Electronic Supporting Information

The Development of the New Approach Toward Lanthanide-Based OLED Fabrication: New Host Materials for Tb-Based Emitters

*Andrey N. Aslandukov[1], Valentina V. Utochnikova[1,2] *, Dmitriy O. Goriachiy[3], Andrey A. Vashchenko[3], Dmitry M. Tsymbarenko[1], Michael Hoffmann[4], Marek Pietraszkiewicz[5], Natalia P. Kuzmina[1]*

[1]M.V. Lomonosov Moscow State University, 1/3 Leninskye Gory, Moscow 119991, Russia

[2]EVOLED Ltd., 1A-24 Puškina iela, Riga LV-1050, Latvia

[3]P.N. Lebedev Physical Institute, Leninsky prosp. 53 Moscow 119992, Russia

[4]Fraunhofer Institute for Organic Electronics, Electron Beam and Plasma Technology FEP, Maria-Reiche-Straße 2, 01109 Dresden, Germany

[5]Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52, 01-224, Warsaw, Poland

*E-mail address: valentina.utochnikova@gmail.com, phone: +7 495 9393836

^{1}H NMR data

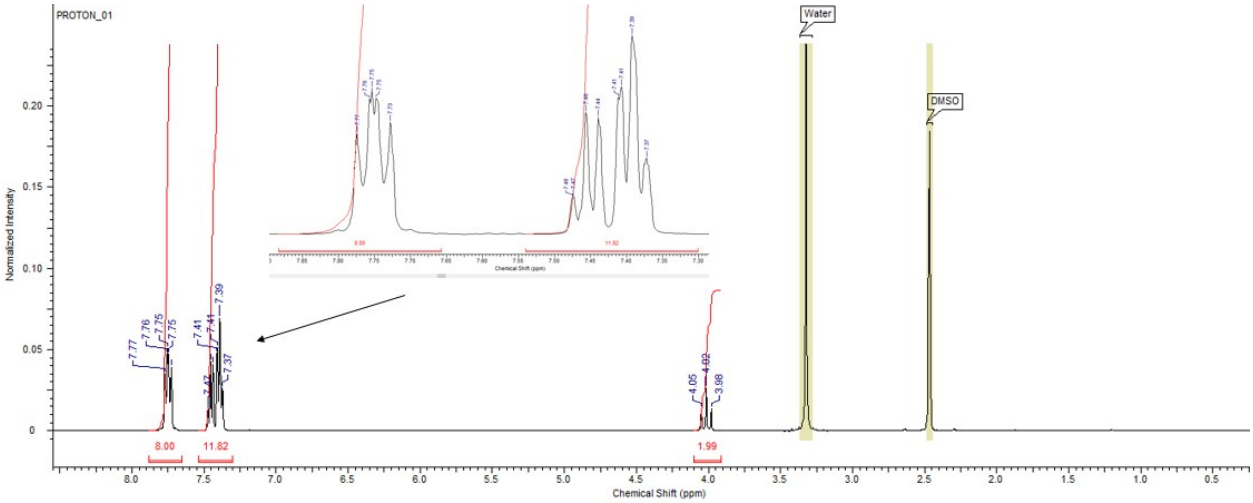


Figure S1. ^{1}H NMR spectra of PO1 in DMSO-d^6

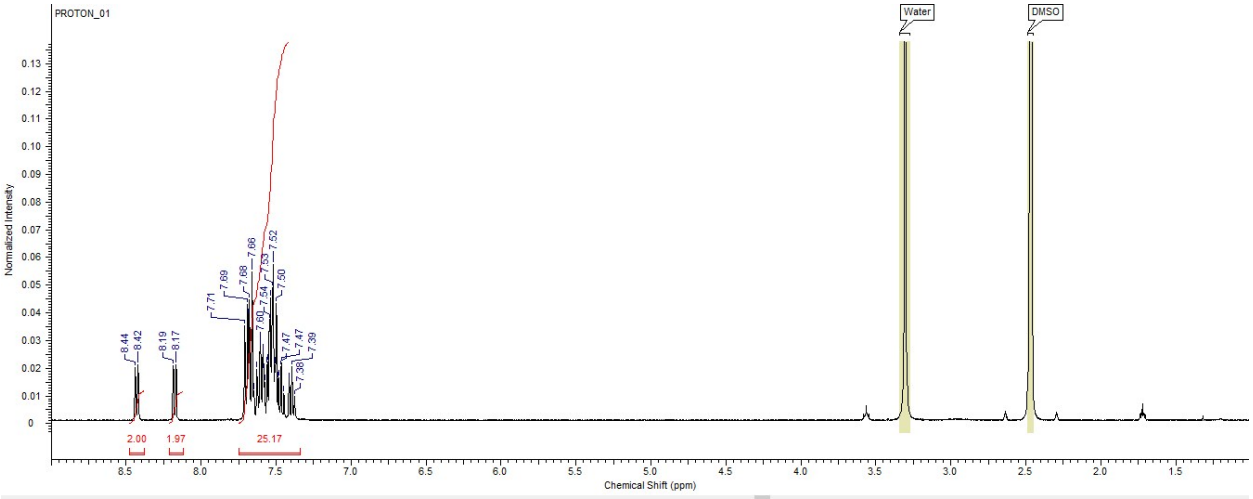


Figure S2. ^{1}H NMR spectra of PO2 in DMSO-d^6

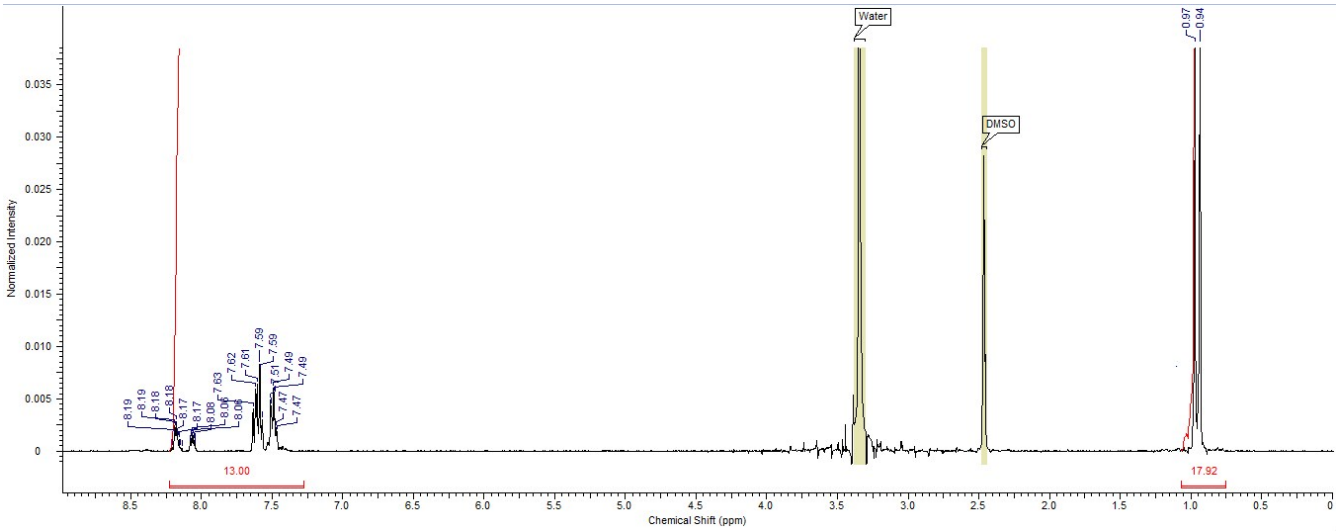


Figure S3. ^{1}H NMR spectra of PO3 in DMSO-d^6

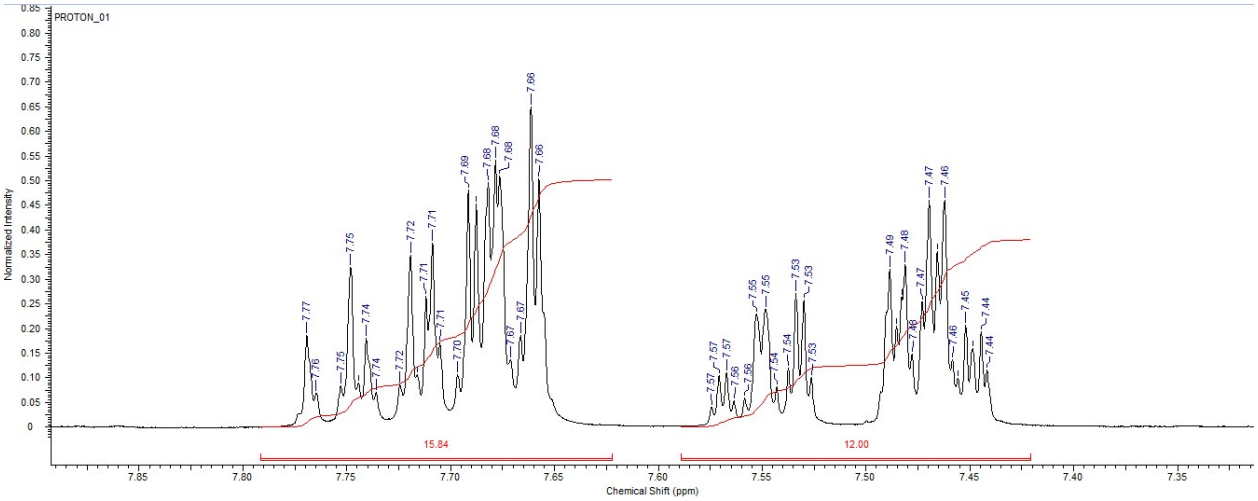


Figure S4. ^{1}H NMR spectra of PO4 in $CDCl_3$

MS data

The Na^+ and K^+ ions in the MALDI spectra arise from a glass substrate under laser ionization.

