## On the reaction of 1,3-diphenylisobenzofuran and (2-iodoethynyl)(phenyl)iodonium triflate. A unique case of oxygen transfer from Diels-Alder adduct to the diene.

Pelayo Camps,\*<sup>[a]</sup> Tània Gómez,<sup>[a]</sup> David Lozano,<sup>[a]</sup> Teresa Calvet,<sup>[b]</sup> Mercè Font-Bardia<sup>[b][c]</sup>

<sup>[a]</sup>Laboratori de Química Farmacèutica (Unitat Associada al CSIC), Facultat de Farmàcia, and Institut de Biomedicina de la Universitat de Barcelona (IBUB), Universitat de Barcelona, Av. Joan XXIII s/n, E-08028, Barcelona, Spain;

<sup>[b]</sup>Cristalografia, Mineralogia i Dipòsits Minerals, Universitat de Barcelona, Martí Franquès s/n. E-08028 Barcelona, Spain;

<sup>[c]</sup>Unitat de Difracció de RX, Centre Científic i Tecnològic de la Universitat de Barcelona (CCiTUB), Universitat de Barcelona, Solé i Sabarís 1-3. E-08028 Barcelona, Spain

E.mail: camps@ub.edu

## **Supporting information**

## Content

NMR and IR spectra of triflate 3	
NMR and IR spectra of triflate 5	S8
NMR and IR spectra of diiodide 6	S14
NMR and IR spectra of diiodide 7	S18



NMR and IR spectra of triflate 3







<sup>1</sup>H/<sup>1</sup>H COSY (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>)



<sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C HETCOR (gHMBC sequence) (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>)



NMR and IR spectra of triflate 5













**S**11



<sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C HETCOR (gHMBC sequence) (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>)



IR (ATR)

## NMR and IR spectra of diiodide 6











NMR and IR spectra of diiodide 7



Γ









<sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C HETCOR (gHMBC sequence) (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>)

