ^c	7.4(2)

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkci.

^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6).

^c φ je dihedralní úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S23: Vybrané vodíkové vazby v krystalech látek **23b**·2CHCl₃,

23c·2CHCl₃, **23e**·2CHCl₃, **24c**·4CH₂Cl₂·2MeOH a **24e**·4MeOH.

23b ·2CHCl ₃			23c ·2CHCl ₃		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O2 ⁱ	2.870(2)	170	N1–H1N··O2 ⁱⁱ	2.818(3)	171
N2–H2N··O1 ^b	2.654(2)	143	N2–H2N··O1 ^b	2.652(3)	140
23e ·2CHCl ₃			24c ·4CH ₂ Cl ₂ ·2MeOH		
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N··O2 ⁱⁱⁱ	2.930(3)	158	N1–H1N··O81 ^{iv}	2.787(4)	158
24e ·4MeOH			O81–H1O··O2 ^v	2.765(4)	165
D–H··A ^a	D··A [Å]	∠ na H [°]	N2–H2N··O1 ^{vi}	3.153(4)	144
N1–H1N··O1S ^{iv}	2.777(3)	162	N3–H3N··O1 ^{vi}	2.813(4)	155
O1S–H1O··O2 ^{vii}	2.811(2)	166			
N2–H2N··O1 ^{viii}	2.873(2)	172			

^a D = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 – x, 2 – y, 2 – z; (ii) 2 – x, 2 – y, 2 – z; (iii) 1 – x, 1 – y, –z, (iv) x, y, z; (v) –x, –y, –z; (vi) 1 – x, –y, –z; (vii) 2 – x, 1 – y, 2 – z; (viii) 2 – x, 2 – y, 2 – z. ^b Intramolekulární vodíková vazba.

Tabulka S24: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur **25a**, **25b** a **25g**.

Sloučenina	25a	25b	25g
Vzorec	C ₂₉ H ₃₁ ClFeN ₃ O ₂ PPd	C ₃₁ H ₃₅ ClFeN ₃ O ₂ PPd	C ₂₆ H ₂₅ ClFeNOPPd
M [g mol ⁻¹]	682.24	710.29	596.14
Krystalová třída	jednoklonná	jednoklonná	trojklonná
Prostorová grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	<i>P</i> -1
<i>T</i> [K]	150(2)	150(2)	150(2)
<i>a</i> [Å]	9.3319(2)	17.3101(5)	10.0035(5)
<i>b</i> [Å]	15.8296(4)	15.7135(5)	10.7671(5)
<i>c</i> [Å]	18.8286(5)	11.6402(3)	12.2831(7)
α [°]			68.505(2)
β [°]	93.145(1)	102.895(1)	78.504(2)
γ [°]			84.740(2)
<i>V</i> [Å ³]	2777.2(1)	3086.3(2)	1206.0(1)
<i>Z</i>	4	4	2
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.632	1.529	1.642
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	1.356	1.223	1.543
Celkem měřených difrakcí	47321	18081	23133
<i>R</i> _{int} [%] ^b	4.32	2.38	2.76
Nezávislé difrakce	6369	5948	5259
Pozorované difrakce ^c	5360	5246	4651
Počet parametrů	353	378	299
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	2.70	2.48	2.26
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	3.81, 6.44	3.06, 6.39	2.81, 518
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	0.64, -0.56	0.41, -0.50	0.42, -0.50

^a Rozsah transmisních faktorů.

^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)_2\} / \sum w(F_o^2)]^{1/2}$.

Tabulka S25: Vybrané vazebné délky a úhly pro látku **25a**, v Å a °.

	25a	25b	25g
Pd–Cl	2.3887(6)	2.3924(6)	2.3966(6)
Pd–P1	2.3183(6)	2.3167(6)	2.3153(6)
Pd–C51/51B	2.210(5)/1.97(8)	2.303(5)/2.110(8)	2.217(8)/2.28(3)
Pd–C52/52B	2.155(3)/2.15(4)	2.216(5)/2.069(6)	2.161(3)/2.13(1)
Pd–C53/53B	2.12(1)/2.1(1)	2.138(7)/2.08(1)	2.124(5)/2.12(2)
P1–C6	1.805(2)	1.803(2)	1.802(2)
P1–C12	1.822(2)	1.824(2)	1.829(2)
P1–C18	1.825(2)	1.826(2)	1.831(2)
Fe–Cg(C) ^a	1.653(1)	1.643(1)	1.659(1)
Fe–Cg(P) ^a	1.648(1)	1.642(1)	1.651(1)
O1–C11	1.233(3)	1.245(3)	1.239(3)
O2–C26	1.231(3)	1.237(3)	1.334(3)
N1–C11	1.340(3)	1.335(3)	
N2–C26	1.356(3)	1.357(3)	
N3–C26	1.358(3)	1.350(3)	
Cl–Pd–P	104.73(2)	105.59(2)	105.92(2)
Cl–Pd–C51/51B	93.1(2)/93(3)	93.5(1)/93.5(2)	93.5(2)/97.6(8)
Cl–Pd–C52/52B	125.96(8)/127(1)	123.8(1)/125.0(2)	125.06(9)/126.9(3)
Cl–Pd–C53/53B	159.3(2)/165(2)	158.6(2)/162.0(3)	161.9(2)/154.9(6)
P1–Pd–C51/51B	161.6(2)/162(3)	158.8(1)/160.0(2)	160.3(2)/154.5(9)
P1–Pd–C52/52B	127.94(8)/124(1)	129.7(1)/126.5(2)	126.51(9)/124.7(3)
P1–Pd–C53/53B	94.7(2)/90(2)	95.0(2)/92.1(3)	92.1(2)/97.0(6)
C51–Pd–C52/52B	36.4(2)/38(3)	35.3(2)/38.6(3)	36.7(2)/30.1(9)
C51–Pd–C53/53B	67.1(2)/72(3)	65.3(2)/68.6(4)	68.5(3)/62(1)
C52–Pd–C53/53B	38.1(2)/38(2)	37.9(2)/95.0(2)	38.7(2)/37.4(7)
O1–C11–N1	122.5(2)	121.8(2)	121.7(2)
O2–C26–N2	121.0(2)	122.1(2)	
O2–C26–N3	123.2(2)	122.2(2)	
N1–C26–N2	115.8(2)	115.7(2)	
∠ Cp(P), Cp(C)	2.5(1)	1.7(1)	3.5(1)
τ ^b	98.8(2)	–97.9(2)	76.2(2)
φ ^c	4.4(3)	7.6(2)	8.3(3)

