

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

СИНТЕЗ, ХИМИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ В ОСНОВНОМ И ВОЗБУЖДЕННОМ СОСТОЯНИИ (ПОРФИРИНАТО)(ХЛОРО)ИНДИЯ(III) И ЕГО КОМПЛЕКСОВ С C₆₀ И ПИРИДИЛ-ЗАМЕЩЕННЫМ ФУЛЛЕРО[60]ПИРРОЛИДИНОМ

Е.Н. Овченкова, Н.Г. Бичан, Т.Н. Ломова

Таблица S1. Времена образования и жизни возбужденного состояния (τ_1 , τ_2) и константы скорости разделения (k_{CS}) и рекомбинации (k_{CR}) зарядов в диадах в толуоле

Комплекс	λ , нм	τ_1 , пс	k_{CS} , с ⁻¹	τ_2 , пс	k_{CR} , с ⁻¹	Источн ик
CoTPP	568	0.08		0.30 5.07 74.72		[1]
(PyC ₆₀) ₂ CoTPP	574	0.11	9.10×10^{12}	0.23 3.23 16.38	4.35×10^{12} 3.10×10^{11} 6.11×10^{10}	
CoT(CF ₃ P)P ^a	576	0.17		0.33 7.17		[1]
(PyC ₆₀) ₂ CoT(CF ₃ P)P	582	0.11	9.10×10^{12}	0.21 2.88 16.97	4.76×10^{12} 3.47×10^{11} 5.89×10^{10}	
CoTTP ^б	443	0.11		5.95		[2]
(C ₆₀) ₂ CoTTP	486	0.10	1.0×10^{13}	14.5	6.9×10^{10}	
(PyC ₆₀) ₂ CoTTP	456	0.12	8.3×10^{12}	7.9	1.4×10^{11}	
CoDTBCP ^в	430	0.99		3.18 16.76		[3]
(PyC ₆₀) ₂ CoDTBCP	432	0.82	1.29×10^{12}	2.13 19.44	4.7×10^{11} 5.15×10^{10}	
[(Py ₂ C ₇₀)CoDTBCP	426	1.29	7.75×10^{11}	4.49 20.66	2.2×10^{11} 4.84×10^{10}	
CoPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈ ^г	547	0.003		1.05		[4, 5]
(PyC ₆₀)CoPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈	548	0.005	2.0×10^{14}	1.05 9.92	9.52×10^{11} 1.01×10^{11}	
(ImC ₆₀)CoPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈	548	0.007	1.43×10^{14}	1.55 20.89	6.45×10^{11} 4.78×10^{10}	
	840	0.07	1.4×10^{13}	25	4.0×10^{10}	
(AcO)MnPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈]	550	0.03		0.65 15.89 111.24		[4, 5]
[(Py ₂ C ₇₀)MnPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈] ⁺ AcO ⁻	553	0.085	1.18×10^{13}	0.39 8.63 82.63	2.56×10^{12} 1.16×10^{11} 1.24×10^{10}	
[(PyC ₆₀)MnPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈] ⁺ AcO ⁻	561	0.060	1.67×10^{13}	0.30 16.84 144.41	3.33×10^{12} 5.94×10^{10} 6.92×10^9	
[(ImC ₆₀)MnPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈] ⁺ AcO ⁻	557	0.074	1.35×10^{13}	0.38 16.74 128.71	2.63×10^{12} 5.97×10^{10} 7.77×10^9	

^aT(CF₃P)P - 5,10,15,20-тетра(4-трифторметилфенил)порфин дианион,

^бTTP - 5,10,15,20-тетра(4-метилфенил)порфин дианион,

^вDTBCP - 5,15-бис[3,5-бис(трет-бутил)фенил]-10,20-бис[4,6-(4-(3,6-ди-трет-бутил-9Н-карбазол-9-ил)фенил)пиримидин-5-ил]порфин дианион,

[†]Py₂C₇₀ - 2,5-ди-(пиридин-2-ил)-3,4-фуллеро[70]пирролидин,
[‡]Pc(3,5-di-^tBuPhO)₈ - (октакис-3,5-ди-феноксифталоцианин дианион.

Таблица S2. Константы устойчивости донорно-акцепторных диад в толуоле.