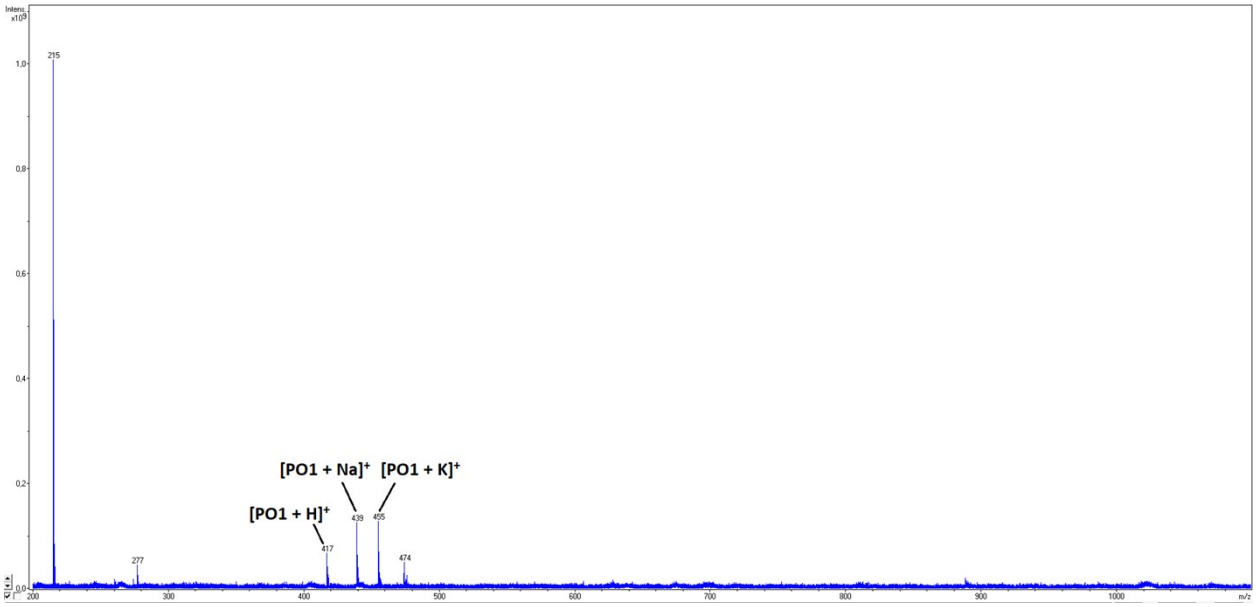


Figure S5. MALDI mass-spectrum of PO1

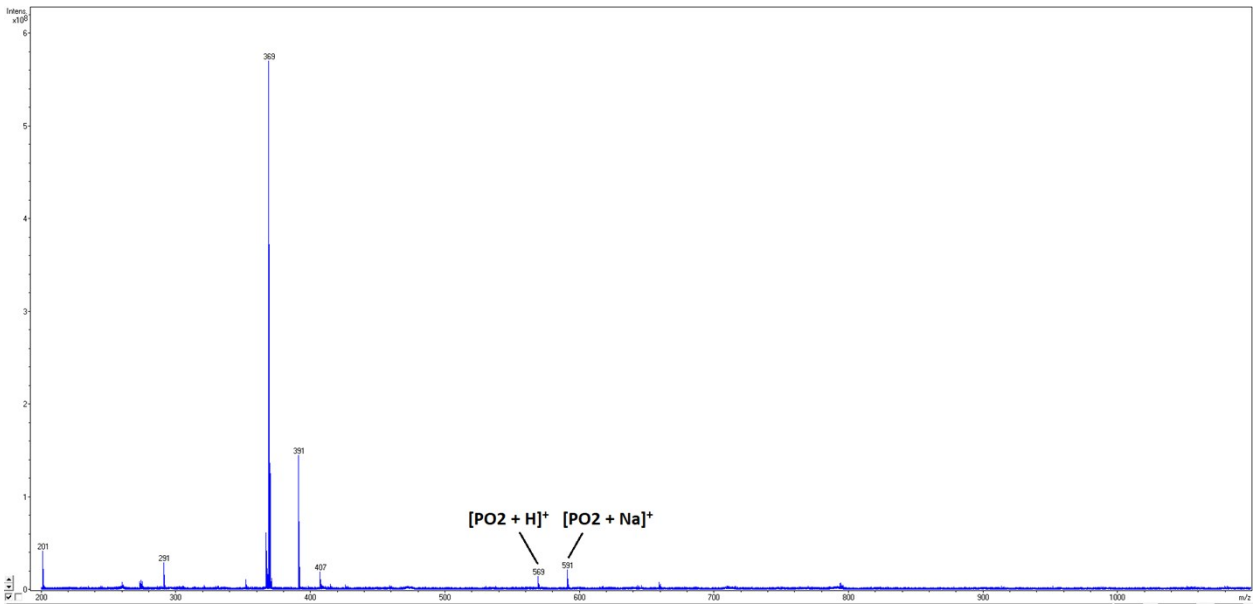


Figure S6. MALDI mass-spectrum of PO2

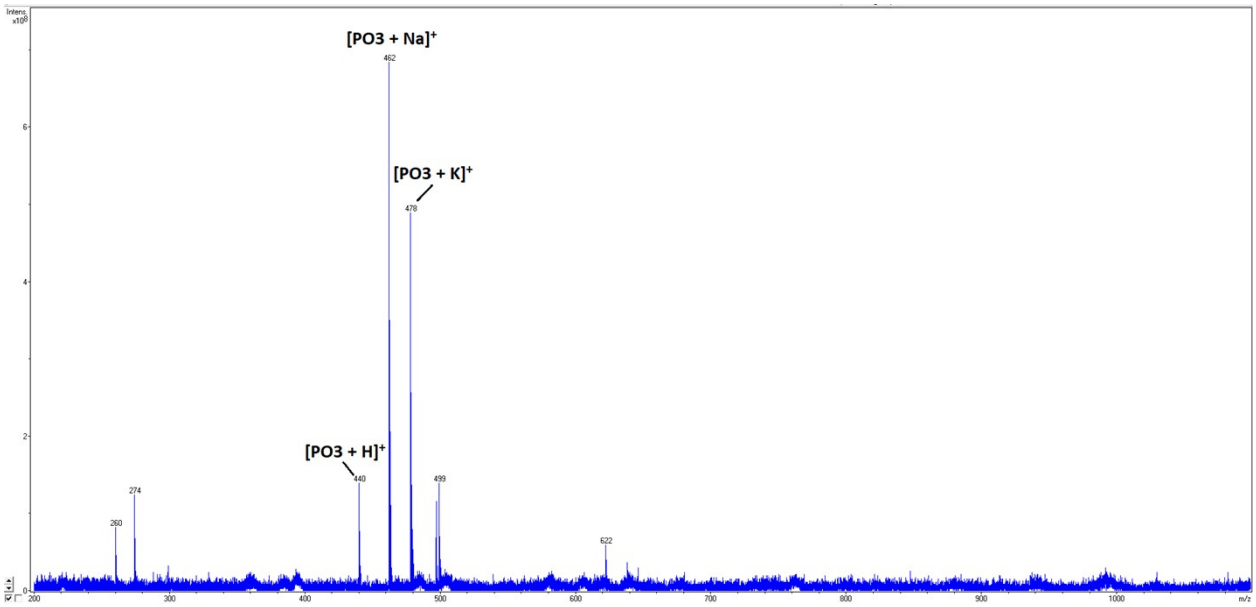


Figure S7. MALDI mass-spectrum of PO3

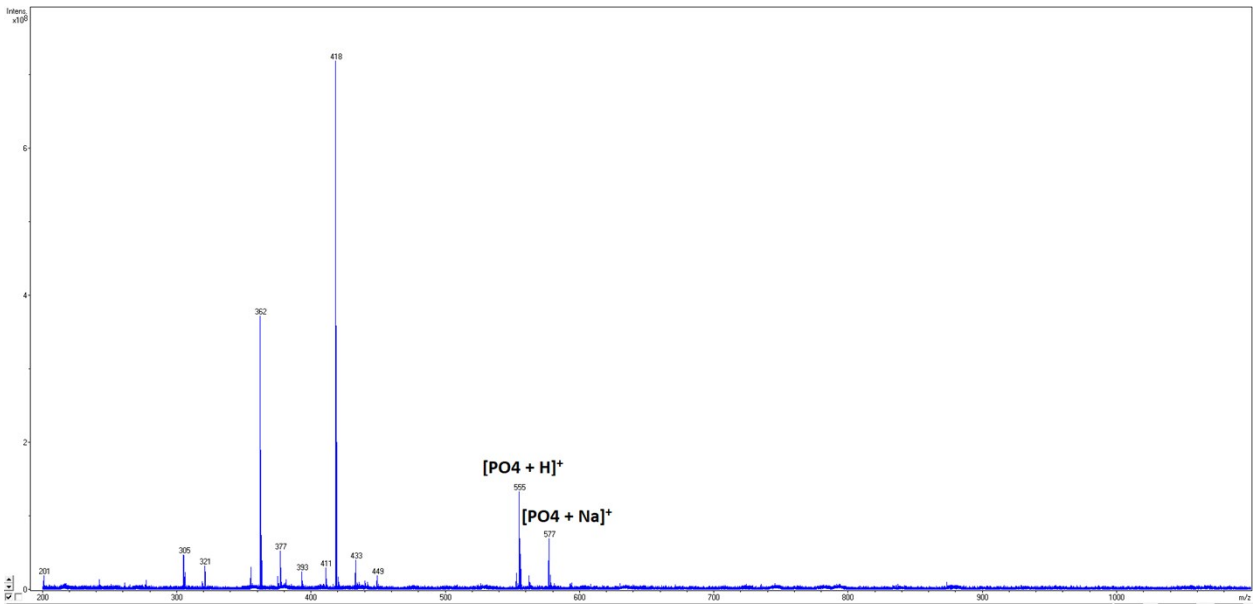


Figure S8. MALDI mass-spectrum of PO4

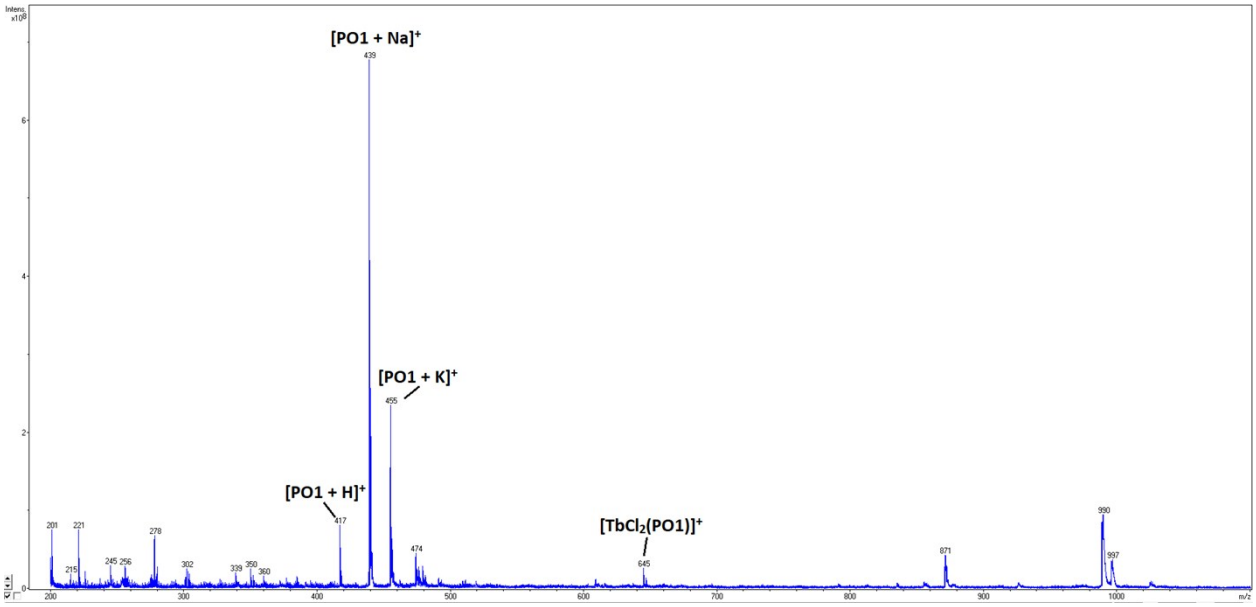


Figure S9. MALDI mass-spectrum of $TbCl_3(PO1)\cdot H_2O$

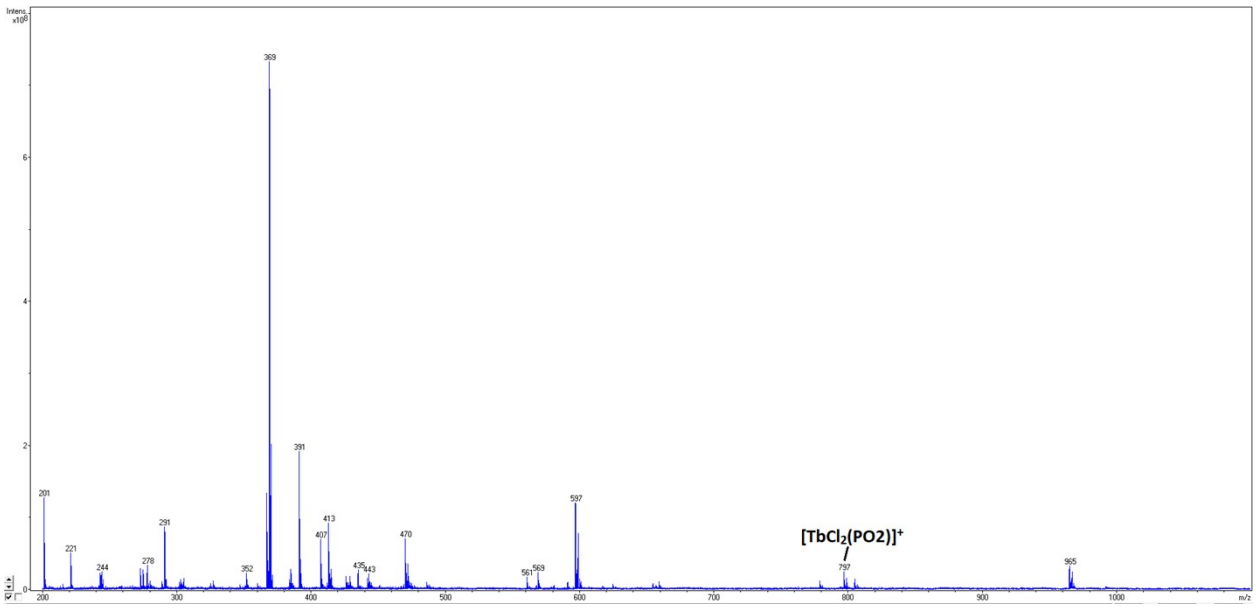


Figure S10. MALDI mass-spectrum of $TbCl_3(PO2)\cdot H_2O$

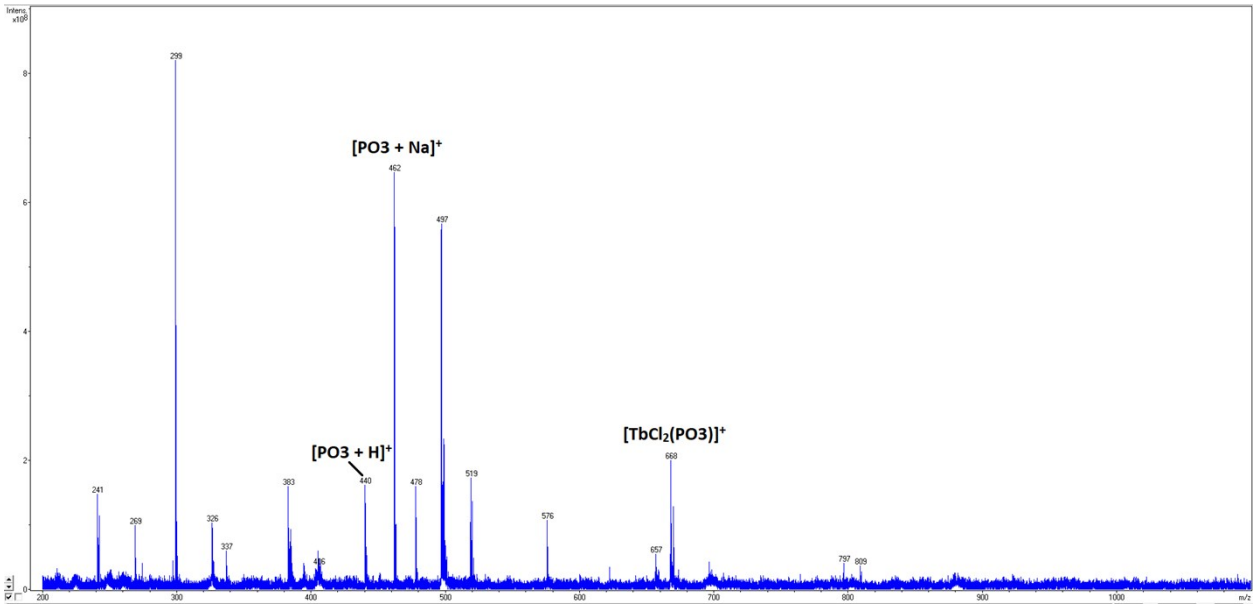


Figure S11. MALDI mass-spectrum of $TbCl_3(PO3)\cdot H_2O$

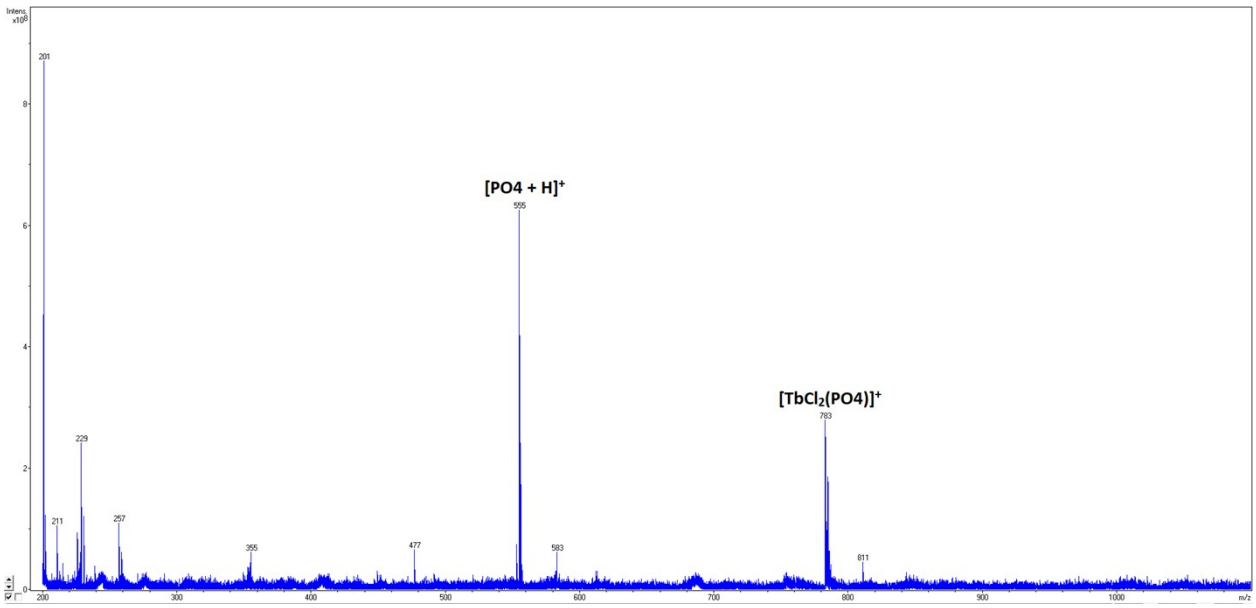


Figure S12. MALDI mass-spectrum of $TbCl_3(PO4)\cdot H_2O$

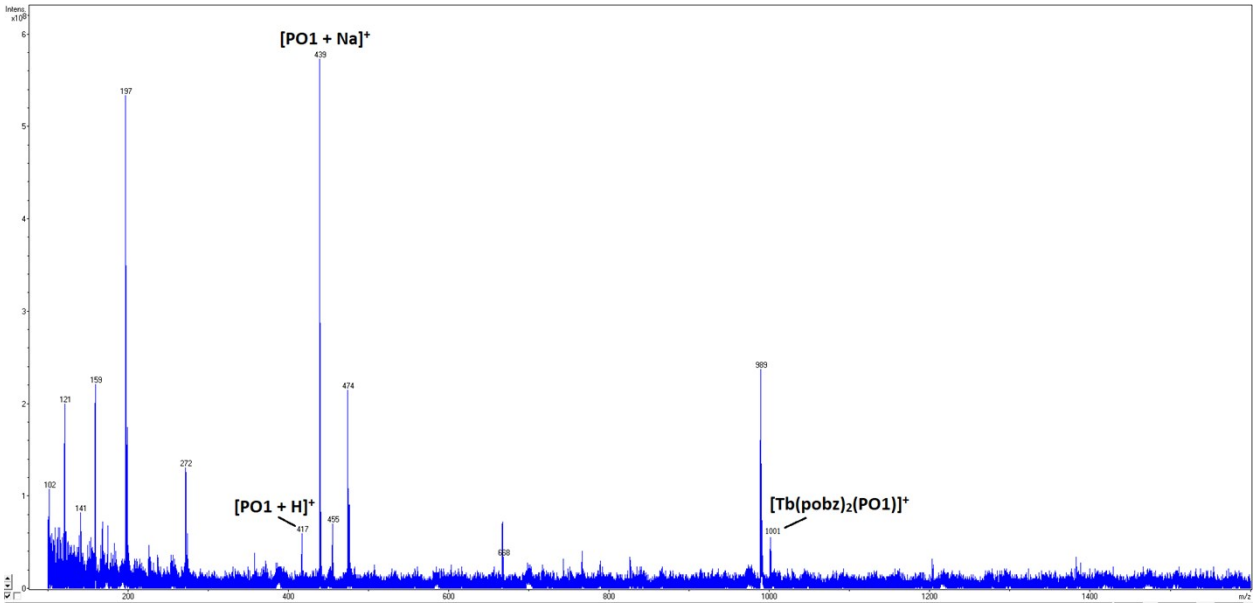