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkci.

^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6).

^c φ je dihedralní úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S26: Vybrané vodíkové vazby v krystalech látky **25a**, **25b** a **25g**.

25a			25b		
D–H···A ^a	D···A [Å]	∠ na H [°]	D–H···A ^a	D···A [Å]	∠ na H [°]
N1–H1N···Cl ^b	3.317(2)	157	N1–H1N···Cl ^b	3.296(2)	163
N2–H2N···O1 ^b	3.273(3)	145	N3–H3N···O1 ⁱⁱⁱ	2.849(3)	168
N3–H3N···O1 ⁱ	2.893(3)	169			
N3–H4N···Cl ⁱⁱⁱ	3.388(2)	136			
25g					
D–H···A ^a	D···A [Å]	∠ na H [°]			
N1–H1N···O1 ^v	3.035(3)	163			
N1–H2N···Cl ^b	3.425(2)	164			

^aD = donor, A = akceptor. Kódy symetrie: (i) 1 – x, 1 – y, 2 – z; (ii) 1 + x, y, z; (iii) –x, 1 – y, 1 – z; (iv) 1 + x, 1/2 – y, 1/2 + z; (v) 1 – x, 1 – y, 1 – z. ^bIntramolekulární vodíková vazba.

Tabulka S27: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktury **28e**.

Sloučenina	28e
Vzorec	C ₃₇ H ₄₁ Cl ₂ FeN ₂ O ₂ PRu
M [g mol ⁻¹]	804.51
Krystalová třída	jednoklonná
Prostorová grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>
<i>T</i> [K]	150(2)
<i>a</i> [Å]	9.0334(2)
<i>b</i> [Å]	35.118(1)
<i>c</i> [Å]	11.5061(3)
β [°]	108.9020(9)
<i>V</i> [Å ³]	3453.3(2)
<i>Z</i>	4
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.547
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	1.095
Celkem měřených difrakcí	27443
<i>R</i> _{int} [%] ^b	2.37
Nezávislé difrakce	7925
Pozorované difrakce ^c	7118
Počet parametrů	419
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	3.41
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	4.00, 7.15
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	0.91, -0.73

^a Rozsah transmisních faktorů. ^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí. ^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$. ^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)\} / \sum w(F_o^2)^2]^{1/2}$.

Tabulka S28: Vybrané vazebné délky a úhly pro látku **28e** v Å a °.

Ru–C11	2.4144(6)	C11–Ru–C12	88.14(2)
Ru–C12	2.4200(7)	C11–Ru–P	88.34(2)
Ru–P	2.3631(6)	C12–Ru–P	89.07(2)
P–C6	1.822(2)	C11–Ru–Cg(cym)	126.80(4)
P–C12	1.828(3)	C12–Ru–Cg(cym)	123.36(5)
P–C18	1.828(2)	P–Ru–Cg(cym)	128.66(4)
Fe–Cg(C) ^a	1.654(1)	O1–C11–N1	123.0(3)
Fe–Cg(P) ^a	1.647(1)	O2–C26–N2	121.8(4)
Ru–Cg(cym)	1.713(1)	\angle Cp(P), Cp(C)	3.3(2)
O1–C11	1.231(3)	τ ^b	-100.4(2)
O2–C26	1.232(6)	φ ^c	17.3(3)
N1–C11	1.340(3)		
N2–C26	1.340(5)		

^a Cg(C) je centroid cyklopentadienylového kruhu (Cp) nesoucího amidovou funkci, Cg(P) je centroid cyklopentadienylového kruhu s fosfinovou funkcí, Cg(cym) je centroid benzenového kruhu cymenu.

^b τ je torzní úhel (např. C1–Cg(C)–Cg(P)–C6).

^c φ je dihedralní úhel mezi Cp(C) a amidovou skupinou (O=C–N).

Tabulka S29: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur **k9i**, **k9m** a **k9mm**.

Sloučenina	k9i	k9m	k9mm
Vzorec	C ₁₃ H ₉ FO	C ₁₃ H ₉ NO ₃	C ₁₃ H ₈ N ₂ O ₅
M [g mol ⁻¹]	200.20	227.21	227.21
Krystalová třída	jednoklonná	jednoklonná	orthorhombická
Prostorová grupa	<i>P2₁/n</i>	<i>P2₁/n</i>	<i>Fdd2</i>
<i>T</i> [K]	150(2)	150(2)	150(2)
<i>a</i> [Å]	6.106(1)	3.9190(2)	12.8221(5)
<i>b</i> [Å]	21.998(4)	23.051(1)	31.0744(9)
<i>c</i> [Å]	7.365(1)	11.5262(5)	6.0751(2)
β [°]	90.250(8)	90.575(2)	90.00
<i>V</i> [Å ³]	989.3(3)	1041.20(9)	2420.6(1)
<i>Z</i>	4	4	8
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.344	1.449	1.494
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	0.097	0.105	0.118
Celkem měřených difrakcí	8263	7059	3757
<i>R</i> _{int} [%] ^b	6.67	2.77	1.80
Nezávislé difrakce	1885	2367	1337
Pozorované difrakce ^c	987	1764	1303
Počet parametrů	145	154	92
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	4.71	4.45	3.21
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	12.03, 12.57	6.83, 11.13	3.30, 8.43
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	0.16, -0.17	0.28, -0.28	0.14, -0.22

^a Rozsah transmisních faktorů.

