

Anexos

Tabla 1: Datos cristalográficos y detalles del afinamiento de la estructura cristalina del ligando 4-(4-bromotetrafluorofenil)piridina: (L₁)		
Formula empírica	C ₁₁ H ₄ Br ₁ F ₄ N ₁	
Peso molecular	153,03	
Temperatura	100(2) K	
Longitud de onda	0,71069 Å	
Sistema cristalino	ortorrómbico	
Grupo espacial	Pcnb	
Dimensiones de la celda unitaria	a = 7,809(5) Å	α = 90°
	b = 10,747(5) Å	β = 90°
	c = 11,826(5) Å	γ = 90°
Volumen	992,5(9) Å ³	
Z	4	
Densidad (calculada)	2,048 Mg/m ³	
Coefficiente de absorción	4,173 mm ⁻¹	
F(000)	592	
Dimensiones del cristal	0,50 x 0,50 x 0,38 mm ³	
Intervalo de θ	3,13 a 27,49°	
Índice del intervalo	-9 ≤ h ≤ 9	
	-12 ≤ K ≤ 13	
	-14 ≤ l ≤ 15	
Reflexiones recogidas	7940	
Método de refinamiento	Matriz completa de mínimos cuadrados	
Datos / restringidos / parámetros	1105 / 0 / 85	
GOF	1,087	
Índice R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0402, wR2 = 0,0985	
Índice R (todos los datos)	R1 = 0,0595, wR2 = 0,1132	

Tabla 2: Datos cristalográficos y detalles del afinamiento de la estructura cristalina de la esquina [PtCl₂(depe)]: (**E_s'**)

Formula empírica	C ₁₀ H ₂₄ Cl ₂ P ₂ Pt	
Peso molecular	472,22	
Temperatura	298(2) K	
Longitud de onda	0,71073 Å	
Sistema cristalino	monoclínico	
Grupo espacial	P2(1)/c	
Dimensiones de la celda unitaria	a = 9,5588(7) Å	α = 90°
	b = 12,4150(10) Å	β = 90,1230(10)°
	c = 13,4292(10) Å	γ = 90°
Volumen	1573,5(2) Å ³	
Z	4	
Densidad (calculada)	1,993 Mg/m ³	
Coefficiente de absorción	9,433 mm ⁻¹	
F(000)	904	
Dimensiones del cristal	0,50 x 0,20 x 0,16 mm ³	
Intervalo de θ	2,16 a 26,37°	
Índice del intervalo	-11 ≤ h ≤ 11	
	-10 ≤ K ≤ 15	
	-16 ≤ l ≤ 16	
Reflexiones recogidas	8421	
Método de refinamiento	Matriz completa de mínimos cuadrados	
Datos / restringidos / parámetros	3194 / 0 / 137	
GOF	1,059	
Índice R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0396, wR2 = 0,1037	
Índice R (todos los datos)	R1 = 0,0435, wR2 = 0,1067	

Tabla 3: Datos cristalográficos y detalles del afinamiento de la estructura cristalina de la esquina [Pd(dppf)(H₂O)₂](OTf)₂: (**E₄**)

Formula empírica	C ₃₆ H ₃₂ F ₆ Fe ₂ O ₈ P ₂ Pd S ₂	
Peso molecular	994,93	
Temperatura	298(2) K	
Longitud de onda	0,71073 Å	
Sistema cristalino	monoclínico	
Grupo espacial	P2(1)/n	
Dimensiones de la celda unitaria	a = 12,2828(11) Å	α = 90°
	b = 18,0154(16) Å	β = 97,666(2)°
	c = 18,1363(16) Å	γ = 90°
Volumen	3977,3(6) Å ³	
Z	4	
Densidad (calculada)	1,662 Mg/m ³	
Coefficiente de absorción	1,080 mm ⁻¹	
F(000)	2000	
Dimensiones del cristal	0,26 x 0,21 x 0,06 mm ³	
Intervalo de θ	1,60 a 26,39°	
Índice del intervalo	-15 ≤ h ≤ 9	
	-22 ≤ K ≤ 22	
	-22 ≤ l ≤ 22	
Reflexiones recogidas	23071	
Método de refinamiento	Matriz completa de mínimos cuadrados	
Datos / restringidos / parámetros	8119 / 0 / 521	
GOF	1,010	
Índice R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0500, wR2 = 0,1101	
Índice R (todos los datos)	R1 = 0,1008, wR2 = 0,1290	

Tabla 4: Datos cristalográficos y detalles del afinamiento de la estructura cristalina de la arista (NBu₄)[Au(C₅F₄N)₂]: (A₂)

Formula empírica	C ₂₆ H ₃₆ Au F ₈ N ₃	
Peso molecular	739,54	
Temperatura	293(2) K	
Longitud de onda	0,71069 Å	
Sistema cristalino	monoclínico	
Grupo espacial	P2 ₁ /n	
Dimensiones de la celda unitaria	a = 9,7080(10) Å	α = 90°
	b = 17,2870(10) Å	β = 93,5850(10)°
	c = 17,7240(10) Å	γ = 90°
Volumen	2968,7(4) Å ³	
Z	4	
Densidad (calculada)	1,655 Mg/m ³	
Coefficiente de absorción	5,025 mm ⁻¹	
F(000)	1456	
Dimensiones del cristal	0,1 x 0,1 x 0,2 mm ³	
Intervalo de θ	1,65 a 24,96°	
Índice del intervalo	-11 ≤ h ≤ 10	
	0 ≤ K ≤ 20	
	0 ≤ l ≤ 20	
Reflexiones recogidas/únicas	14405 / 4618 [R(int)=0,0068]	
Método de refinamiento	Matriz completa de mínimos cuadrados	
Datos / restringidos / parámetros	4618 / 0 / 343	
GOF	0,818	
Índice R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0296, wR2 = 0,0649	
Índice R (todos los datos)	R1 = 0,1317, wR2 = 0,1085	

Tabla 5: Datos cristalográficos y detalles del afinamiento de la estructura cristalina de la arista [Au(C₆F₄py)(PPh₃)]: (**A₅**)

Formula empírica	C ₂₉ H ₁₉ Au F ₄ N P	
Peso molecular	685,39	
Temperatura	293(2) K	
Longitud de onda	0,71073 Å	
Sistema cristalino	ortorrómbico	
Grupo espacial	Pbcn	
Dimensiones de la celda unitaria	a = 13,4380(10) Å	α = 90°
	b = 18,4960(10) Å	β = 90°
	c = 20,214(10) Å	γ = 90°
Volumen	5024(3) Å ³	
Z	8	
Densidad (calculada)	1,812 Mg/m ³	
Coefficiente de absorción	5,968 mm ⁻¹	
F(000)	2640	
Dimensiones del cristal	0,1 x 0,1 x 0,2 mm ³	
Intervalo de θ	1,87 a 29,01°	
Índice del intervalo	0 ≤ h ≤ 18	
	0 ≤ K ≤ 25	
	0 ≤ l ≤ 27	
Reflexiones recogidas/únicas	46064 / 6605 [R(int)=0,0494]	
Método de refinamiento	Matriz completa de mínimos cuadrados	
Datos / restringidos / parámetros	6605 / 0 / 325	
GOF	1,231	
Índice R final [I > 2σ(I)]	R1 = 0,0352, wR2 = 0,0742	
Índice R (todos los datos)	R1 = 0,0716, wR2 = 0,0973	

