

Supplementary materials for article

Влияние селективного галогенирования тетрапиррольного макроцикла на комплексообразующую способность Zn-тетраарилпорфиринов по отношению к малым органическим молекулам

О. А. Дмитриева,^a М. О. Койфман,^b У. М. Дербишина,^a Н. В. Чижова,^a Н. Ж. Мамардашвили^{a@}

^a*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, 153045 Иваново, Россия*

^b*Ивановский государственный химико-технологический университет, 153000 Иваново, Россия*

[@]*E-mail: ngm@isc-ras.ru*

The Effect of Selective Halogenation of Tetrapyrrolic Macrocycle on Binding Ability of Zn-Tetraarylporphyrins Towards Small Organic Molecules

Olga A. Dmitrieva,^a Mikhail O. Koifman,^b Ulyana M. Derbyshina,^a Natalya V. Chizhova,^a and Nugzar Z. Mamardashvili^{a@}

^a*G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences, 153045 Ivanovo, Russian Federation*

^b*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, 153000 Ivanovo, Russian Federation*

[@]*Corresponding author E-mail: ngm@isc-ras.ru*

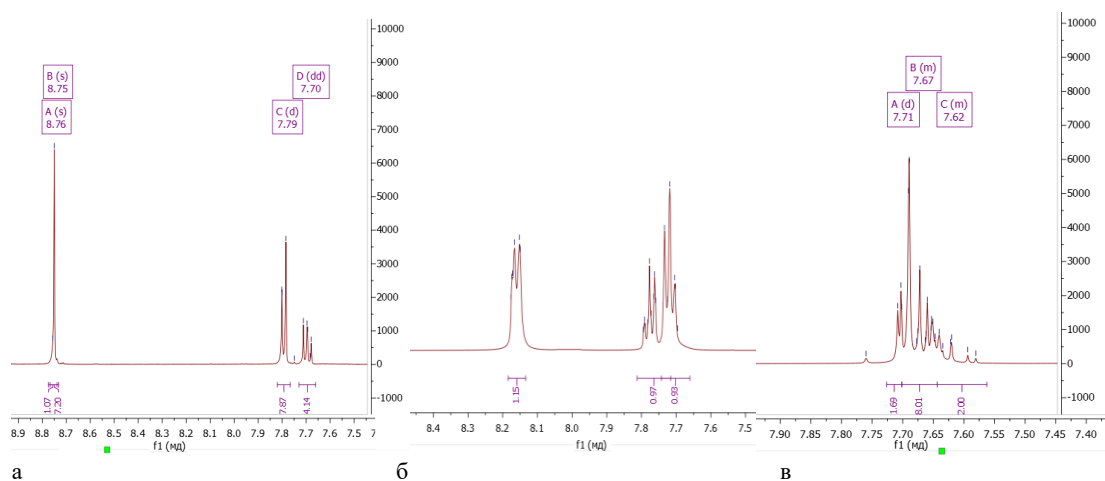


Рисунок С1. ЯМР ¹H-спектры соединений IV (а), VII (б) и VIII (в) (CDCl₃, 25 °C).