^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)_2\} / \sum w(F_o^2)]^{1/2}$.

Tabulka S30: Vybrané vazebné délky a úhly pro látky **k9i**, **k9m** a **k9mm** v Å a °.

k9i		k9m		k9mm
F1–C5	1.294(4)	O1–C1	1.225(2)	1.218(3)
F2–C11	1.298(4)	O2–N1	1.222(2)	1.214(2)
O1–C1	1.234(3)	O3–N1	1.215(2)	1.211(2)
C1–C2	1.486(3)	N1–C5	1.476(2)	1.477(2)
C1–C8	1.491(3)	C1–C2	1.499(2)	1.494(2)
O1–C1–C2	118.7(2)	C1–C8	1.488(2)	
O1–C1–C8	118.9(2)	O2–N1–O3	123.4(2)	122.9(1)
F1–C5–C4/F2–C11–C12	120.6(2)/120.4(2)	O2–N1–C5	118.1(2)	118.2(1)
F1–C5–C6/F2–C11–C10	118.5(2)/117.1(2)	O3–N1–C5	118.4(2)	118.9(1)
		O1–C1–C2	118.4(2)	119.40(8)
		O1–C1–C8	120.7(2)	

Tabulka S31: Krystalografická data, parametry měření a upřesnění struktur látky **k9t**.

Sloučenina	k9t
Vzorec	C ₁₇ H ₁₃ F ₃ O ₂
M [g mol ⁻¹]	306.27
Krystalová třída	jednoklonná
Prostorová grupa	<i>P2₁/c</i>
<i>T</i> [K]	150(2)
<i>a</i> [Å]	16.5387(4)
<i>b</i> [Å]	14.1110(4)
<i>c</i> [Å]	5.8404(2)
β [°]	90.5180(10)
<i>V</i> [Å ³]	1362.96(7)
<i>Z</i>	4
<i>D</i> _{calc} [g mL ⁻¹]	1.493
μ (MoK α) [mm ⁻¹]	1.068
Celkem měřených difrakcí	29144
<i>R</i> _{int} [%] ^b	4.94
Nezávislé difrakce	2660
Pozorované difrakce ^c	2441
Počet parametrů	200
<i>R</i> (pozorované difrakce) [%] ^{c,d}	3.98
<i>R</i> , <i>wR</i> (všechny difrakce) [%] ^d	4.29, 1020
$\Delta\rho$ [e Å ⁻³]	0.31, -0.23

^a Rozsah transmisních faktorů.

^b $R_{\text{int}} = \sum |F_o^2 - F_c^2(\text{mean})| / \sum F_o^2$, kde $F_o^2(\text{mean})$ značí průměrnou intenzitu symetricky ekvivalentních difrakcí.

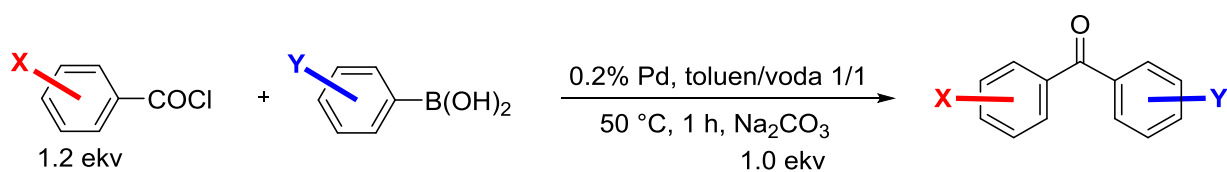
^c Difrakce s $I_o > 2\sigma(I_o)$.

^d $R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR = [\sum \{w(F_o^2 - F_c^2)_2\} / \sum w(F_o^2)^2]^{1/2}$.

Tabulka S32: Vybrané vazebné délky a úhly pro látku **k9t** v Å a °.

F1–C17	1.340(2)	O1–C1–C2	120.6(1)
F2–C17	1.334(2)	O1–C1–C4	120.7(1)
F3–C17	1.342(2)	F1–C17–F2	106.6(1)
O1–C1	1.226(2)	F1–C17–F3	105.4(1)
O2–C7	1.368(2)	F2–C17–F3	106.0(1)
O2–C10	1.434(2)	F1–C17–C14	112.7(1)
C1–C2	1.489(2)	F2–C17–C14	113.1(1)
C1–C4	1.485(2)	F3–C17–C14	112.5(1)
C2–C3	1.333(2)		

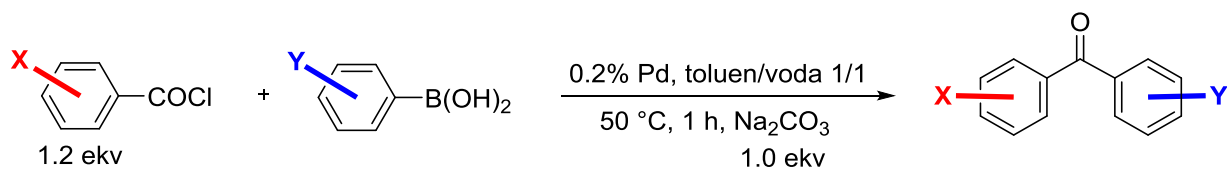
1.2 Obecný postup aroylboronační reakce katalyzované komplexem **25c**