Figure S13. MALDI mass-spectrum of $Tb(pobz)_3(PO1)\cdot(CH_3)_2CO$

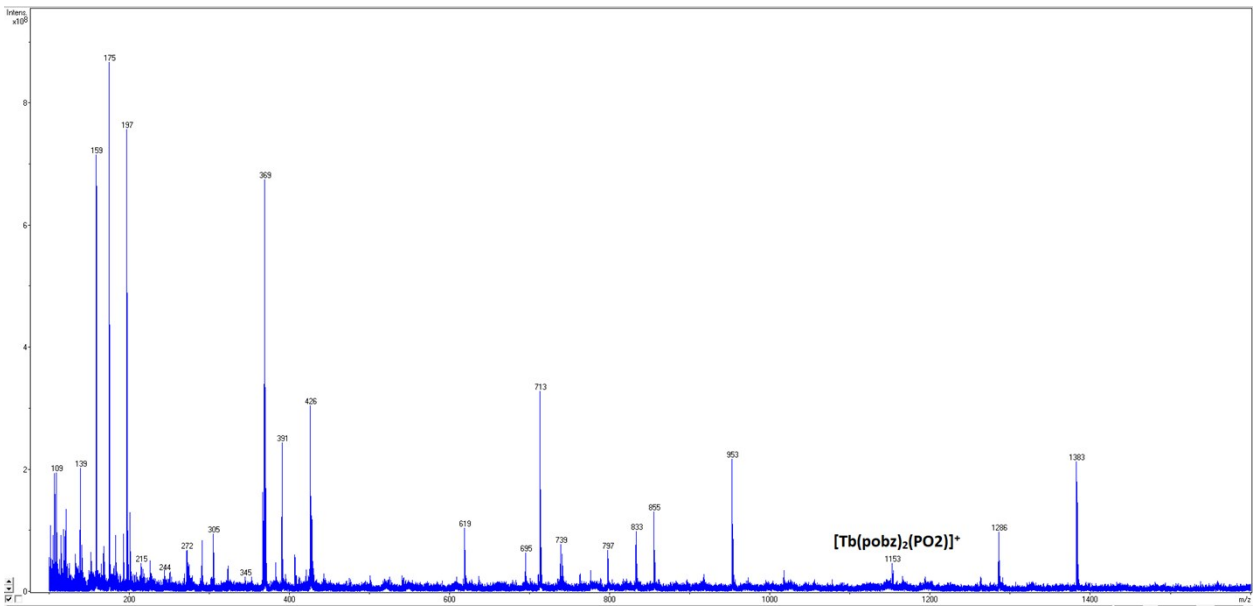


Figure S14. MALDI mass-spectrum of $Tb(pobz)_3(PO2)\cdot(CH_3)_2CO$

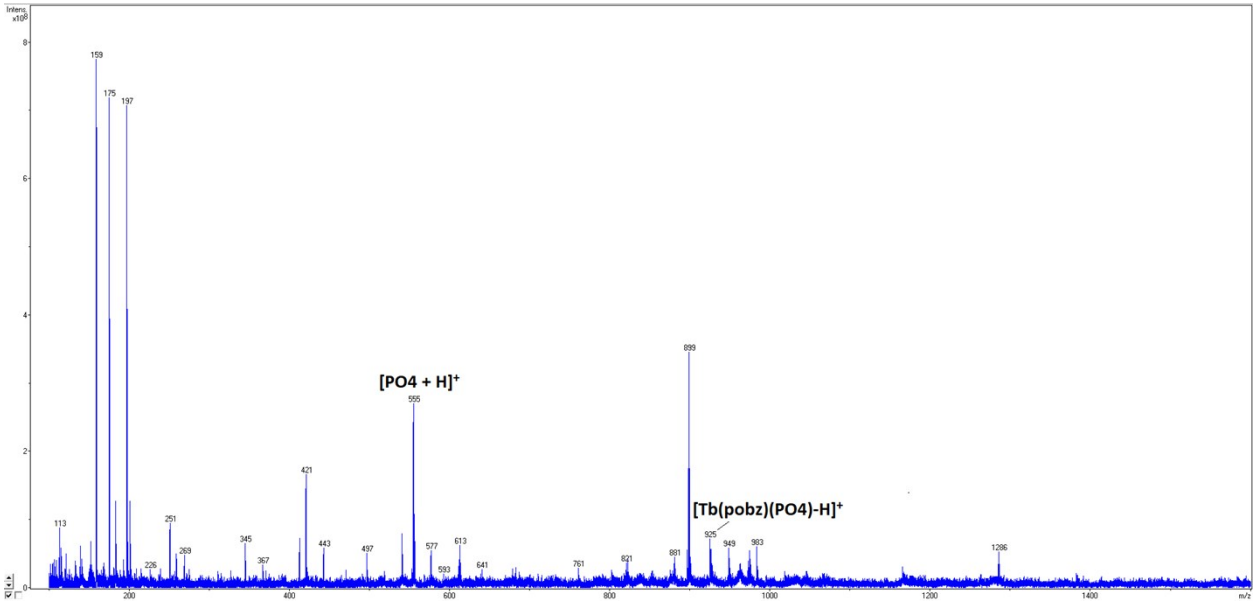


Figure S15. MALDI mass-spectrum of $Tb(pobz)_3(PO4)\cdot(CH_3)_2CO$

TGA data

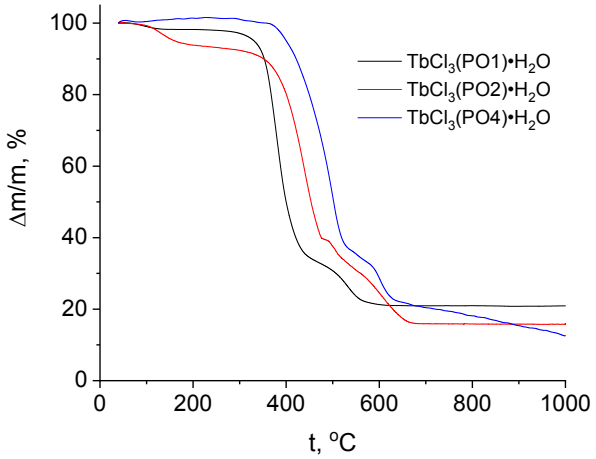


Figure S16. TGA curves of $TbCl_3(PO)\cdot H_2O$ (PO = PO1, PO2, PO4)

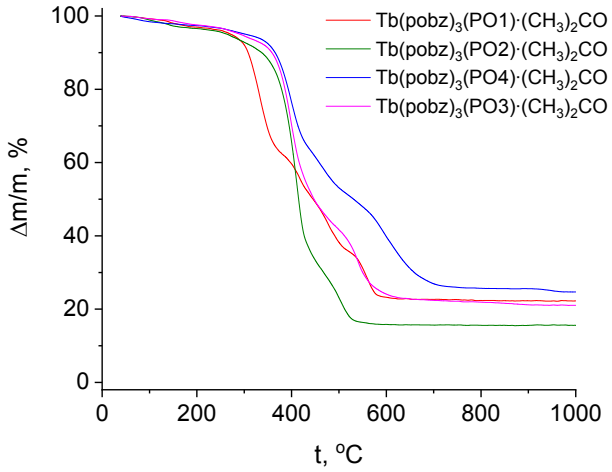


Figure S17. TGA curves of $Tb(pobz)_3(PO)\cdot(CH_3)_2CO$ (PO = PO1 - PO4)

PXRD data

The powder patterns of the all samples were measured on Bruker D8 Advance Vario diffractometer, in transmission mode, with the sample deposited between Mylar (Chemplex) films. The powder pattern of the Mylar film is represented in Fig. S18.