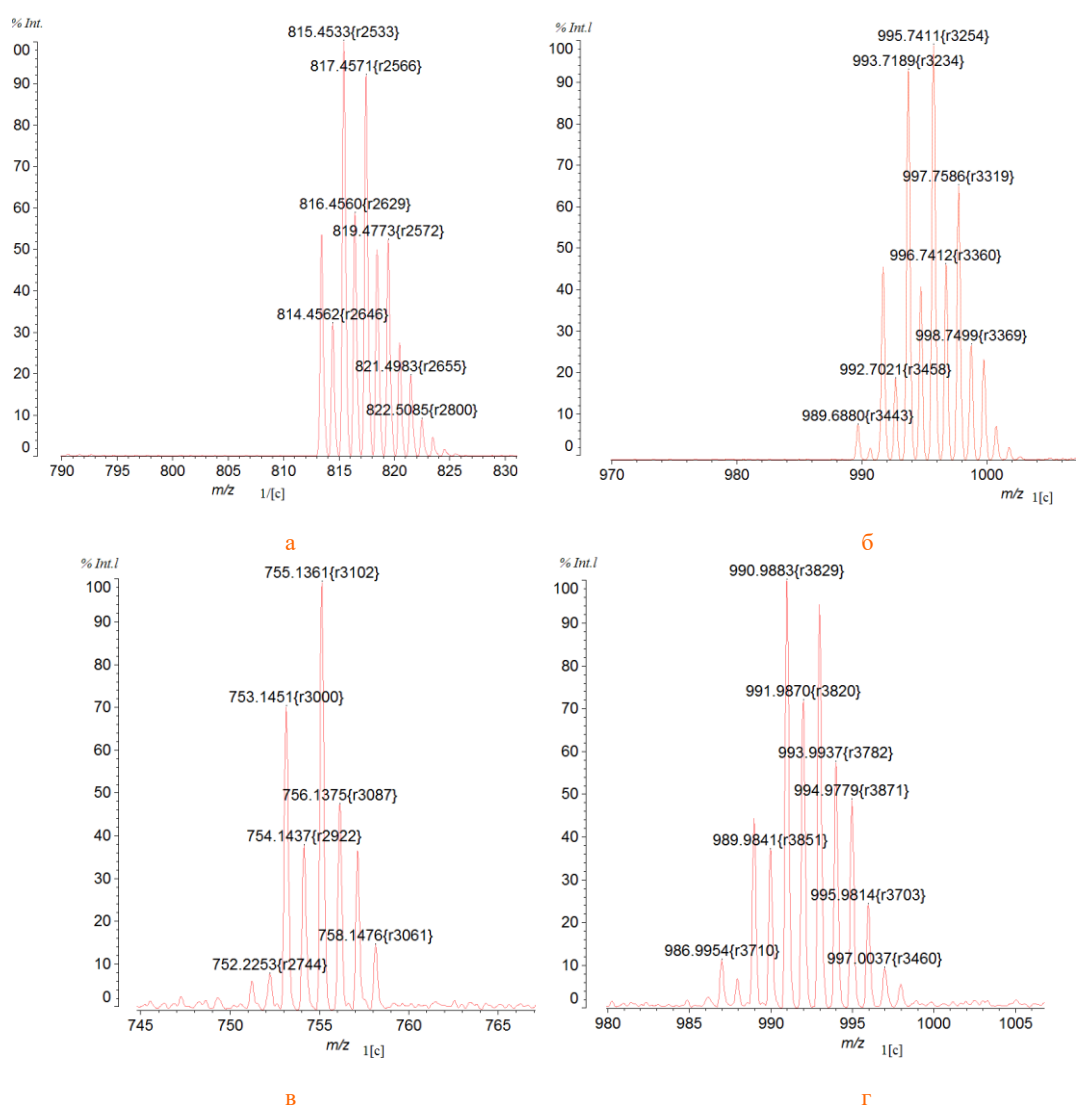


Рисунок С2. Характеристики масс-спектров соединений II (а), III (б), V (в) и VI (г).