Do Schlenkovy baňky s kohoutem bylo naváženo 210.8 mg (1.5 mmol) benzoyl chloridu a z lodičky přidáno příslušné množství (1.25 mmol) boronové kyseliny, 132.5 mg (1.25 mmol) uhličitanu sodného a 1.9 mg (0.0025 mmol) látky **25c**. Do baňky bylo vloženo magnetické míchadlo, baňka byla vypláchnuta argonem a uzavřena septem. Do baňky byly přidány 3 ml toluenu a 3 ml vody a baňka byla umístěna do olejové lázně předem vyhřáté na 50 °C. Směs byla míchána po dobu 1 hodiny v temnu. Po této době byla směs přenesena do dělicí nálevky, zředěna cca 20 ml diethyletheru a následně byla oddělena bezbarvá vodná fáze. Organická fáze byla 2× protřepána 3M HCl, 4× 5% roztokem KOH a 2× nasyceným vodným roztokem NaCl. Následně byla organická fáze sušena stáním nad bezvodným MgSO₄. Surový produkt byl odpařen a preadsorbován na silikagelu. Látka byla čištěna chromatografií na sloupci silikagelu v soustavě hexan/AcOEt 30/1 nebo 10/1 (v/v). Produkt byl jímán do zkumavek. Frakce produktu byly spojeny, odpařeny dosucha na vakuové odparce a dále sušeny ve vakuovém exsikátoru.

Při experimentech s použitím různých halogenidů kyselin jsem vážila 152.4 mg (1.25 mmol) fenyloboronové kyseliny a příslušné množství (1.5 mmol) acylchloridu.

1.3 Obecný postup aroylboronační reakce katalyzované komplexem generovaným *in situ* z ligandu **15** a [Pd(OAc)₂]



Do Schlenkovy baňky bylo naváženo 421.7 mg (3.0 mmol) benzoyl chloridu a z lodičky přidáno příslušné množství (2.5 mmol) boronové kyseliny, 265 mg (2.5 mmol) uhličitanu sodného, na skleněném střepe navážené 3.21 mg ligandu **15** a 1.12 mg octanu palladnatého. Do baňky bylo vloženo magnetické míchadlo, baňka byla vypláchnuta argonem a uzavřena

septem. Do baňky byly přidány 3 ml toluenu a 3 ml vody a baňka byla umístěna do olejové lázně předem vyhřáté na 50 °C. Směs byla míchána po dobu 1 hodiny v temnu. Po této době byla směs přenesena do dělicí nálevky, zředěna cca 20 ml diethyletheru a následně byla oddělena bezbarvá vodná fáze. Organická fáze byla 2× protřepána 3M HCl, 4× 5% roztokem KOH a 2× nasyceným vodným roztokem NaCl. Následně byla organická fáze sušena stáním nad bezvodým MgSO₄. Surový produkt byl odpařen a preadsorbován na silikagelu. Látka byla čištěna chromatografií na sloupci silikagelu v soustavě hexan/AcOEt 30/1, 10/1 nebo 5/1 (v/v). Produkt byl jímán do zkumavek. Frakce produktu byly spojeny, odpařeny dosucha na vakuové odparce a dále sušeny ve vakuovém exsikátoru.

Při experimentech s použitím různých halogenidů kyselin jsem vážila 304.8 mg (2.5 mmol) fenyloboronové kyseliny a příslušné množství (3.0 mmol) acylchloridu.

Benzofenon (**k9a**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.45–7.51 (m, 4 H, Ph), 7.56–7.62 (m, 2 H, Ph), 7.78–7.83 (m, 4 H, Ph). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 128.28 (s, 4 C, Ph), 130.06 (s, 4 C, Ph), 132.41 (s, 2 C, Ph), 137.61 (s, 2 C, Ph), 196.75 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.¹

1-Naftyl fenyl keton (**k9b**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.42–7.62 (m, 7 H, Ar), 7.84–7.89 (m, 1 H, Ar), 7.90–7.94 (m, 1 H, Ar), 7.98–8.02 (m, 1 H, Ar), 8.07–8.11 (m, 1 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 124.33 (s, 1 C, Ar), 125.70 (s, 1 C, Ar), 126.46 (s, 1 C, Ar), 127.25 (s, 1 C, Ar), 127.75 (s, 1 C, Ar), 128.40 (s, 1 C, Ar), 128.45 (s, 2 C, Ar), 130.41 (s, 2 C, Ar), 130.96 (s, 1 C, Ar), 131.26 (s, 1 C, Ar), 133.22 (s, 1 C, Ar), 133.72 (s, 1 C, Ar), 136.37 (s, 1 C, Ar), 138.33 (s, 1 C, Ar), 198.02 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.² Pozn.: **Naftalen**, který byl izolován jako vedlejší produkt během chromatografického zpracování, byl identifikován srovnáním s autentickým vzorkem. ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.46–7.51 (m, 4 H, Ar), 7.81–7.88 (m, 4 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 125.81 (s, 4 C, Ar), 127.88 (s, 4 C, Ar), 133.45 (s, 2 C, Ar).