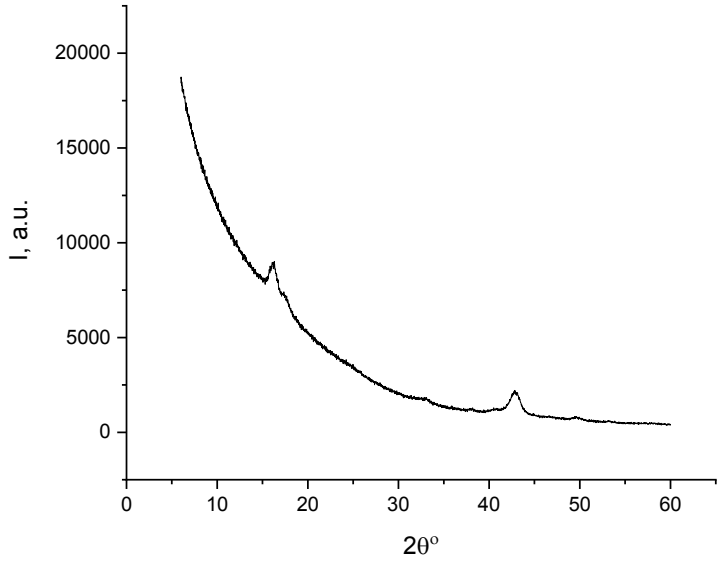
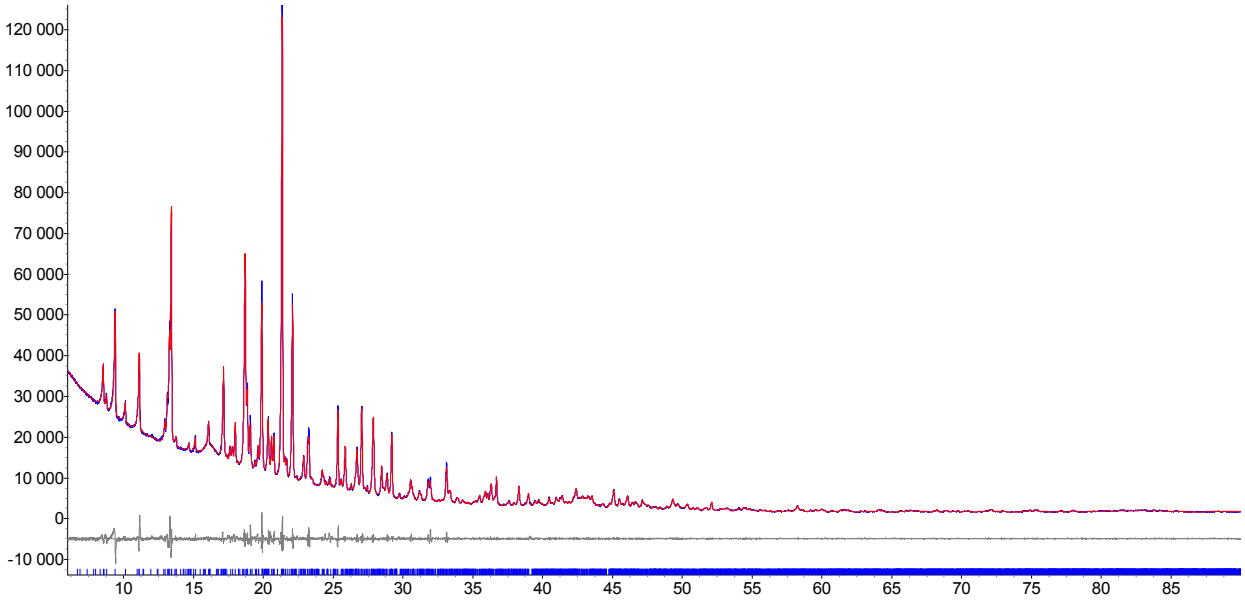
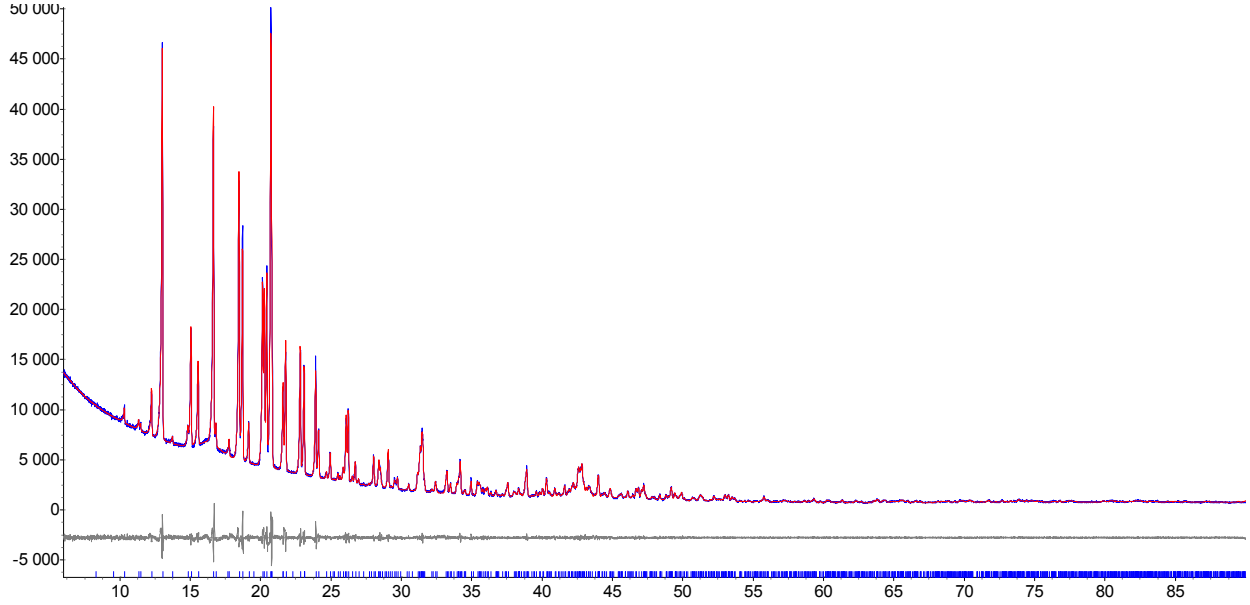


Figure S18. PXRD data of the Mylar film



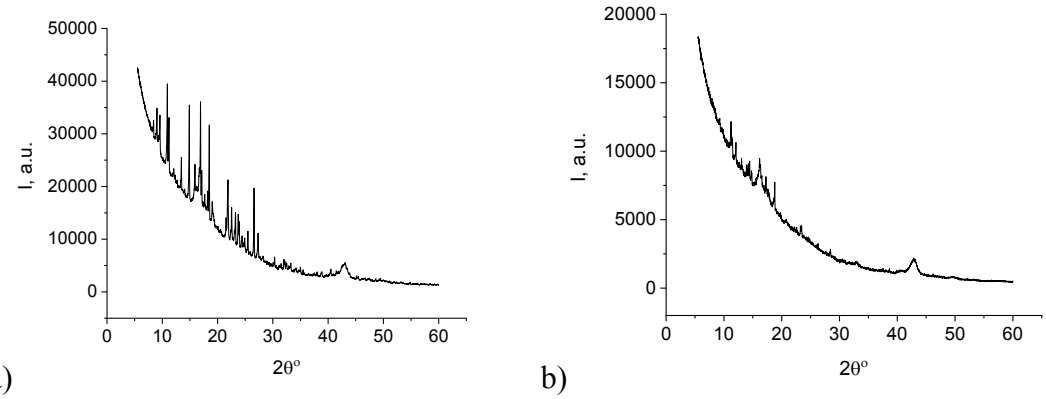
Spacegroup	P-1
Cell Volume (Å^3)	3653.1(4)
a (Å)	13.6287(10)
b (Å)	14.1518(10)
c (Å)	20.3743(8)
alpha (°)	99.474(6)
beta (°)	91.101(5)
gamma (°)	70.593(6)

Figure S19. PXRD data of PO2



Spacegroup	P21
Cell Volume (Å³)	1437.56(4)
a (Å)	10.7967(2)
b (Å)	14.4027(2)
c (Å)	9.39672(16)
alpha (°)	90
beta (°)	90
gamma (°)	100.3200(8)

Figure S20. PXRD data of PO4



a) b)

Figure S21. PXRD data of a) PO1 and b) PO3

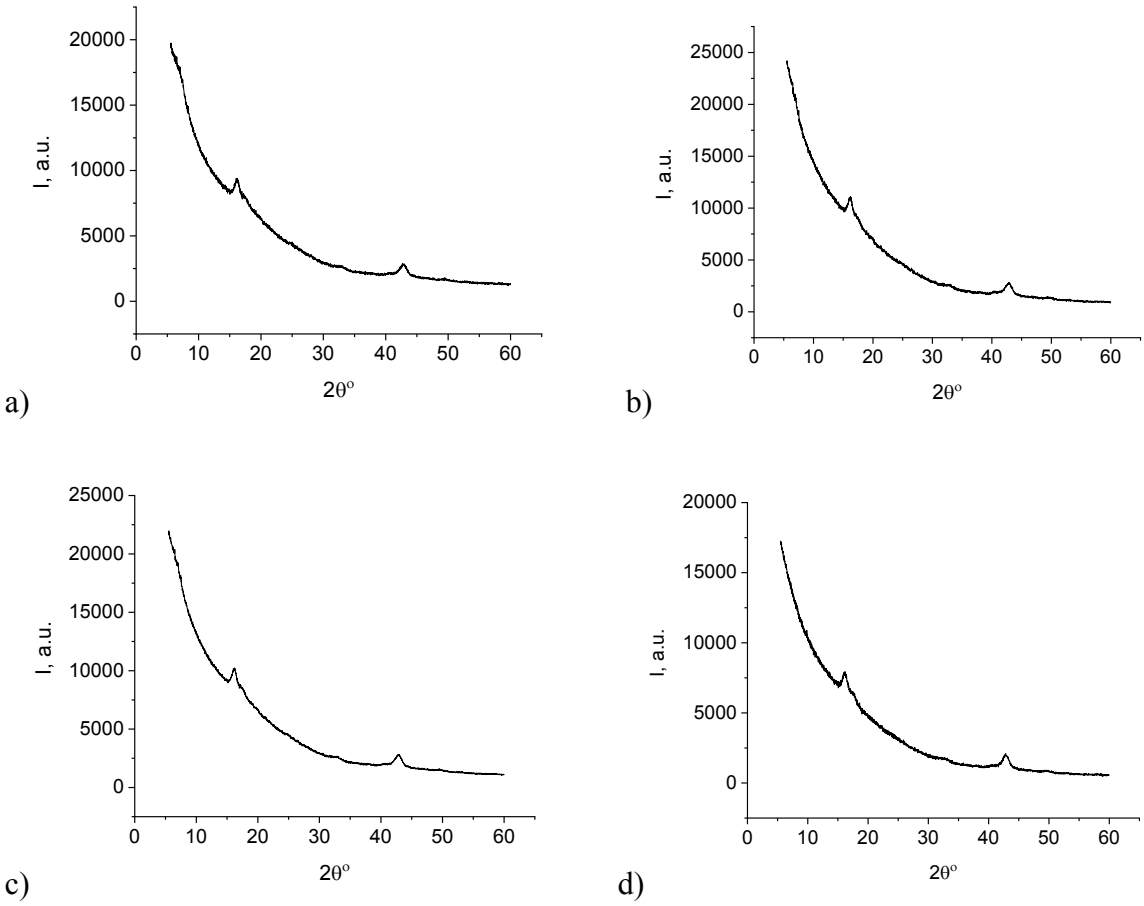


Figure S22. PXRD data of a) $Tb(pobz)_3(PO1)\cdot(CH_3)_2CO$, b) $Tb(pobz)_3(PO2)\cdot(CH_3)_2CO$, c) $Tb(pobz)_3(PO3)\cdot(CH_3)_2CO$ and d) $Tb(pobz)_3(PO4)\cdot(CH_3)_2CO$

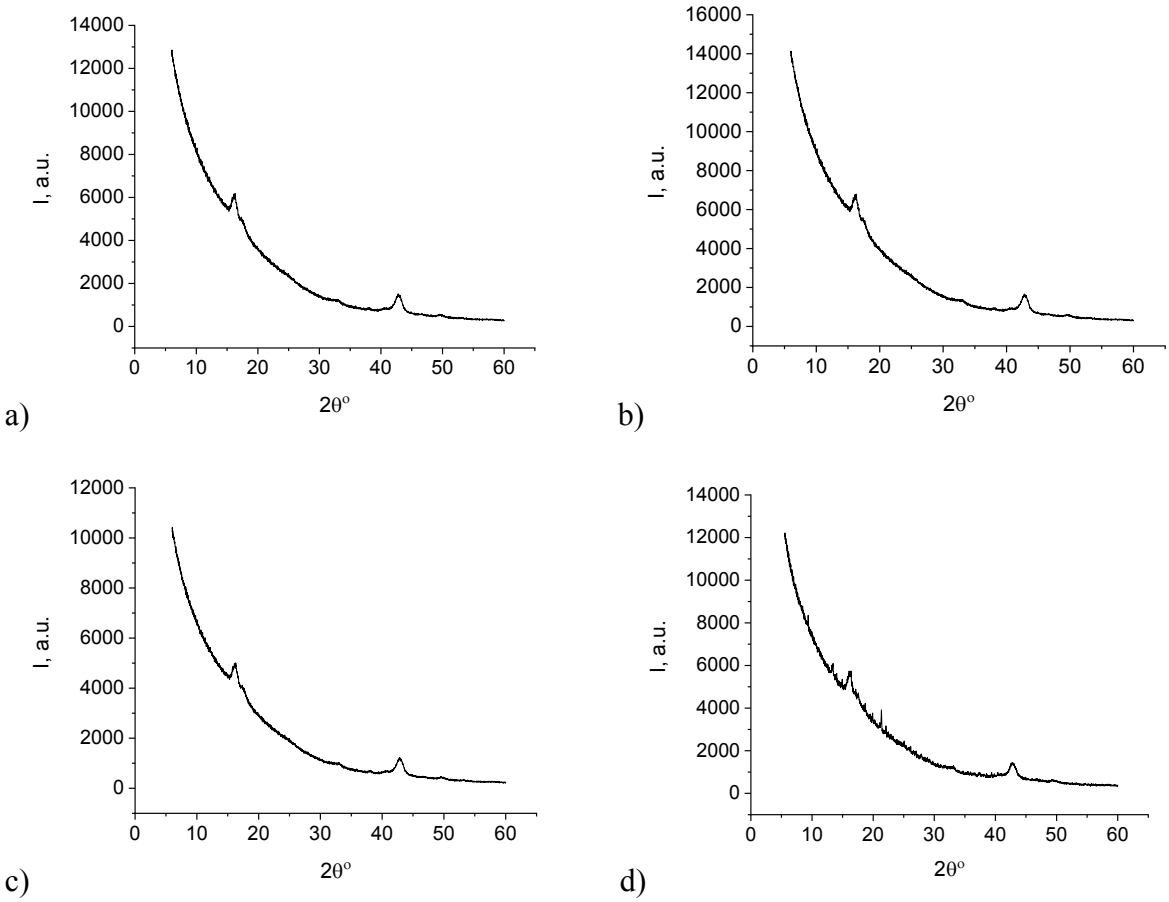


Figure S23. PXRD data of a) $TbCl_3(PO1)\cdot H_2O$, b) $TbCl_3(PO2)\cdot H_2O$, c) $TbCl_3(PO3)\cdot H_2O$ and d) $TbCl_3(PO4)\cdot H_2O$