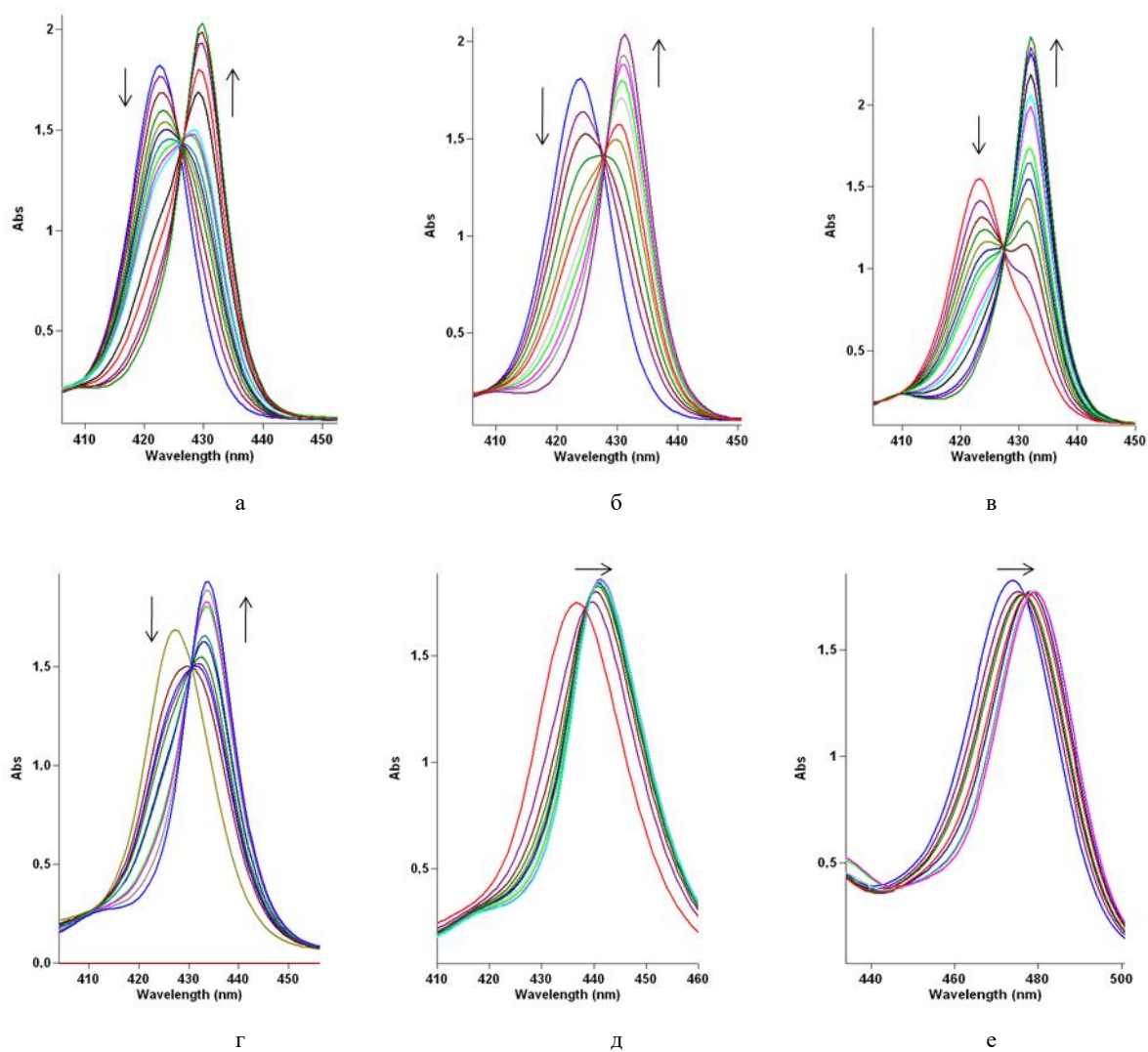


Рисунок S3. Изменения в ЭСП при спектрофотометрическом титровании **I** (а), **II** (б), **IV** (в), **V** (г), **VI** (д), **VII** (е) имидазолом (L1) в области полосы Core (дихлорметан, 25 °C).