2-Methylbenzofenon (**k9c**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 2.33 (s, 3 H, CH₃), 7.22–7.33 (m, 3 H, Ar), 7.36–7.42 (m, 1 H, Ar), 7.42–7.48 (m, 2 H, Ar), 7.55–7.61 (m, 1 H, Ar), 7.78–7.82 (m, 2 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 19.98 (s, 1 C, CH₃), 125.19 (s, 1 C, Ar), 128.46 (s, 2 C, Ar), 128.52 (s, 1 C, Ar), 130.13 (s, 2 C, Ar), 130.24 (s, 1 C, Ar), 31.00 (s, 1 C, Ar), 133.13 (s, 1 C, Ar), 136.75 (s, 1 C, Ar), 137.76 (s, 1 C, Ar), 138.64 (s, 1 C, Ar), 198.65 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.^{3,4}

3-Methylbenzofenon (**k9d**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 2.42 (s, 3 H, CH_3), 7.33–7.42 (m, 2 H, Ar), 7.45–7.50 (m, 2 H, Ar), 7.55–7.64 (m, 3 H, Ar), 7.78–7.82 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 21.36 (s, 1 C, CH_3), 127.37 (s, 1 C, Ar), 128.09 (s, 1 C, Ar), 128.25 (s, 2 C, Ar), 130.05 (s, 2 C, Ar), 130.46 (s, 1 C, Ar), 132.34 (s, 1 C, Ar), 133.19 (s, 1 C, Ar), 137.65 (s, 1 C, Ar), 137.78 (s, 1 C, Ar), 138.16 (s, 1 C, Ar), 196.97 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.^{3,4}

4-Methylbenzophenone (**k9e**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 2.44 (s, 3 H, CH_3), 7.26–7.30 (m, 2 H, Ar), 7.44–7.50 (m, 2 H, Ar), 7.54–7.60 (m, 1 H, Ar), 7.70–7.75 (m, 2 H, Ar), 7.76–7.80 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 21.86 (s, 1 C, CH_3), 128.41 (s, 2 C, Ar), 129.18 (s, 2 C, Ar), 130.13 (s, 2 C, Ar), 130.52 (s, 2 C, Ar), 132.36 (s, 1 C, Ar), 135.10 (s, 1 C, Ar), 138.18 (s, 1 C, Ar), 143.44 (s, 1 C, Ar), 196.72 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.^{3,4}

2,4,6-Trimethylbenzofenon (**k9f**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 2.08 (s, 6 H, CH_3), 2.33 (s, 3 H, CH_3), 6.89 (q, $^4J_{\text{HH}} = 0.6$ Hz, 2 H, Ar), 7.40–7.47 (m, 2 H, Ar), 7.53–7.59 (m, 1 H, Ar), 7.78–7.83 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 19.35 (s, 2 C, CH_3), 21.15 (s, 1 C, CH_3), 128.33 (s, 2 C, Ar), 128.79 (s, 2 C, Ar), 129.39 (s, 2 C, Ar), 133.54 (s, 2 C, Ar), 134.19 (s, 1 C, Ar), 136.89 (s, 1 C, Ar), 137.32 (s, 1 C, Ar), 138.49 (s, 1 C, Ar), 200.75 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.³

4-Methoxybenzofenon (**k9g**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 3.88 (s, 3 H, OCH_3), 6.93–6.98 (m, 2 H, Ar), 7.44–7.50 (m, 2 H, Ar), 7.53–7.59 (m, 1 H, Ar), 7.72–7.78 (m, 2 H, Ar), 7.80–7.85 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 55.49 (s, 1 C, OCH_3), 113.56 (s, 2 C, Ar), 128.19 (s, 2 C, Ar), 129.73 (s, 2 C, Ar), 131.88 (s, 1 C, Ar), 132.56 (s, 2 C, Ar), 138.30 (s, 1 C, Ar), 163.23 (s, 1 C, Ar), 172.46 (s, 1 C, Ar), 195.56 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.^{3,4}

4-Acetylbenzofenon (**k9h**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 2.67 (s, 3 H, COCH_3), 7.48–7.54 (m, 2 H, Ar), 7.60–7.65 (m, 1 H, Ar), 7.79–7.83 (m, 2 H, Ar), 7.85–7.89 (m, 2 H, Ar), 8.40–8.80 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 26.91 (s, 1 C, COCH_3), 128.17 (s, 2 C, Ar), 128.49 (s, 2 C, Ar), 130.05 (s, 2 C, Ar), 130.10 (s, 2 C, Ar), 133.00 (s, 1 C, Ar), 136.93 (s, 1 C, Ar), 139.58 (s, 1 C, Ar), 141.34 (s, 1 C, Ar), 195.95 (s, 1 C, CO), 197.51 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.³

4-Fluorobenzofenon (**k9i**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.12–7.20 (m, 2 H, Ar), 7.46–7.52 (m, 2 H, Ar), 7.57–7.62 (m, 1 H, Ar), 7.75–7.80 (m, 2 H, Ar), 7.82–7.88 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR

(CDCl₃): δ 115.64 (d, $J_{FC} = 22$ Hz, 2 C, Ar), 128.54 (s, 2 C, Ar), 130.06 (s, 2 C, Ar), 132.66 (s, 1 C, Ar), 132.85 (d, $J_{FC} = 9$ Hz, 2 C, Ar), 133.99 (d, $J_{FC} = 3$ Hz, 1 C, Ar), 137.69 (s, 1 C, Ar), 165.60 (d, ${}_1J_{FC} = 295$ Hz, 1 C, Ar) 195.47 (s, 1 C, CO). $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl₃): δ -106.3 (s). Data se shodují s literaturou.^{3,4}

4-Chlorobenzofenon (**k9j**). ^1H NMR (CDCl₃): δ 7.44–7.52 (m, 4 H, Ar), 7.58–7.63 (m, 1 H, Ar), 7.74–7.80 (m, 4 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl₃): δ 128.41 (s, 2 C, Ar), 128.64 (s, 2 C, Ar), 129.93 (s, 2 C, Ar), 131.46 (s, 2 C, Ar), 132.65 (s, 1 C, Ar), 135.88 (s, 1 C, Ar), 137.26 (s, 1 C, Ar), 138.90 (s, 1 C, Ar) 195.49 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.⁵