Emission decay profiles

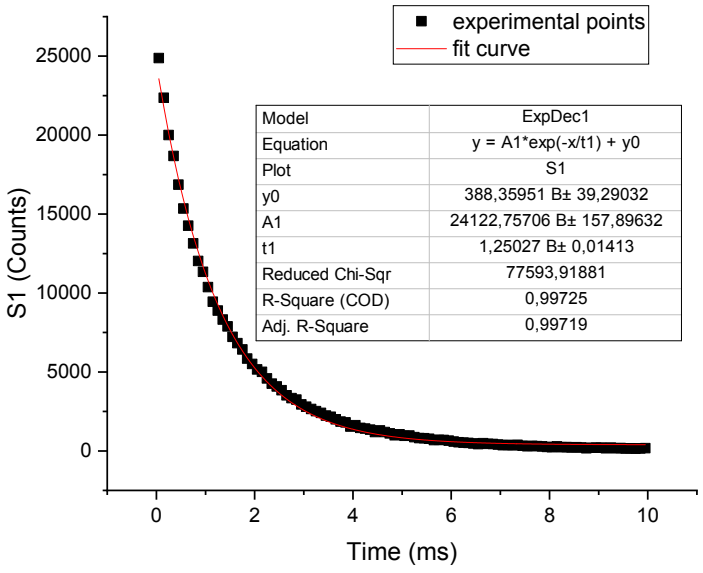


Figure S24. Emission decay profile of $TbCl_3(PO1)\cdot H_2O$

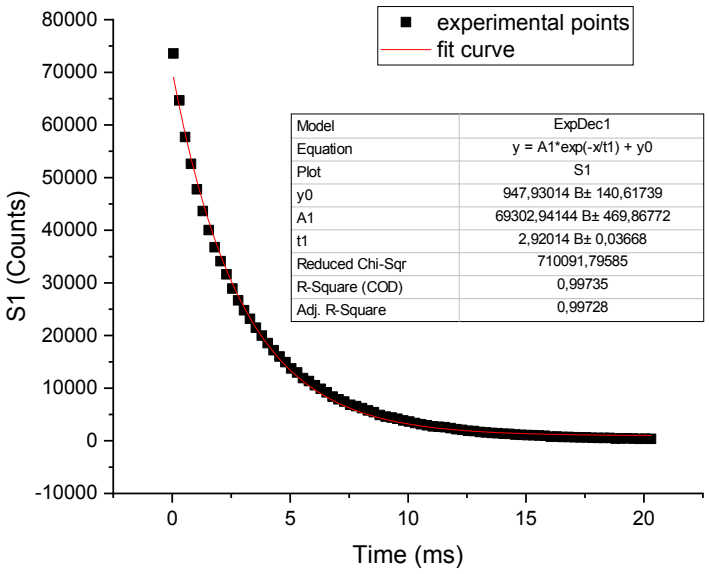


Figure S25. Emission decay profile of $TbCl_3(PO2)\cdot H_2O$

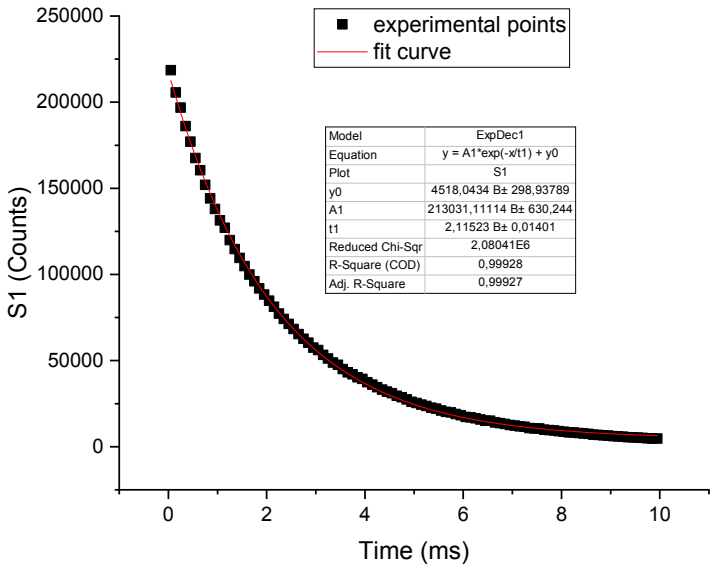


Figure S26. Emission decay profile of $TbCl_3(PO3)\cdot H_2O$

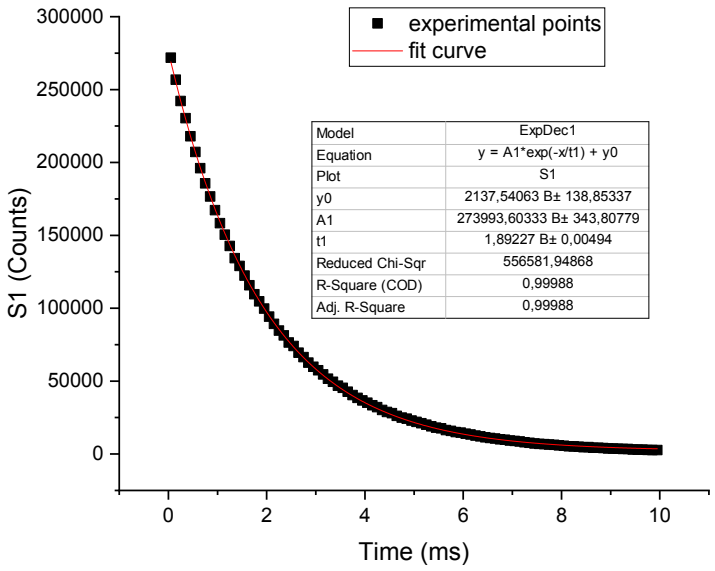


Figure S27. Emission decay profile of $TbCl_3(PO4)\cdot H_2O$

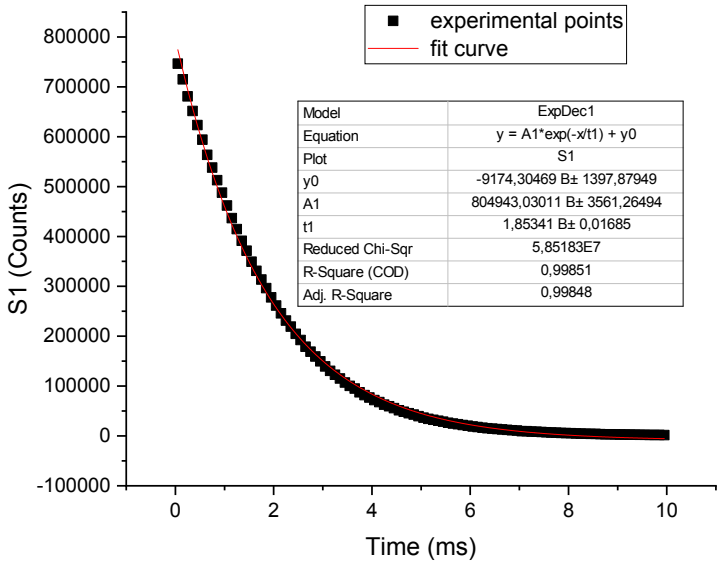


Figure S28. Emission decay profile of $Tb(pobz)_3(PO1)\cdot(CH_3)_2CO$

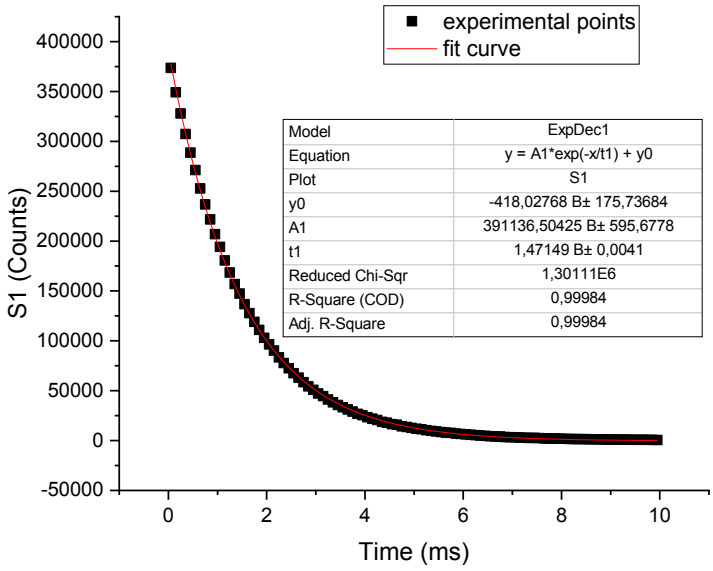


Figure S29. Emission decay profile of $Tb(pobz)_3(PO2)\cdot(CH_3)_2CO$

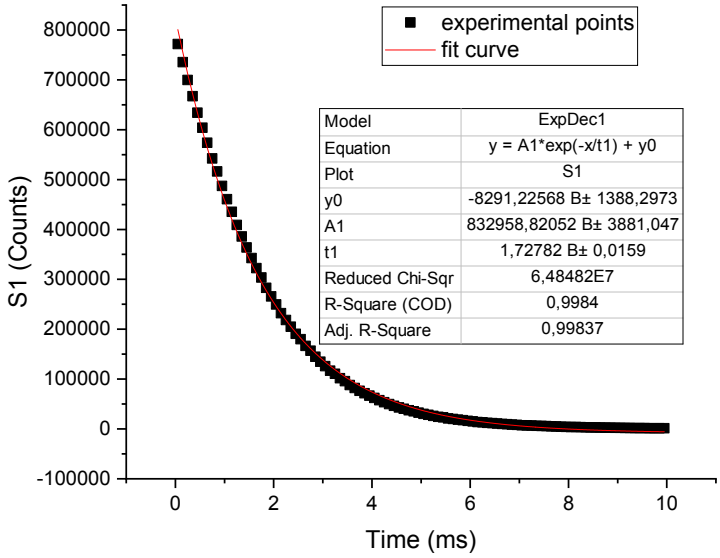


Figure S30. Emission decay profile of $Tb(pobz)_3(PO3)\cdot(CH_3)_2CO$

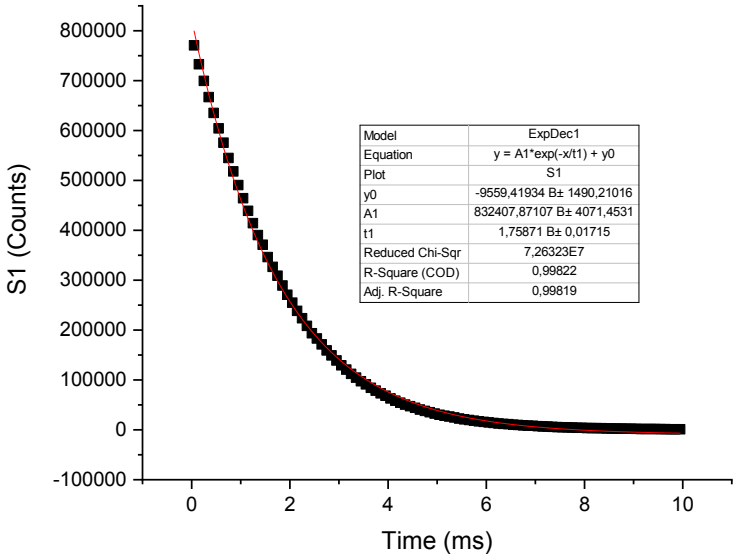


Figure S31. Emission decay profile of $Tb(pobz)_3(PO4)\cdot(CH_3)_2CO$

Quantum yield determination

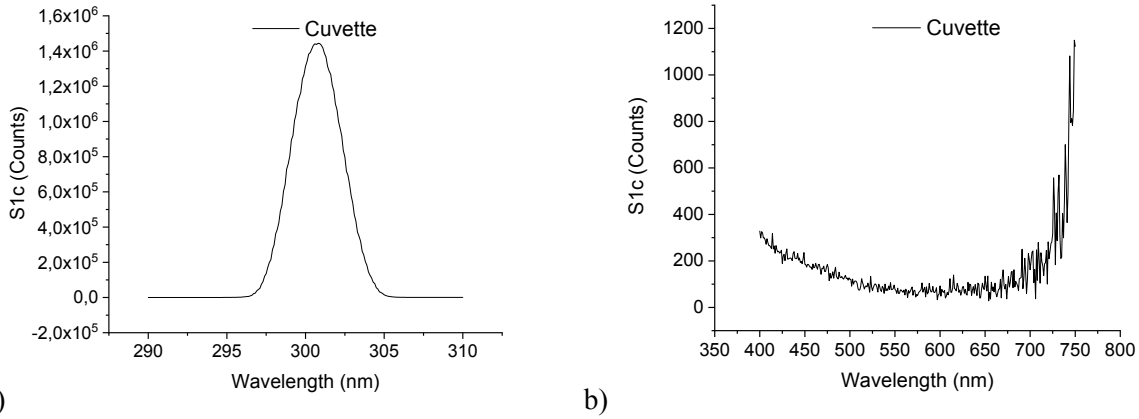


Figure S32. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of empty cuvette

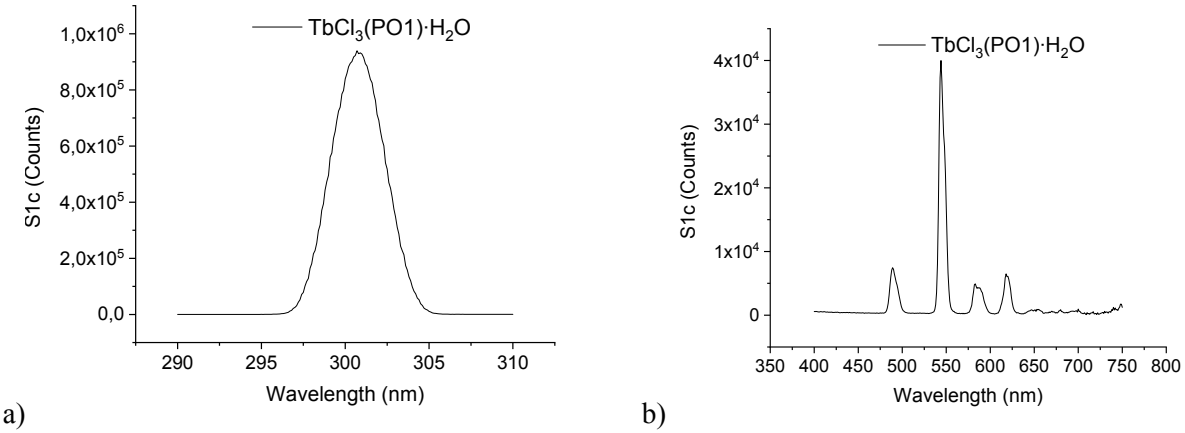


Figure S33. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $TbCl_3(PO1)\cdot H_2O$