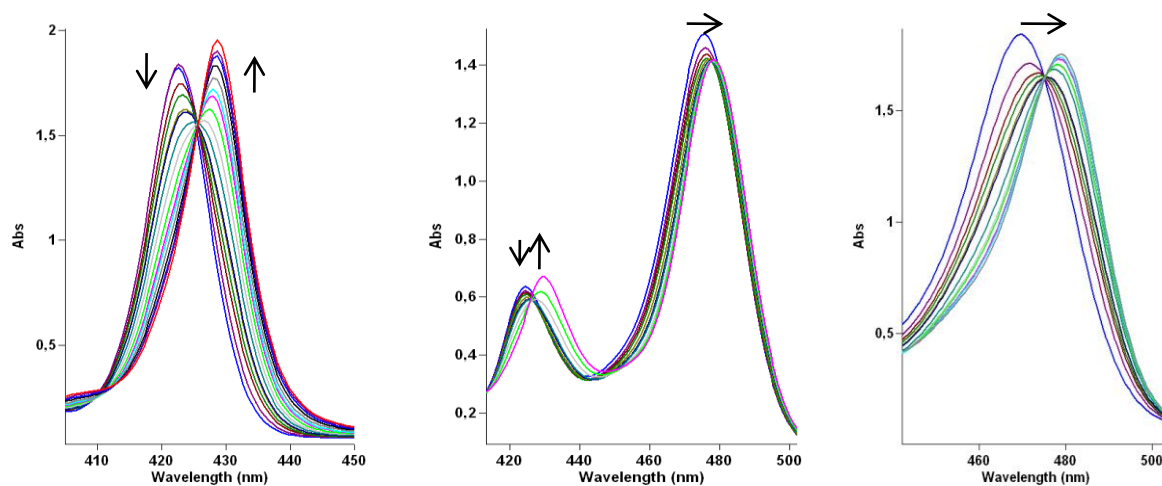
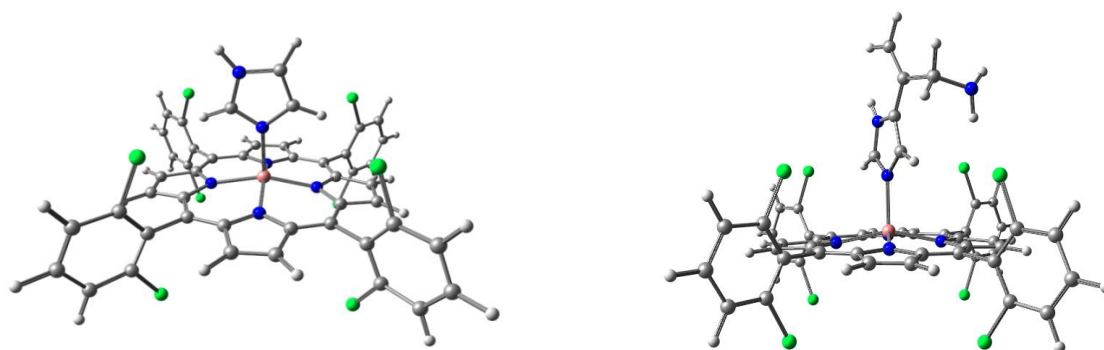


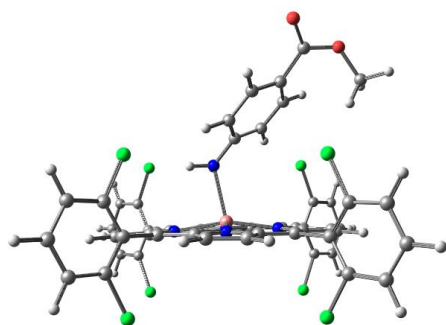
Рисунок S4. Изменения в ЭСП при спектрофотометрическом титровании **I** (а), **VII** (б) и **VIII** (в) L3 в области полосы Core (дихлорметан, 25 °C).

Таблица С1. Оптимизированные структуры аксиальных комплексов с различными лигандами на примере соединения IV и энергии связи Zn-N(L) в этих комплексах.

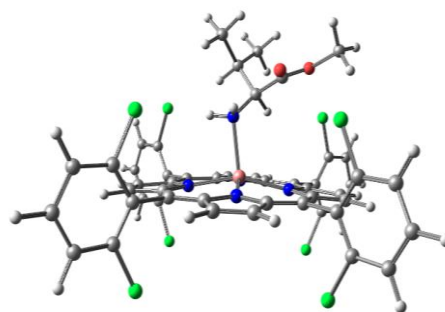


L1 (-17.85 ккал/моль)

L2 (-17.17 ккал/моль)

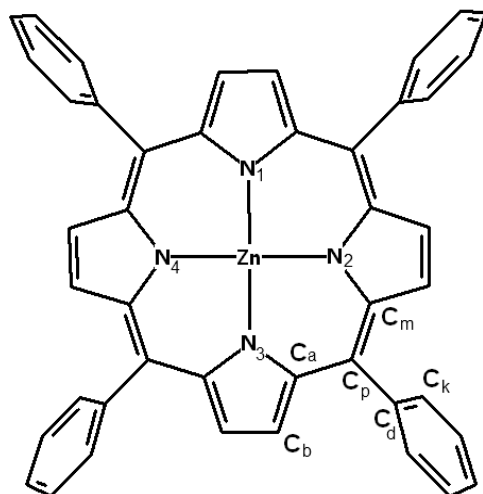


L3 (-9.64 ккал/моль)