4-Bromobenzofenon (**k9k**). ^1H NMR (CDCl₃): δ 7.46–7.52 (m, 2 H, Ar), 7.58–7.65 (m, 3 H, Ar), 7.66–7.70 (m, 2 H, Ar), 7.75–7.79 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl₃): δ 127.51 (s, 1 C, Ar), 128.41 (s, 2 C, Ar), 129.93 (s, 2 C, Ar), 131.57 (s, 2 C, Ar), 131.61 (s, 2 C, Ar), 132.67 (s, 1 C, Ar), 136.32 (s, 1 C, Ar), 137.18 (s, 1 C, Ar), 195.63 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.⁵

Charakterizační data pro 4-benzoyl-4'-bromobifenyl (izolován jako vedlejší produkt): ^1H NMR (CDCl₃): δ 7.48–7.54 (m, 4 H, Ar), 7.58–7.64 (m, 3 H, Ar), 7.64–7.69 (m, 2 H, Ar), 7.81–7.85 (m, 2 H, Ar), 7.87–7.91 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl₃): δ 122.61 (s, 1 C, Ar), 126.77 (s, 2 C, Ar), 128.34 (s, 2 C, Ar), 128.85 (s, 2 C, Ar), 130.00 (s, 2 C, Ar), 130.81 (s, 2 C, Ar), 132.12 (s, 2 C, Ar), 132.48 (s, 1 C, Ar), 136.60 (s, 1 C, Ar), 137.63 (s, 1 C, Ar), 138.89 (s, 1 C, Ar), 143.92 (s, 1 C, Ar) 196.20 (s, 1 C, CO). HR MS (ESI): vypočteno pro C₁₉H₁₄OBr ([M + H]⁺) 337.0228, nalezeno 337.0236.

4-(Trifluoromethyl)benzofenon (**k9l**). ^1H NMR (CDCl₃): δ 7.48–7.54 (m, 2 H, Ar), 7.60–7.66 (m, 1 H, Ar), 7.74–7.78 (m, 2 H, Ar), 7.79–7.83 (m, 2 H, Ar), 7.87–7.92 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl₃): δ 123.67 (br q, ${}_1J_{FC} = 273$ Hz, 1 C, CF₃), 125.34 (q, ${}_3J_{FC} = 4$ Hz, 2 C, CH C₆H₄), 128.52 (s, 2 C, Ar), 130.10 (s, 2 C, Ar), 130.13 (s, 2 C, Ar), 133.08 (s, 1 C, Ar), 133.73 (br q, ${}_2J_{FC} = 32$ Hz, 1 C, C_{ipso} C₆H₄), 136.73 (s, 1 C, C_{ipso} Ar), 140.73 (s, 1 C, C_{ipso} Ar), 195.55 (s, 1 C, CO). $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl₃): δ -63.3 (s). Data se shodují s literaturou.³

4-Nitrobenzofenon (**k9m**). ^1H NMR (CDCl₃): δ 7.50–7.56 (m, 2 H, Ar), 7.63–7.69 (m, 1 H, Ar), 7.79–7.83 (m, 2 H, Ar), 7.92–7.96 (m, 2 H, Ar), 8.32–8.37 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl₃): δ 123.76 (s, 2 C, Ar), 128.90 (s, 2 C, Ar), 130.31 (s, 2 C, Ar), 130.91 (s, 2 C, Ar),

133.69 (s, 1 C, Ar), 136.51 (s, 1 C, Ar), 143.10 (s, 1 C, Ar), 170.89 (s, 1 C, Ar), 195.01 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.^{3,6}

4-Kyanobenzofenon (**k9n**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.49–7.55 (m, 2 H, Ar), 7.62–7.67 (m, 1 H, Ar), 7.77–7.82 (m, 4 H, Ar), 7.86–7.90 (m, 2 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 115.68 (s, 1 C, Ar), 118.01 (s, 1 C, Ar), 128.64 (s, 2 C, Ar), 130.07 (s, 2 C, Ar), 130.24 (s, 2 C, Ar), 132.17 (s, 2 C, Ar), 133.33 (s, 1 C, Ar), 136.34 (s, 1 C, Ar), 141.25 (s, 1 C, Ar), 195.04 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.⁶

trans-Chalkon (**k9o**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.40–7.45 (m, 3 H, Ar), 7.48–7.54 (m, 3 H, Ar a CH=CHCO), 7.55–7.62 (m, 1 H, Ar), 7.63–7.67 (m, 2 H, Ar), 7.82 (d, ³J_{HH} = 15.8 Hz, 1 H, CH=CHCO), 8.00–8.05 (m, 2 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 122.13 (s, 1 C, CH), 128.46 (s, 2 C, Ar), 128.52 (s, 2 C, Ar), 128.64 (s, 2 C, Ar), 128.98 (s, 2 C, Ar), 130.56 (s, 1 C, Ar), 132.79 (s, 1 C, Ar), 134.91 (s, 1 C, Ar), 138.24 (s, 1 C, Ar), 144.86 (s, 1 C, CH), 190.58 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.⁷

1,3-Difenylypropan-1-one (**k9p**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 3.04–3.10 (m, 2 H, CH₂), 3.27–3.33 (m, 2 H, CH₂), 7.17–7.33 (m, 5 H, Ar), 7.42–7.47 (m, 2 H, Ar), 7.52–7.58 (m, 1 H, Ar), 7.93–7.98 (m, 2 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 30.13 (s, 1 C, CH₂), 40.44 (s, 1 C, CH₂), 126.13 (s, 1 C, Ar), 128.04 (s, 2 C, Ar), 128.43 (s, 2 C, Ar), 128.53 (s, 2 C, Ar), 128.60 (s, 2 C, Ar), 133.05 (s, 1 C, Ar), 136.86 (s, 1 C, Ar), 141.30 (s, 1 C, Ar), 199.21 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.⁸

