

Electronic Supporting Information

Ruthenium(IV) catalysts for the selective estragole to *trans*-anethole isomerization in environmentally friendly media

Beatriz Lastra-Barreira, Javier Francos, Pascale Crochet,* and Victorio Cadierno*

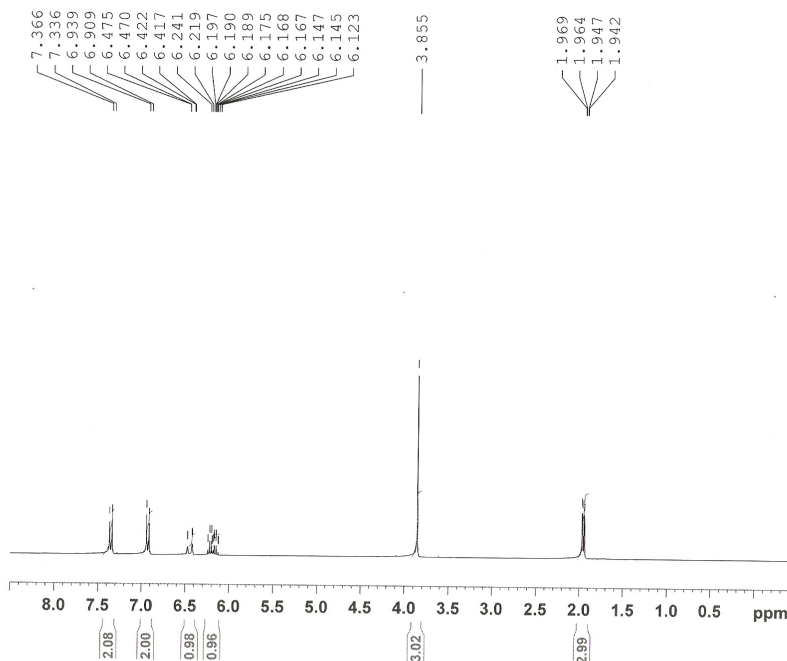
Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Instituto Universitario de Química Organometálica “Enrique Moles” (Unidad Asociada al CSIC), Universidad de Oviedo, Julián Clavería 8, E-33006 Oviedo, Spain

Fax: (34)985103446; Tel: (34)985102985; e-mail: crochetpascale@uniovi.es (P.C.)

vcm@uniovi.es (V.C.)

Copies of the ^1H and $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR and GC spectra of *trans*-anethole generated at 35 °C using $[\text{RuCl}_2(\eta^3\text{-C}_{10}\text{H}_{16})\{\text{P}(\text{OMe})_3\}]$ (5f) as catalyst and water as solvent (Scheme 4). Copy of the GC spectrum of the *cis/trans*-anethole mixture generated at 80 °C using $[\text{RuCl}_2(\eta^3\text{-C}_{10}\text{H}_{16})\{\text{P}(\text{OMe})_3\}]$ (5f) as catalyst and water as solvent (entry 11 in Table 2).

bea519 cdcl3 1H RMN DPX300



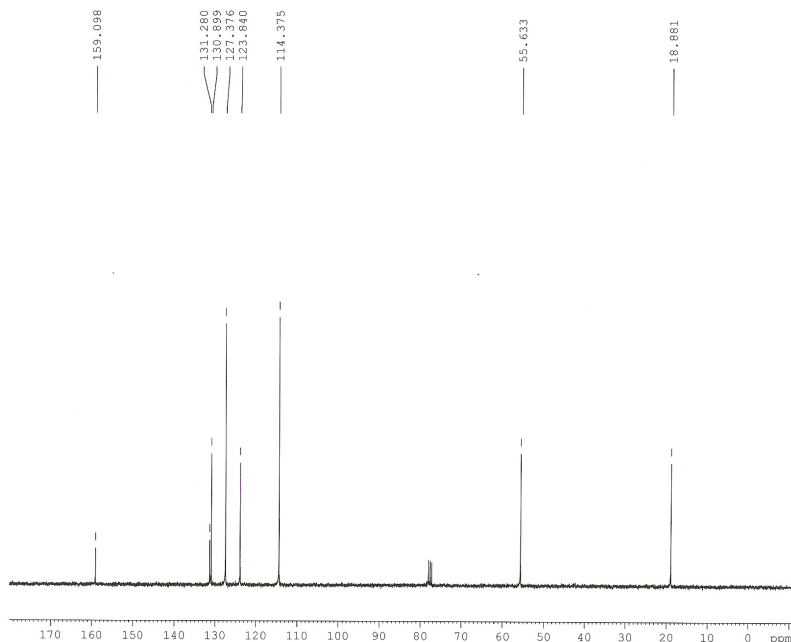
Current Data Parameters
NAME gij12712
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20100727
Time 17.21
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm QNP 1H/13
PULPROG zg30
TD 24576
SOLVENT CDCl3
NS 8
DS 0
SWH 7183.908 Hz
FIDRES 0.292314 Hz
AQ 1.7106092 sec
RG 28.5
DW 69.600 usec
DE 7.00 usec
TE 298.2 K
D1 0.5000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 6.30 usec
PL1 -6.00 dB
SFO1 300.1315007 MHz