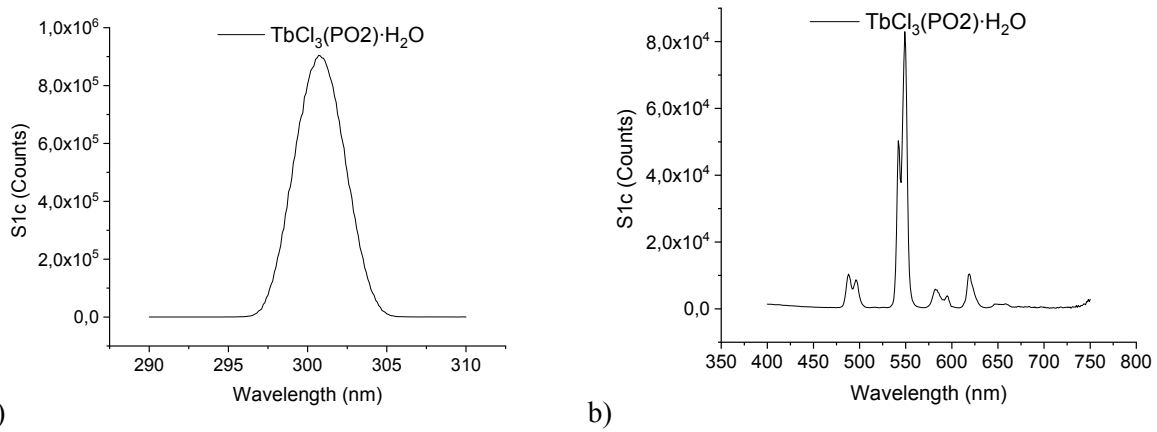


Figure S34. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $TbCl_3(PO2)\cdot H_2O$

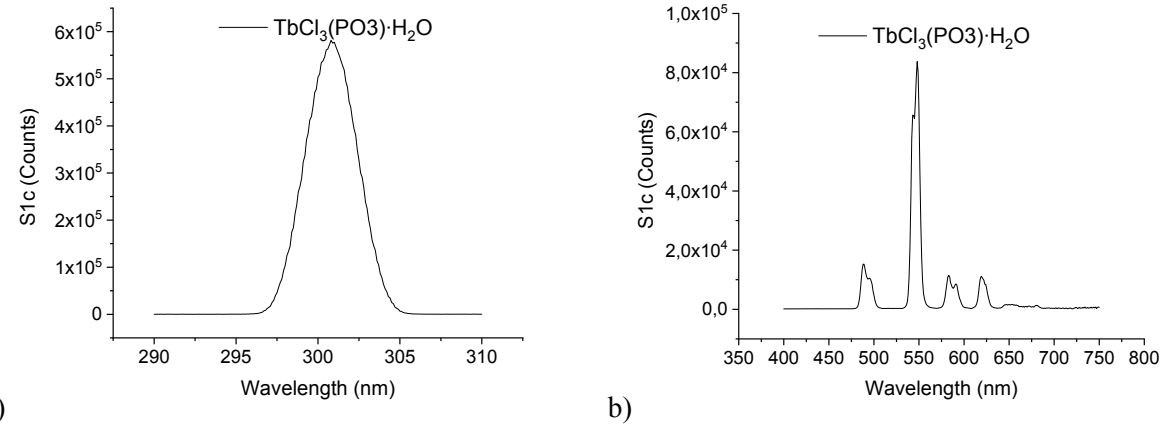


Figure S35. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $TbCl_3(PO3)\cdot H_2O$

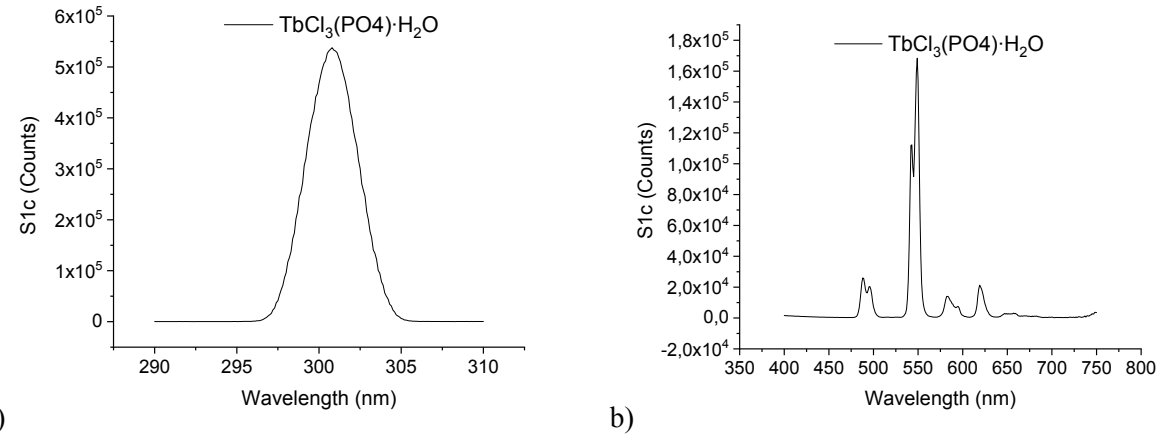
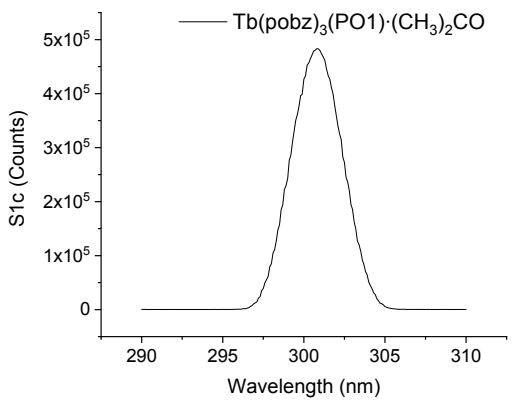
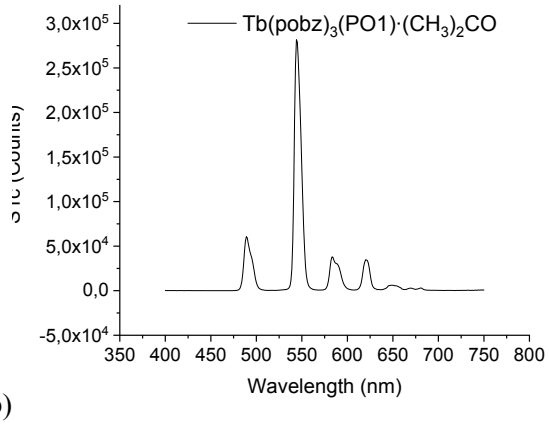


Figure S36. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $TbCl_3(PO4)\cdot H_2O$

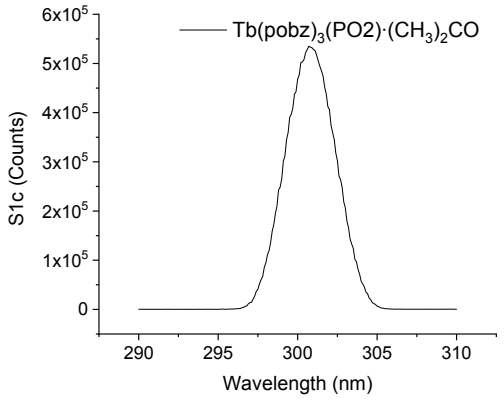


a)

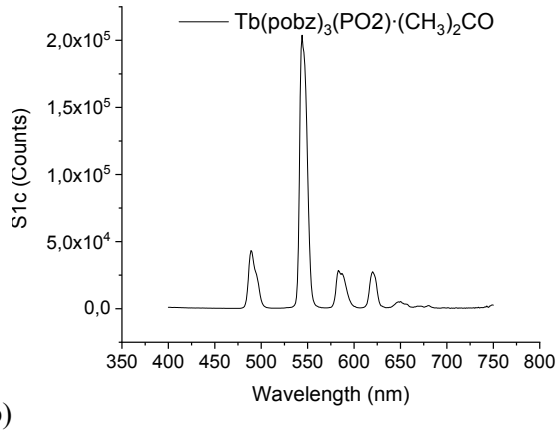


b)

Figure S37. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $Tb(pobz)_3(PO1)\cdot(CH_3)_2CO$

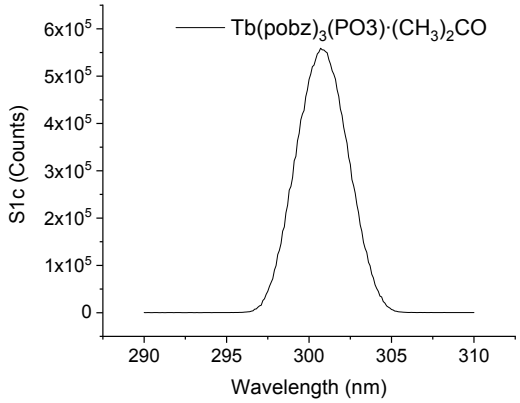


a)

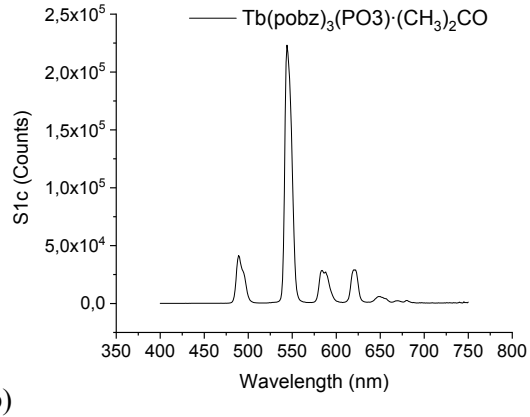


b)

Figure S38. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $Tb(pobz)_3(PO2)\cdot(CH_3)_2CO$



a)



b)

Figure S39. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $Tb(pobz)_3(PO3)\cdot(CH_3)_2CO$

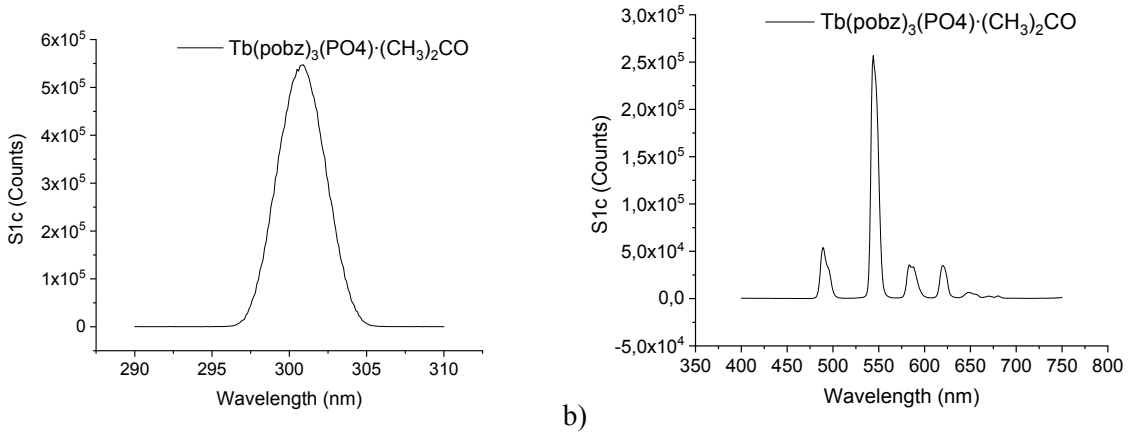


Figure S40. a) Rayleigh scattering spectrum and b) emission spectrum of $Tb(pobz)_3(PO4)\cdot(CH_3)_2CO$

Table S1. Quantum yield determination data

Empty cuvette	Scattering integral intensity L_a, a.u.	Emission integral intensity E_a, a.u.	
	5672761	55899	
Sample	Scattering integral intensity L_c, a.u.	Emission integral intensity E_c, a.u.	PLQY, %
$TbCl_3(PO1)\cdot H_2O$	3626812	647785	29%
$TbCl_3(PO2)\cdot H_2O$	3512323	1230771	54%
$TbCl_3(PO3)\cdot H_2O$	2223884	1394097	39%
$TbCl_3(PO4)\cdot H_2O$	2060034	2533014	69%
$Tb(pobz)_3(PO1)\cdot(CH_3)_2CO$	1860534	4179834	108%
$Tb(pobz)_3(PO2)\cdot(CH_3)_2CO$	2051996	3197451	87%
$Tb(pobz)_3(PO3)\cdot(CH_3)_2CO$	2147371	3412233	95%
$Tb(pobz)_3(PO4)\cdot(CH_3)_2CO$	2093327	4002004	110%