1,2-Difenylyethanon (**k9q**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 4.28 (s, 2 H, CH₂), 7.22–7.29 (m, 3 H, Ar), 7.29–7.35 (m, 2 H, Ar), 7.42–7.48 (m, 2 H, Ar), 7.52–7.58 (m, 1 H, Ar), 7.99–8.03 (m, 2 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 45.50 (s, 1 C, CH₂), 126.89 (s, 1 C, Ar), 128.61 (s, 2 C, Ar), 128.64 (s, 2 C, Ar), 128.67 (s, 2 C, Ar), 129.47 (s, 2 C, Ar), 133.15 (s, 1 C, Ar), 134.54 (s, 1 C, Ar), 136.61 (s, 1 C, Ar), 197.60 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.⁹

2-Furylbenzofenon (**k9r**). ¹H NMR (CDCl₃): δ 6.60 (dd, *J*_{HH} = 1.7, 3.5 Hz, 1 H, furyl), 7.24 (dd, *J*_{HH} = 0.8, 3.5 Hz, 1 H, furyl), 7.47–7.53 (m, 2 H, Ar), 7.57–7.62 (m, 1 H, Ar), 7.71 (dd, *J*_{HH} = 0.9, 1.8 Hz, 1 H, furyl), 7.95–7.99 (m, 2 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 112.22 (s, 1 C furyl), 120.63 (s, 1 C, furyl), 128.45 (s, 2 C, Ar), 129.30 (s, 2 C, Ar), 132.60 (s, 1 C, Ar), 137.25 (s, 1 C, C^{ipso} C₆H₅), 147.15 (s, 1 C, C^{ipso} furyl), 152.29 (s, 1 C, C^{ipso} furyl), 182.63 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.¹⁰

4,4'-Dimethoxybenzofenon (**k9gg**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 3.89 (s, 3 H, CH_3), 6.94–6.98 (m, 4 H, Ar), 7.76–7.81 (m, 4 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 55.47 (s, 1 C, CH_3), 113.47 (s, 4 C, Ar), 130.78 (s, 2 C, Ar), 132.23 (s, 4 C, Ar), 162.85 (s, 2 C, Ar), 194.47 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.^{13,14}

4,4'-Dinitrobenzofenon (**k9mm**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.95–7.99 (m, 4 H, Ar), 8.37–8.41 (m, 4 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 123.93 (s, 4 C, Ar), 130.86 (s, 4 C, Ar), 141.28 (s, 2 C, Ar), 150.40 (s, 2 C, Ar), 193.01 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.¹⁵

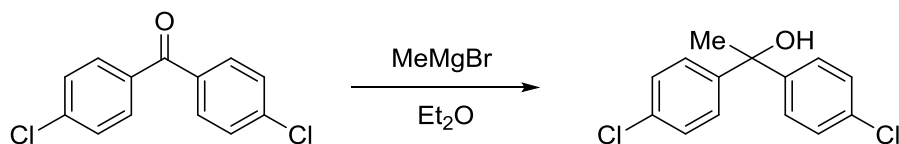
4-Methoxy-4'-nitrobenzofenon (**k9gm**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 3.91 (s, 3 H, CH_3), 6.97–7.02 (m, 2 H, Ar), 7.79–7.84 (m, 2 H, Ar), 7.86–7.91 (m, 2 H, Ar), 8.31–8.36 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 55.64 (s, 1 C, CH_3), 114.00 (s, 2 C, Ar), 123.49 (s, 2 C, Ar), 128.95 (s, 1 C, Ar), 130.34 (s, 2 C, Ar), 132.67 (s, 2 C, Ar), 143.82 (s, 1 C, Ar), 149.55 (s, 1 C, Ar), 164.04 (s, 1 C, Ar), 193.48 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.^{16,17}

2-Thienylbenzofenon (**k9s**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.16 (dd, $J_{\text{HH}} = 3.8, 4.9$ Hz, 1 H, thienyl), 7.47–7.53 (m, 2 H, Ar), 7.56–7.62 (m, 1 H, Ar), 7.65 (dd, $J_{\text{HH}} = 1.2, 3.8$ Hz, 1 H, thienyl), 7.72 (dd, $J_{\text{HH}} = 1.2, 5.0$ Hz, 1 H, thienyl), 7.85–7.89 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 127.96 (s, 1 C thiofen), 128.42 (s, 2 C, Ar), 129.17 (s, 2 C, Ar), 132.27 (s, 1 C, Ar), 134.21 (s, 1 C, thiofen), 134.85 (s, 1 C, thiofen), 138.16 (s, 1 C, $\text{C}^{\text{ipso}} \text{C}_6\text{H}_5$), 143.64 (s, 1 C, C^{ipso} thiofen), 188.24 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.¹⁰

