

Supporting Information

Molecular Structure, Optical and Magnetic Properties of Iron Tetra(2,3-quinoxalino)porphyrazine [(N-MeIm)₂Fe^I{T(2,3-Q)Pz} •³⁻}] •²⁻ Radical Dianions

Maxim A. Faraonov,^{a@1} Nikita R. Romanenko,^{a,b} Alexey V. Kuzmin,^c Dmitri V. Konarev,^{a@2} Salavat S. Khasanov,^c and Rimma N. Lyubovskaya^a

^a*Institute of Problems of Chemical Physics RAS, 142432 Chernogolovka, Russia*

^b*Moscow State University, 119991 Moscow, Russia*

^c*Institute of Solid State Physics RAS, 142432 Chernogolovka, Russia*

^{@1}*Corresponding author E-mail: maksimfaraonov@yandex.ru*

^{@2}*Corresponding author E-mail: konarev3@yandex.ru*

Молекулярная структура, оптические и магнитные свойства дианион-радикальной соли тетра(2,3-хиноксалино)порфиразина железа [(N-MeIm)₂Fe^I{T(2,3-Q)Pz} •³⁻}] •²⁻

М. А. Фараонов,^{a@1} Н. Р. Романенко,^{a,b} А. В. Кузьмин,^c Д. В. Конарев,^{a@2} С. С. Хасанов,^c Р. Н. Любовская^a

^a*Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черногоровка, Россия*

^b*Московский государственный университет, 119991 Москва, Россия*

^c*Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черногоровка, Россия*

^{@1}*E-mail: maksimfaraonov@yandex.ru*

^{@2}*E-mail: konarev3@yandex.ru*

Table S1. IR spectra of pristine FeT(2,3-Q)Pz and salt **1**.

Components	Cryptand(Na) ⁺	<i>N</i> -MeIm	Fe ^{II} T(2,3-Q)Pz	{cryptand[2.2.2](Na ⁺) ₂ ·[(<i>N</i> -MeIm) ₂ Fe ^I (T(2,3-Q)Pz) ³⁺] ²⁺ ·3C ₆ H ₄ Cl ₂ ·2H ₂ O (1)
FeT(2,3-Q)Pz			575w	576w*
			606m	610m*
			611m	610m*
			709s	707m
			763s	760m*
			881w	875w
			1050m	1048s
			1080w	-
			1111m	1101s*
			1132s	1134s
			1141s	1134s
			1203m	1200m
			1229s	1227m*
			1322w	-
			1357w	1355m*
			1394w	-
			1446w	1453m*
			1523m	1521m*
			1561w	-
			1631w	1631w
		2608w	-	
		2636w	-	
		2920w	-	
		2972m	2970m	
		3063w	3060w	
Cryptand(Na) ⁺	476w			-
	528w			-
	581w			576w*
	735m			-
	922m			-
	948w			940w
	982m			-
	1038w			-
	1071m			-
	1100s			1101s*
	1127s			-
	1213w			-
	1295m			1298m
	1329m			-
	1360s			1355m*
	1446m			1453m*
	1462m			-
1490w			-	
2790w			-	
2877w			2881m	
2943w			-	
MIm		620m		610m*
		666w		-
		741m		-
		820m		812w
		905m		-

	1026w	-
	1077m	-
	1109m	1101s*
	1230s	1227m*
	1285m	-
	1358w	1355m*
	1420m	-
	1518s	1521m*
	2919w	-
	2954w	-
	3110w	-
C ₆ H ₄ Cl ₂		
	C ₆ H ₄ Cl ₂	-
	663w	760m*
	751s	-
	1035m	-
	1120s	1453m*
	1462m	

* - bands are coincided

w – weak, m – middle, s – strong intensity

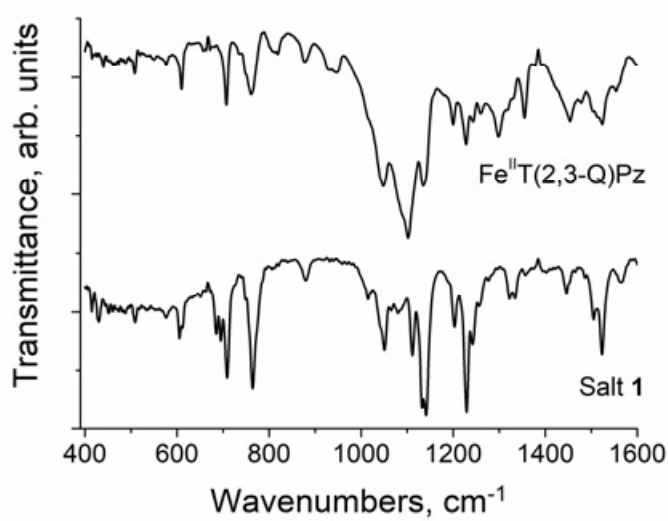


Figure S1. IR spectra of pristine FeT(2,3-Q)Pz and salt **1** in KBr pellets prepared in anaerobic conditions.

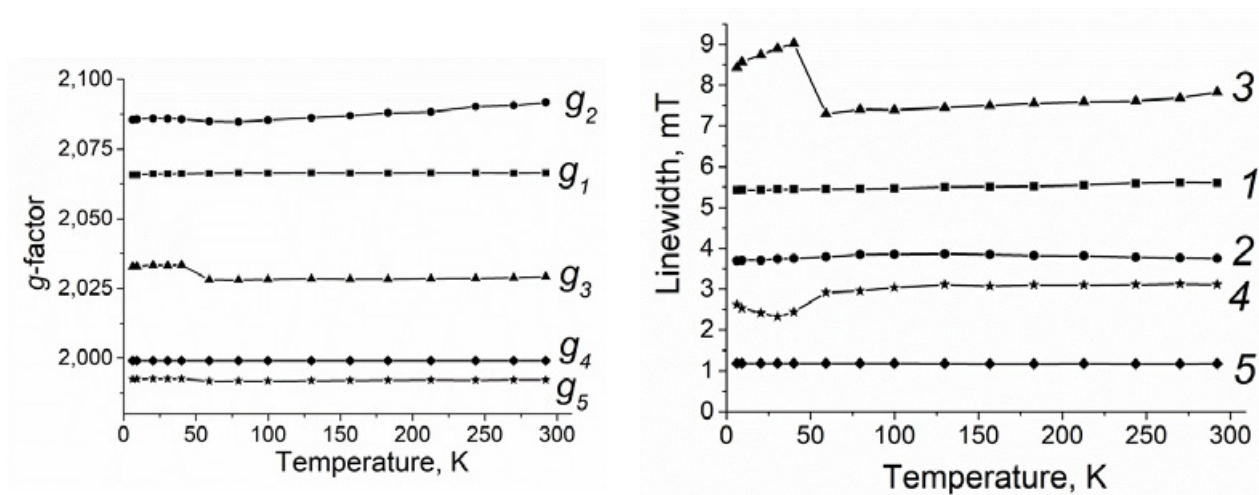


Figure S2. Temperature dependence of *g*-factor and linewidth of lines manifested in the EPR spectrum of salt 1.