OLED characteristics

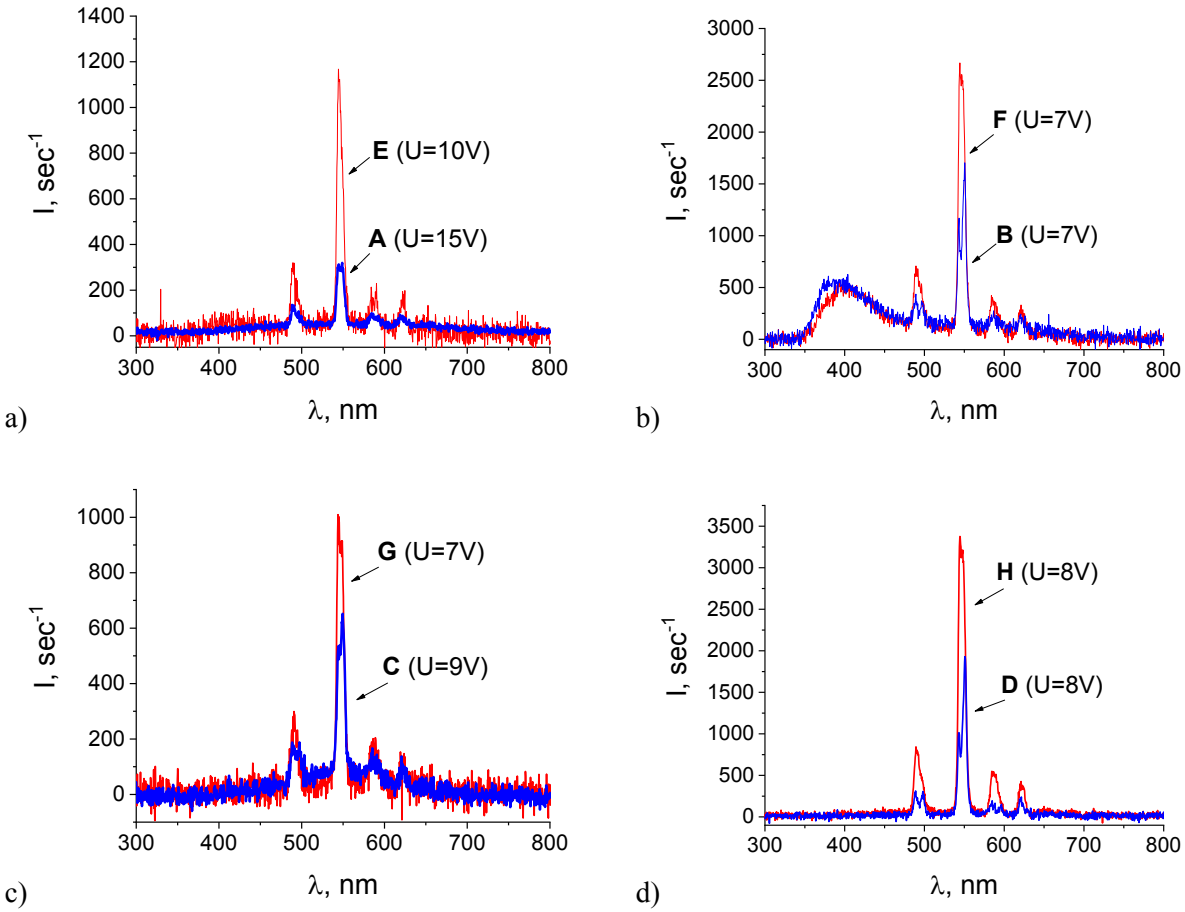


Figure S41. Electroluminescence spectra comparison of devices a) **A** and **E** b) **B** and **F** c) **C** and **G** d) **D** and **H**

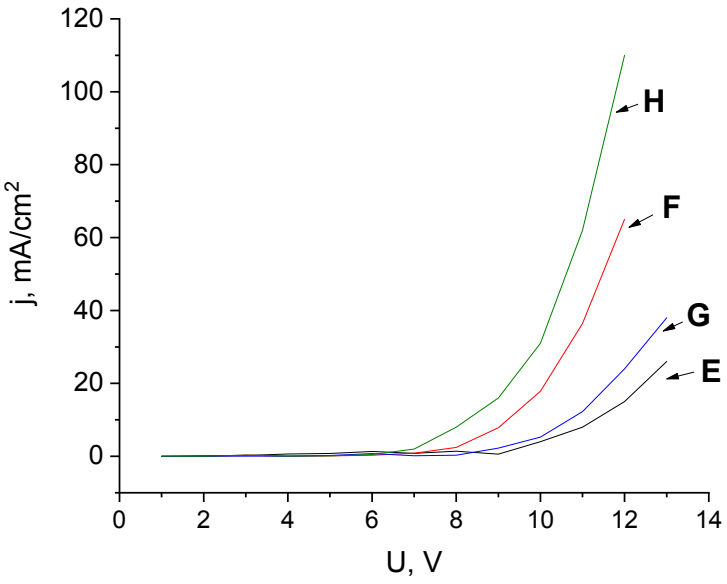
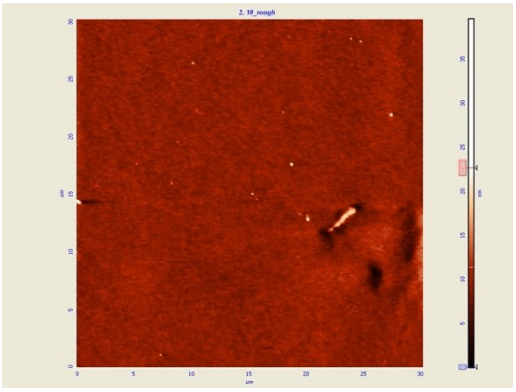
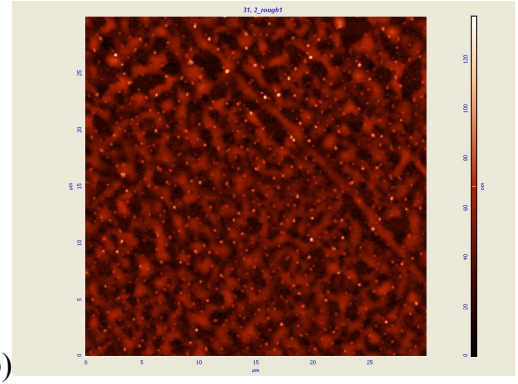


Figure S42. The I-V curves of devices **E**, **F**, **G**, **H**

Table S2. The physical and optical characteristics of device **J**: luminance, current density, current efficiency, power efficiency, CIE coordinates, and EQE

Voltage, V	Luminance, cd/m²	CDensity, mA/cm²	CE, cd/A	PE, lm/W	X (CIE1931)	Y (CIE1931)	u' (CIE1976)'	v' (CIE1976)'	EQE, %
0	0,00	0,00	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1	0,00	2,26	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
2	0,00	0,99	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
3	-0,01	2,34	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
4	0,00	3,41	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
5	0,00	3,10	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
6	0,01	4,14	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
7	0,01	2,39	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
8	0,11	2,16	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
9	0,64	2,75	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
10	2,51	3,70	0,068	0,021	0,302	0,551	0,134	0,550	0,020
11	7,36	6,09	0,121	0,034	0,297	0,533	0,135	0,545	0,037
12	17,42	11,31	0,154	0,040	0,290	0,506	0,137	0,536	0,050
13	35,45	21,62	0,164	0,040	0,281	0,475	0,138	0,525	0,056
14	74,69	38,95	0,192	0,043	0,269	0,442	0,139	0,512	0,069

a) 

b) 

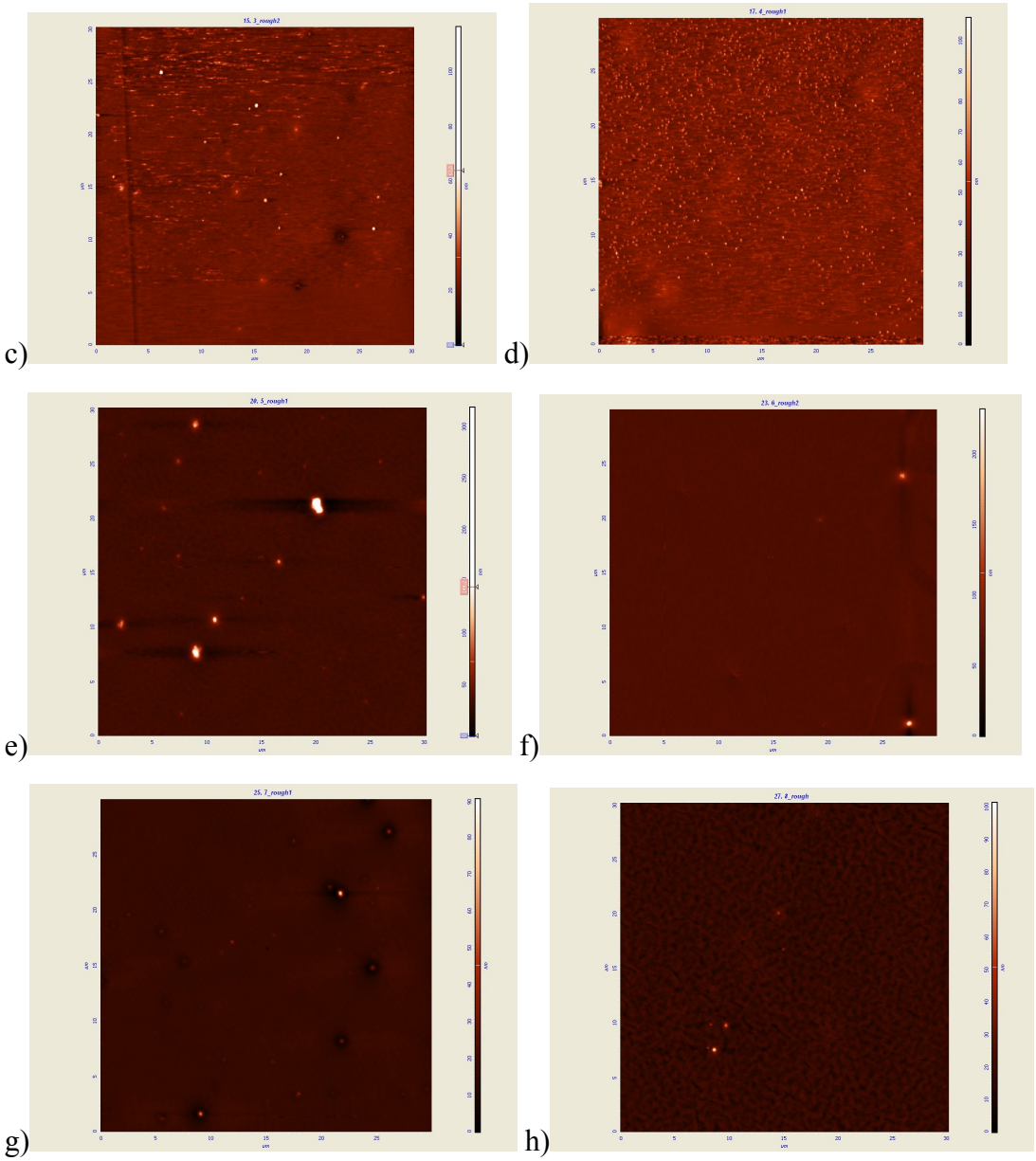


Figure S43. AFM images of a) $TbCl_3$:5PO1, b) $TbCl_3$:5PO2, c) $TbCl_3$:5PO3, d) $TbCl_3$:5PO4, e) $Tb(pobz)_3$:5PO1, f) $Tb(pobz)_3$:5PO2, g) $Tb(pobz)_3$:5PO3, h) $Tb(pobz)_3$:5PO4 films

Table S3. The AFM roughness and thickness data

	Film	Av Roughness, nm	RootMeanSquare, nm	Thickness, nm
a	$TbCl_3$:5PO1	0.73	1.06	36.0±4.7
b	$TbCl_3$:5PO2	10.3	13.2	25.8±3.1
c	$TbCl_3$:5PO3	1.0	1.8	27.9±3.2
d	$TbCl_3$:5PO4	1.6	3.1	37.0±4.1
e	$Tb(pobz)_3$:5PO1	2.2	6.9	23.0±4.6
f	$Tb(pobz)_3$:5PO2	1.2	3.2	20.3±3.5
g	$Tb(pobz)_3$:5PO3	0.78	1.5	23.5±6.4
h	$Tb(pobz)_3$:5PO4	2.3	3.0	30.9±8.2