(*E*)-1-(4-Methoxyfenyl)-3-(4-trifluoromethylfenyl)propenon (**k9t**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 3.90 (s, 3 H, OMe), 6.97–7.02 (m, 2 H, Ar), 7.57–7.82 (m, 6 H, Ar a $\text{CH}=\text{CH}$), 8.02–8.07 (m, 2 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 55.55 (s, 1 C OMe), 113.99 (s, 2 C, Ar), 123.87 (q, $J_{\text{FC}} = 272$ Hz, 1 C, CF_3), 124.11 (s, 1 C, $\text{CH}=\text{CH}$), 125.87 (q, $J_{\text{FC}} = 4$ Hz, 2 C, Ar), 128.41 (s, 2 C, Ar), 130.71 (s, 1 C, $\text{C}^{\text{ipso}} \text{C}_6\text{H}_4$), 130.92 (s, 2 C, Ar), 131.69 (q, $J_{\text{FC}} = 32$ Hz, 1 C, C^{ipso} Ar), 138.50 (q, $J_{\text{FC}} = 2$ Hz, 1 C, $\text{C}^{\text{ipso}} \text{C}_6\text{H}_4$), 141.88 (s, 1 C, $\text{CH}=\text{CH}$), 163.73 (s, 1 C, $\text{C}^{\text{ipso}} \text{C}_6\text{H}_4$), 188.19 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.¹¹

4,4'-Dichlorobenzofenon (**k9u**). ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.45–7.49 (m, 4 H, Ar), 7.70–7.75 (m, 4 H, Ar). $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ 128.78 (s, 4 C Ar), 131.32 (s, 4 C, Ar), 135.52 (s, 2 C, $\text{C}^{\text{ipso}} \text{C}_6\text{H}_5$), 139.17 (s, 2 C, $\text{C}^{\text{ipso}} \text{C}_6\text{H}_5$), 194.23 (s, 1 C, CO). Data se shodují s literaturou.¹²

1,1-Bis(4-chlorophenyl)ethanol (chlorfenethol)



Do suché baňky s magnetickým míchadlem bylo naváženo 125.5 mg (0.5 mmol) látky **k9u**, baňka byla vypláchnuta argonem a uzavřena septem. Navážka byla rozpuštěna v 15 ml suchého diethyletheru a roztok byl vychlazen v ledové lázni. Do roztoku bylo přikapáno 0.75 ml 1M roztoku MeMgBr v dibutyl etheru. Směs byla míchána 2 hodiny za chlazení, přičemž byl pozorován vznik bílé sraženiny. Reakce byla ukončena přidáním nasyceného vodného roztoku NH₄Cl, čímž došlo k rozpuštění sraženiny. Směs byla přenesena do dělicí nálevky a organická fáze byla extrahována nasycenými vodnými roztoky NaHCO₃ a poté NaCl. Organická fáze byla sušena nad bezvodým MgSO₄ a filtrována. Surový produkt byl chromatografován na sloupci silikagelu v soustavě dichlormethan/methanol 10/1 (v/v). Dominantní pás byl jímán a odpařen dosucha. Produkt byl izolován v množstvích 130 mg (97 %) a 131 mg (98 %)

¹H NMR (CDCl₃): δ 1.92 (s, 3 H, CH₃), 2.16 (s, 1 H, OH), 7.26–7.35 (m, 8 H, Ar). ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃): δ 30.82 (s, 1 C CH₃), 127.26 (s, 4 C Ar), 128.39 (s, 4 C, Ar), 133.06 (s, 2 C, C^{ipso} C₆H₅), 146.04 (s, 1 C, CO).

2 Reference:

- (1) Wong, Y.-C.; Parthasarathy, K.; Cheng, C.-H. *Org. Lett.* **2010**, *12*, 1736–1739.
- (2) Asao, N.; Aikawa, H.; Yamamoto, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 7458–7459.
- (3) Li, M.; Wang, C.; Ge, H. *Org. Lett.* **2011**, *13*, 2062–2064.
- (4) Chen, J.-Y.; Chen, S.-C.; Tang, Y.-J.; Mou, C.-Y.; Tsai, F.-Y. *J. Mol. Catal. A Chem.* **2009**, *307*, 88–92.
- (5) Karthikeyan, J.; Parthasarathy, K.; Cheng, C.-H. *Chem. Commun. (Camb)*. **2011**, *47*, 10461–10463.
- (6) Qin, C.; Chen, J.; Wu, H.; Cheng, J.; Zhang, Q.; Zuo, B.; Su, W.; Ding, J. *Tetrahedron Lett.* **2008**, *49*, 1884–1888.
- (7) Zhu, Y.; Zhao, B.; Shi, Y. *Org. Lett.* **2013**, *15*, 992–995.
- (8) Fox, D. J.; Pedersen, D. S.; Warren, S. *Org. Biomol. Chem.* **2006**, *4*, 3102–3107.
- (9) Zhao, B.; Lu, X. *Org. Lett.* **2006**, *8*, 5987–5990.
- (10) Jeon, K. O.; Jun, J. H.; Yu, J. S.; Lee, C. K. *J. Heterocycl. Chem.* **2003**, *40*, 763–771.
- (11) Abdellatif, K. R. a.; Elshemy, H. a. H.; Azoz, A. a. *Bioorg. Chem.* **2015**, *63*, 13–23.
- (12) Rao, M. L. N.; Venkatesh, V.; Dasgupta, P. *Tetrahedron Lett.* **2010**, *51*, 4975–4980.
- (13) Li, H.; Xu, Y.; Shi, E.; Wei, W.; Suo, X.; Wan, X. *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 7880–7882.
- (14) Babu, S. A.; Yasuda, M.; Baba, A. *Org. Lett.* **2007**, *9*, 405–408.
- (15) Davis, P. J.; Harris, L.; Karim, A.; Thompson, A. L.; Gilpin, M.; Moloney, M. G.; Pound, M. J.; Thompson, C. *Tetrahedron Lett.* **2011**, *52*, 1553–1556.
- (16) Ito, K.; Tamashima, H.; Iwasawa, N.; Kusama, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 3716–3719.
- (17) Suzuki, Y.; Ota, S.; Fukuta, Y.; Ueda, Y.; Sato, M. *J. Org. Chem.* **2008**, *73*, 2420–2423.