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 300.1300000 MHz
WDW no
SSB 0
LB 0.00 Hz
GB 0
PC 1.00

bea519 cdcl3 C13 CPD DPX300



Current Data Parameters
NAME gij12712
EXPNO 2
PROCNO 1

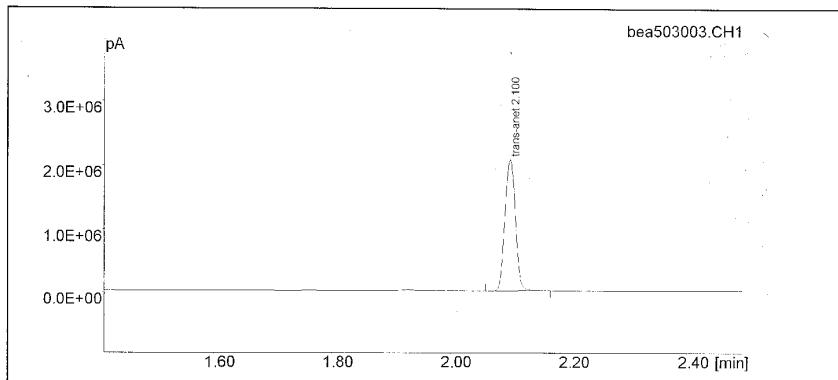
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20100727
Time 17.19
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm QNP 1H/13
PULPROG zgpg30
TD 32768
SOLVENT CDCl3
NS 48
DS 4
SWH 20491.803 Hz
FIDRES 0.625360 Hz
AQ 0.7996136 sec
RG 13004
DW 24.400 usec
DE 20.00 usec
TE 298.2 K
D1 1.00000000 sec
d11 0.03000000 sec
DELTA 0.89999998 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 7.00 usec
PL1 -4.00 dB
SFO1 75.4771525 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
FCPD2 80.00 usec
PL2 -6.00 dB
PL12 21.00 dB
PL13 120.00 dB
SFO2 300.1312005 MHz

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 75.4677190 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

HP3398A GC Chemstation



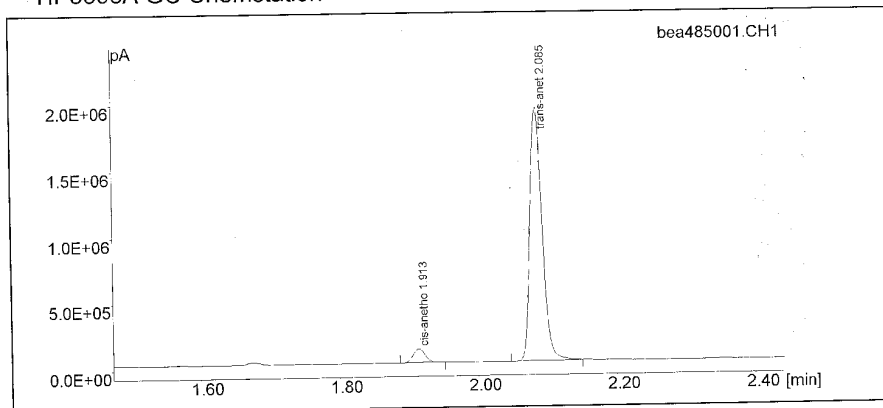
Archivo : C:\HP3398A\gimeno\beatriz\bea503003.CH1
Operador : BEATRIZ
Grupo : GIMENO
Nombre del sistema : SYSTEM_1
Información : 6h
Fecha de inyección : 19-Jul-2010 18:34:38
Fecha : 30-Sep-2010 12:30:34

Tiempo de adquisición : 2.49 [mins]
Volumen de inyección = 1.0000
Dilución(%) = 100.000
Multiplicador = 1.000
Tubo # = 1

Método de Control : ALCOHOL TRISUSTITUIDO LARGO
Método de análisis :
Modo de Cálculo : % Área
Número de integraciones : 1
Fecha de última integración : 19-Jul-2010 18:46:48

#	Nombre	Tr [min]	Área [pA*s]	%Área
1	trans-anethole	2,100	2564907	100,000

HP3398A GC Chemstation



Archivo : C:\HP3398A\gimeno\beatriz\bea485001.CH1
Operador : BEATRIZ
Grupo : GIMENO
Nombre del sistema : SYSTEM_1
Información : 30 min
Fecha de inyección : 9-Jul-2010 13:11:22
Fecha : 30-Sep-2010 12:38:32

Tiempo de adquisición : 2.44 [mins]
Volumen de inyección = 1.0000
Dilución(%) = 100.000
Multiplicador = 1.000
Tubo # = 1

Método de Control : ALCOHOL TRISUSTITUIDO LARGO
Método de análisis :
Modo de Cálculo : % Área
Número de integraciones : 1
Fecha de última integración : 9-Jul-2010 13:18:02

#	Nombre	Tr [min]	Área [pA*s]	%Área
1	cis-anethole	1,913	123027	4,929
2	trans-anethole	2,085	2372786	95,071