L4 (-11.50 ккал/моль)

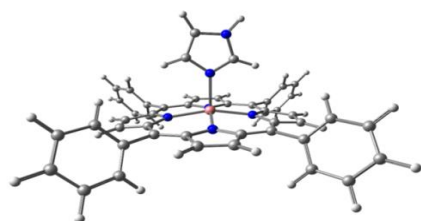
Таблица С2. Средние длины связей, углы и геометрические параметры комплексов цинка с имидазолом (L1), оптимизированных в газовой фазе методом DFT с набором B3LYP/6-31G.



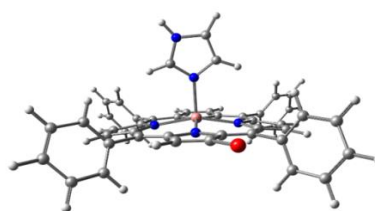
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Zn-L ₁	2.14	2.14	2.13	2.12	2.13	2.12	2.11	2.10
Zn-C _a	3.12	3.12	3.11	3.12	3.12	3.14	3.06	3.08
Zn-N	2.10	2.10	2.10	2.10	2.10	2.15	2.09	2.09
Zn-N-C _a	126	126	125	126	126	124	122	123
N-C _a	1.39	1.39	1.39	1.38	1.39	1.39	1.39	1.38

N-C _b	2.32	2.32	2.32	2.32	2.32	2.30	2.29	2.30
N-C _a -C _b	109	109	109	110	109	108	108	108
Zn-N-C _a -C _b	163	163	163	168	163	154	142	149
C _a -C _b	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45
Zn-C _m	3.13	3.14	3.12	3.12	3.13	3.09	3.12	3.12
C _m -C _p	1.41	1.41	1.41	1.41	1.41	1.41	1.41	1.41
Zn-C _m -C _p	93	93	93	93	94	95	93	93
N ₁ -Zn-N ₂	88	88	88	88	88	88	88	88
C _m -C _p -C _d -C _k	63	64	66	89	65	71	66	79

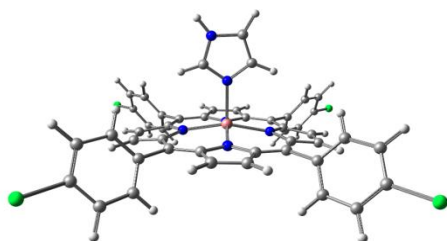
Таблица С3. Оптимизированные структуры комплексов I-VIII с L1 и энергии связи Zn-N(L) в них.



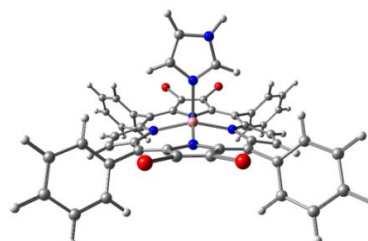
I (-14.90 ккал/моль)



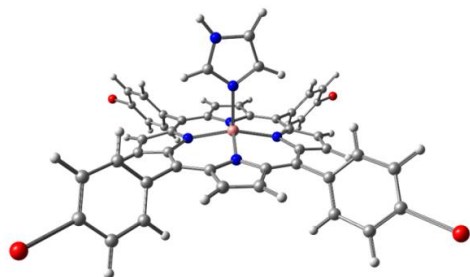
V (-15.46 ккал/моль)



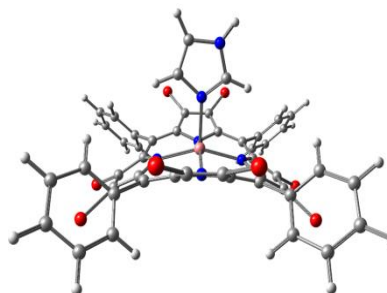
II (-15.93 ккал/моль)