Комплекс	K, л моль ⁻¹ (диады), л ² моль ⁻² (триады)	Источник
(C ₆₀)(Cl)InTPP(p-OCH ₃) ₄	5.90×10 ³	
[(PyC ₆₀)InTPP(p-OCH ₃) ₄] ⁺ Cl ⁻	(2.1 ± 0.24)×10 ⁴	
(PyC ₆₀) ₂ CoTPP	(4.69±1.23)×10 ⁹	[6]
(C ₆₀) ₂ CoTTP	(3.47±0.69)×10 ⁹	[2]
(PyC ₆₀) ₂ CoTTP	(1.47±0.28)×10 ¹⁰	
(ImC ₆₀) ₂ CoTIPP ^a	(2.05±0.35)×10 ⁹	[7]
(PyC ₆₀) ₂ CoTIPP	(3.21±0.95)×10 ⁹	
(PyC ₆₀) ₂ CoT(CF ₃ P)P	4.36×10 ¹⁰	[1]
(PyC ₆₀) ₂ CoDTBCP	(9.21±2.89)×10 ⁹	[8]
(Py ₂ C ₇₀)CoDTBCP	(8.25±1.59)×10 ⁴	
(Py ₂ C ₇₀) ₂ CoP(C ₈ H ₁₇ OPh) ₄ ⁶	(7.60±1.85)×10 ¹⁰	[9]
(PyC ₆₀) ₂ CoP(C ₈ H ₁₇ OPh) ₄	(4.47±1.01)×10 ¹⁰	
(PyC ₆₀)CoPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈	(5.62±1.22)×10 ⁵	[10]
(ImC ₆₀)CoPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈	(6.60±1.13)×10 ⁵	
(Py ₂ C ₇₀) ₂ CoPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈	(8.71±1.76)×10 ⁴	
[(ImC ₆₀)MnPc(3,5-di- ^t BuPhO) ₈] ⁺ AcO ⁻	(3.83±0.79)×10 ⁴	[4]
[(PyC ₆₀)MnPc(3-CF ₃ PhO) ₈] ⁺ AcO ^{-B}	(3.8±0.5)×10 ⁴	
[(PyC ₆₀)MnPc(3-CF ₃ Ph) ₈] ⁺ AcO ^{-Γ}	(2.3±0.4)×10 ³	

^aTIPP5,10,15,20-(тетра-4-изопропилфенил)порфин дианион,

⁶P(C₈H₁₇OPh)₄ – 5,10,15,20-тетра(4-октилоксифенил)порфин дианион,

^BPc(3-CF₃PhO)₈ - октакис(3-трифторметилфеноксифталоцианин дианион,

^ΓPc(3-CF₃Ph)₈ - октакис(3-трифторметилфенил)фталоцианин дианион.

- [1] Ovchenkova E.N., Motorina E.V., Bichan N.G., et al. // Journal of Organometallic Chemistry. 2022. V.977. №. P. 122458. <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2022.122458>.
- [2] Bichan N.G., Ovchenkova E.N., Mozgova V.A., et al., in "Molecules". V. 27, 2022.
- [3] Ovchenkova E.N., Bichan N.G., Gruzdev M.S., et al. // New Journal of Chemistry. 2021. №. 10.1039/D1NJ00980J
- [4] Ovchenkova E.N., Bichan N.G., Lomova T.N. // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2022. V.96. №. 4. P. 717. 10.1134/S0036024422040240
- [5] Ovchenkova E.N., Bichan N.G., Tsaturyan A.A., et al. // Journal of Physical Chemistry C. 2020. V.124. №. 7. P. 4010. 10.1021/acs.jpcc.9b11661
- [6] Bichan N.G., Ovchenkova E.N., Mozgova V.A., et al. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2019. V.64. №. 5. P. 605. 10.1134/s0036023619050024
- [7] Bichan N.G., Ovchenkova E.N., Mozgova V.A., et al. // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2020. V.94. №. 6. P. 1159. 10.1134/S0036024420060060
- [8] Ovchenkova E.N., Bichan N.G., Gruzdev M.S., et al. // New Journal of Chemistry. 2021. №. 10.1039/D1NJ00980J
- [9] Bichan N.G., Ovchenkova E.N., Mozgova V.A., et al. // Polyhedron. 2021. V.203. №. P. 115223. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115223>
- [10] Bichan N.G., Ovchenkova E.N., Mozgova V.A., et al. // Polyhedron. 2022. V.222. №. P. 115908. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.115908>

Рис. S1. Дифференциальные спектры поглощения диад $(C_{60})(Cl)InTPP(p-OCH_3)_4$ (а) и $[(RuC_{60})InTPP(p-OCH_3)_4]^+Cl^-$ (б) в толуоле при $\lambda_{exc} = 435$ нм.