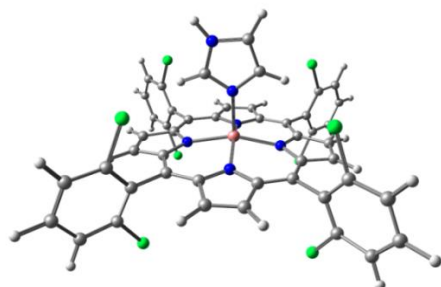
VI (-15.46 ккал/моль)



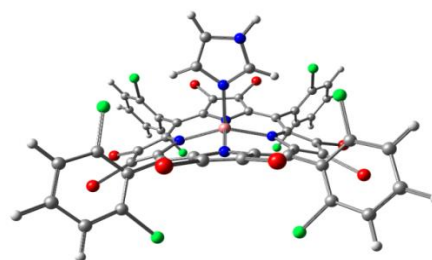
III (-16.21 ккал/моль)



VII (-19.95 ккал/моль)



IV (-17.85 ккал/моль)



VIII (-23.03 ккал/моль)

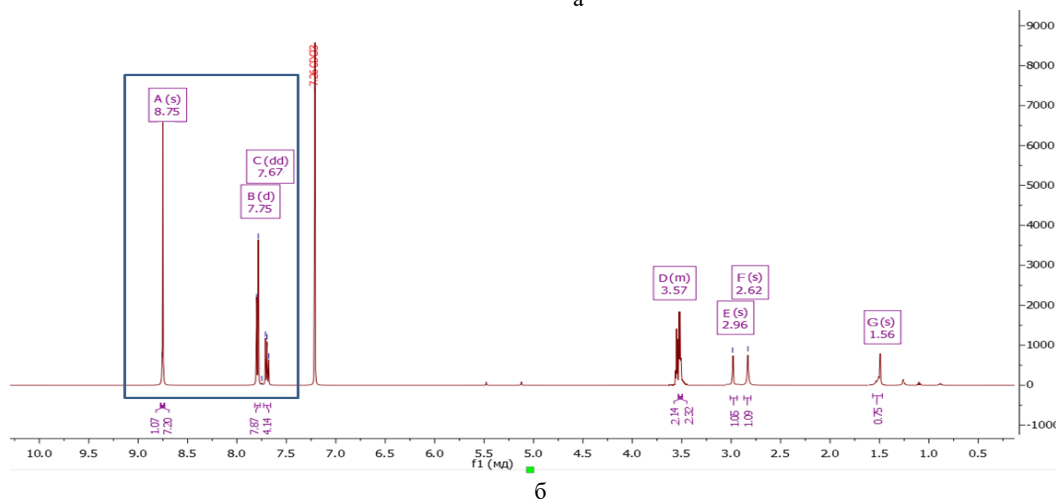
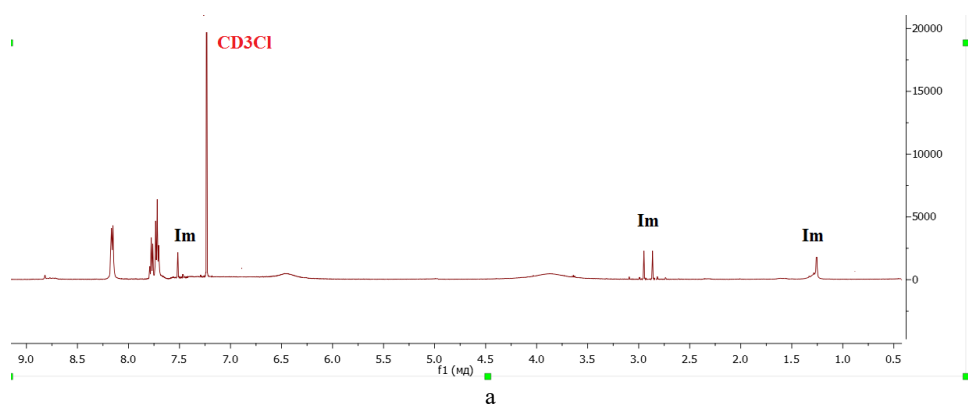


Рисунок С5. Спектры ЯМР ^1H комплексов VII-L1 (а), IV-L2 (б) (CDCl_3 , 25 $^\circ\text{C}$).