Quantum chemical calculations data

Table S4. Optimized atomic coordinates (Cartesian, Å) for PO1-PO4 ligands

N	PO1				PO2				PO3				PO4			
	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
1	O	0,2365	-1,8413	0,7485	C	2,5295	-2,7400	-0,3095	P	3,0795	-0,1988	0,1181	P	-4,9811	2,0191	0,1622
2	C	1,5254	-0,6839	-1,4150	C	1,6760	-1,6321	-0,2471	O	4,2411	-1,1379	0,3218	P	4,9771	-2,0216	0,1363
3	C	1,9325	0,4469	-2,1295	C	2,0432	-4,0449	-0,4441	C	1,5416	-1,0149	0,7289	O	-4,9490	3,4975	0,4058
4	C	1,4543	-1,9204	-2,0645	C	0,3134	-1,9144	-0,3412	N	0,3601	-0,4234	0,5426	O	4,9433	-3,5054	0,3444
5	C	2,2741	0,3381	-3,4741	C	0,6798	-4,2947	-0,5344	C	1,6817	-2,2441	1,3809	C	-3,3227	1,2682	0,1976
6	C	1,7980	-2,0257	-3,4078	C	-0,1992	-3,2131	-0,4866	C	0,5414	-2,8682	1,8698	C	3,3189	-1,2710	0,1819
7	C	2,2106	-0,8977	-4,1125	H	2,7474	-4,8705	-0,4880	C	-0,6937	-2,2487	1,6951	C	-3,0689	-0,0544	0,5708
8	H	1,9715	1,4236	-1,6541	H	0,3071	-5,3090	-0,6472	H	2,6754	-2,6708	1,4807	C	3,0628	0,0412	0,5890
9	H	1,1118	-2,7885	-1,5080	C	-4,1909	-1,9932	-0,6720	H	0,6100	-3,8232	2,3842	C	-2,2509	2,0902	-0,1645
10	H	2,5821	1,2223	-4,0252	C	-3,9940	-3,3757	-0,7648	C	2,8005	0,1212	-1,7045	C	2,2492	-2,0829	-0,2083
11	H	1,7377	-2,9888	-3,9072	C	-3,1268	-1,0984	-0,5213	C	3,2610	1,3321	1,1788	C	-1,7707	-0,5501	0,5615
12	H	2,4759	-0,9793	-5,1632	C	-2,7174	-3,9191	-0,7164	P	-2,2577	-0,0193	0,8284	C	1,7645	0,5368	0,5858
13	C	2,6965	-0,7251	1,2548	C	-1,8602	-1,6725	-0,4644	O	-2,2853	1,2055	1,6909	C	-0,9555	1,5913	-0,1717
14	C	3,7659	0,1302	0,9716	C	-1,6334	-3,0533	-0,5648	C	-3,6423	-1,1395	1,2124	C	0,9537	-1,5840	-0,2094
15	C	2,8105	-1,6596	2,2869	H	-4,8545	-4,0280	-0,8811	C	-3,9971	-2,2417	0,4275	C	-0,6925	0,2625	0,1873
16	C	4,9337	0,0569	1,7228	H	-2,5645	-4,9919	-0,7977	C	-4,3743	-0,8485	2,3669	C	0,6885	-0,2654	0,1839
17	C	3,9819	-1,7309	3,0361	O	-0,6852	-0,9874	-0,3141	C	-5,0658	-3,0494	0,8019	H	-3,8834	-0,6952	0,8996
18	C	5,0411	-0,8722	2,7566	P	-3,5693	0,6760	-0,4813	C	-5,4445	-1,6582	2,7380	H	3,8752	0,6731	0,9393
19	H	3,6987	0,8459	0,1556	O	-5,0626	0,8161	-0,5353	C	-5,7885	-2,7588	1,9582	H	-2,4445	3,1263	-0,4286
20	H	1,9756	-2,3265	2,4838	P	2,2777	0,0822	-0,0965	H	-3,4501	-2,4656	-0,4847	H	2,4443	-3,1116	-0,4989
21	H	5,7633	0,7219	1,4992	O	1,6374	1,0508	-1,0456	H	-4,0965	0,0222	2,9549	H	-1,5847	-1,5704	0,8860
22	H	4,0678	-2,4599	3,8373	C	-2,7565	1,4725	-1,8945	H	-5,3403	-3,9028	0,1877	H	1,5765	1,5480	0,9366
23	H	5,9556	-0,9283	3,3411	C	-3,5938	1,9195	-2,9221	H	-6,0123	-1,4266	3,6350	H	-0,1357	2,2348	-0,4797
24	P	-1,2801	1,4837	0,3015	C	-1,3714	1,6387	-1,9973	H	-6,6251	-3,3897	2,2466	H	0,1358	-2,2190	-0,5393
25	O	-1,3366	2,9751	0,1526	C	-3,0461	2,5240	-4,0496	C	-0,7344	-1,0280	1,0211	C	-5,6943	1,5900	-1,4568
26	C	-2,3494	0,8744	1,6369	C	-0,8311	2,2398	-3,1298	C	-2,3419	0,3513	-0,9470	C	5,6985	-1,5544	-1,4684
27	C	-2,2374	-0,3942	2,2169	C	-1,6656	2,6815	-4,1544	C	-1,9512	-0,5469	-1,9451	C	-5,3818	0,4229	-2,1603
28	C	-3,3331	1,7637	2,0809	H	-4,6680	1,7936	-2,8162	C	-2,8403	1,6071	-1,3026	C	5,3924	-0,3695	-2,1445
29	C	-3,1193	-0,7657	3,2283	H	-0,6949	1,3081	-1,2155	C	-2,0745	-0,1969	-3,2860	C	-6,6022	2,5038	-2,0012
30	C	-4,2097	1,3831	3,0922	H	-3,6980	2,8739	-4,8459	C	-2,9612	1,9545	-2,6450	C	6,6079	-2,4563	-2,0300
31	C	-4,1047	0,1176	3,6639	H	0,2472	2,3527	-3,1942	C	-2,5826	1,0525	-3,6359	C	-5,9901	0,1627	-3,3853
32	H	-1,4629	-1,0866	1,8884	H	-1,2398	3,1524	-5,0372	H	-1,5303	-1,5142	-1,6800	C	6,0085	-0,0803	-3,3590
33	H	-3,3881	2,7530	1,6346	C	-2,7903	1,3497	1,0143	H	-3,1124	2,3065	-0,5168	C	-7,2060	2,2417	-3,2266
34	H	-3,0325	-1,7502	3,6805	C	-2,6287	0,5577	2,1550	H	-1,7652	-0,8960	-4,0583	C	7,2194	-2,1650	-3,2449
35	H	-4,9717	2,0769	3,4374	C	-2,4750	2,7113	1,0740	H	-3,3463	2,9334	-2,9173	C	-6,9043	1,0695	-3,9163
36	H	-4,7885	-0,1794	4,4551	C	-2,1529	1,1173	3,3361	H	-2,6753	1,3255	-4,6837	C	6,9241	-0,9754	-3,9070
37	C	-1,7841	0,6499	-1,2344	C	-2,0048	3,2700	2,2574	H	-1,6072	-2,6986	2,0712	H	-4,6481	-0,2745	-1,7631
38	C	-2,0179	-0,7247	-1,3484	C	-1,8437	2,4737	3,3885	C	3,5666	0,7864	2,5834	H	4,6578	0,3195	-1,7343
39	C	-1,9923	1,4855	-2,3361	H	-2,8786	-0,4996	2,1203	H	3,7753	1,6295	3,2539	H	-6,8114	3,4238	-1,4620
40	C	-2,4427	-1,2533	-2,5629	H	-2,5959	3,3332	0,1911	H	2,7142	0,2368	2,9990	H	6,8122	-3,3898	-1,5125
41	C	-2,4183	0,9495	-3,5477	H	-2,0218	0,4935	4,2161	H	4,4345	0,1210	2,5728	H	-5,7420	-0,7439	-3,9306
42	C	-2,6429	-0,4196	-3,6613	H	-1,7639	4,3290	2,2961	C	4,4792	2,1207	0,6827	H	5,7654	0,8402	-3,8830
43	H	-1,8486	-1,3855	-0,5035	H	-1,4739	2,9102	4,3125	H	5,3549	1,4746	0,5604	H	-7,9087	2,9559	-3,6472
44	H	-1,8295	2,5535	-2,2195	C	2,0539	0,5226	1,6516	H	4,2788	2,6262	-0,2680	H	7,9233	-2,8699	-3,6790
45	H	-2,6211	-2,3217	-2,6504	C	1,8909	1,8782	1,9511	H	4,7283	2,8957	1,4188	H	-7,3746	0,8665	-4,8748
46	H	-2,5803	1,6025	-4,4013	C	2,0849	-0,4183	2,6855	C	2,0340	2,2449	1,2504	H	7,4006	-0,7496	-4,8573
47	H	-2,9789	-0,8389	-4,6063	C	1,7834	2,2895	3,2753	H	1,8065	2,7199	0,2931	C	-5,9650	1,1223	1,4039
48	C	0,4353	0,9620	0,7603	C	1,9769	-0,0020	4,0094	H	1,1343	1,7206	1,5831	C	5,9569	-1,1557	1,4030
49	H	1,0766	1,7417	0,3323	C	1,8325	1,3517	4,3041	H	2,2427	3,0459	1,9720	C	-6,5791	-0,1114	1,1669
50	H	0,5058	1,0700	1,8494	H	1,8350	2,5974	1,1386	C	2,2424	-1,1903	-2,2786	C	6,5659	0,0866	1,2002
51	P	1,1150	-0,6857	0,3537	H	2,1821	-1,4769	2,4562	H	2,8675	-2,0464	-2,0025	C	-6,0962	1,7306	2,6563
52					H	1,6558	3,3439	3,5045	H	1,2176	-1,3769	-1,9428	C	6,0916	-1,7985	2,6376

53					H	2,0003	-0,7355	4,8109	H	2,2280	-1,1202	-3,3737	C	-7,2954	-0,7406	2,1812
54					H	1,7504	1,6751	5,3386	C	4,1752	0,3735	-2,3386	C	7,2807	0,6899	2,2310
55					C	4,0771	-0,0166	-0,3598	H	4,6137	1,3225	-2,0165	C	-6,8161	1,1003	3,6662
56					C	4,5425	0,3493	-1,6266	H	4,8763	-0,4284	-2,0900	C	6,8103	-1,1940	3,6641
57					C	4,9882	-0,4107	0,6252	H	4,0611	0,4154	-3,4295	C	-7,4108	-0,1372	3,4313
58					C	5,9040	0,3029	-1,9099	C	1,8415	1,2695	-2,0194	C	7,4000	0,0519	3,4634
59					C	6,3490	-0,4580	0,3370	H	1,6472	1,2840	-3,1000	H	-6,5170	-0,5730	0,1843
60					C	6,8065	-0,1046	-0,9306	H	0,8823	1,1567	-1,5056	H	6,5012	0,5754	0,2310
61					H	3,8281	0,6850	-2,3733	H	2,2711	2,2413	-1,7553	H	-5,6440	2,7054	2,8187
62					H	4,6384	-0,6656	1,6225					H	5,6432	-2,7791	2,7727
62					H	6,2615	0,5908	-2,8949					H	-7,7731	-1,6981	1,9918
64					H	7,0541	-0,7619	1,1060					H	7,7545	1,6543	2,0682
65					H	7,8701	-0,1381	-1,1517					H	-6,9178	1,5781	4,6369
66					H	3,6024	-2,5798	-0,2620					H	6,9148	-1,6985	4,6208
67					H	-5,1911	-1,5705	-0,7180					H	-7,9742	-0,6281	4,2204
68													H	7,9624	0,5226	4,2655

Table S5. Frequencies and IR intensities of normal vibrations for PO1-PO4 ligands.

N	PO1		PO2		PO3		PO4	
	ν, cm^{-1}	IR intensity	ν, cm^{-1}	IR intensity	ν, cm^{-1}	IR intensity	ν, cm^{-1}	IR intensity
1	0	0,00002	6,29	0,00423	35,05	0,00816	0,00	0,00000
2	0	0,00005	4,67	0,00975	28,64	0,00128	0,00	0,00000
3	0	0,00007	4	0,00656	23,40	0,00272	0,00	0,00000
4	0	0,00002	0,14	0,00000	11,52	0,00107	0,00	0,00000
5	0	0,00005	0,09	0,00001	8,97	0,00094	0,00	0,00000
6	0	0,00010	0,13	0,00000	7,29	0,00218	0,00	0,00000
7	10,01	0,00042	11,86	0,00559	18,38	0,00363	7,35	0,01700
8	17,82	0,00027	14,81	0,00306	21,45	0,00679	13,42	0,00093
9	19,79	0,00011	23,5	0,00241	28,50	0,02201	21,54	0,00298
10	27,97	0,00008	28,13	0,00177	38,18	0,00172	24,05	0,00996
11	35,91	0,00015	33,06	0,00561	42,20	0,00588	25,71	0,00041
12	44,11	0,00057	35,36	0,00818	49,21	0,00539	30,36	0,02530
13	52,89	0,00039	43,32	0,01655	63,93	0,00834	34,03	0,00197
14	57,27	0,00085	47,05	0,00540	67,16	0,02374	35,97	0,00369
15	67,07	0,00073	54,85	0,01197	70,59	0,00442	39,91	0,00272
16	76,05	0,00005	55,24	0,00691	77,39	0,06770	41,04	0,00147
17	102,43	0,00022	62,85	0,00837	82,04	0,02410	53,39	0,00248
18	145,75	0,00499	76,32	0,01525	146,45	0,01375	61,05	0,00050
19	167,31	0,00415	86,55	0,00195	160,69	0,04468	68,55	0,00393
20	174,97	0,00180	92,78	0,01038	174,46	0,05517	83,71	0,00036
21	183,29	0,01119	108,52	0,00904	180,21	0,06252	92,19	0,03027
22	208,65	0,00282	133,81	0,06650	204,89	0,01669	136,52	0,00011
23	214,98	0,00142	160,94	0,05463	209,70	0,06083	136,86	0,00643
24	237,24	0,00113	167,73	0,07769	219,28	0,16544	155,29	0,00034
25	247,57	0,00582	176,12	0,08934	225,90	0,09113	170,87	0,06615
26	252,55	0,00332	191,41	0,01614	241,50	0,02462	171,43	0,11326
27	283,11	0,00689	209,86	0,07827	244,17	0,01080	187,45	0,13112
28	304,58	0,00437	230,22	0,05930	246,43	0,07023	188,30	0,29627
29	305,49	0,00540	232,62	0,05513	256,40	0,07224	217,05	0,03250
30	367,9	0,01312	249,52	0,04954	260,66	0,00251	246,77	0,02674
31	393,52	0,00362	251,19	0,07962	267,88	0,03122	247,67	0,15459
32	405,7	0,00174	260,49	0,05910	279,61	0,07393	254,19	0,15281
33	406,61	0,01198	265,75	0,04913	284,25	0,19242	265,47	0,01126
34	407,87	0,00198	270,91	0,09944	297,33	0,25005	271,61	0,01136
35	410,62	0,01131	288,27	0,13505	298,08	0,08875	295,19	0,15753
36	414,4	0,00486	291,07	0,09734	303,51	0,03898	295,22	0,00952
37	443,8	0,01381	298,58	0,09595	313,85	0,05668	302,22	0,16350
38	459,33	0,02406	320,54	0,00323	316,51	0,00557	365,77	0,02040
39	463,64	0,00976	339,11	0,00710	329,90	0,00050	381,36	0,00410
40	493,97	0,05798	375,72	0,04625	338,04	0,00474	391,98	0,00005
41	514,35	0,07248	401,29	0,07032	369,90	0,00722	406,95	0,01032
42	525,28	0,05877	404,71	0,00443	392,59	0,14415	407,01	0,00111
43	560,48	0,07214	408,16	0,00398	396,31	0,01221	407,73	0,00504
44	627,52	0,00026	409,86	0,00116	398,78	0,00274	408,06	0,00172
45	628,09	0,00023	412,94	0,00825	401,21	0,07214	411,24	0,01276
46	628,96	0,00059	442,98	0,27212	408,46	0,00078	418,10	0,00115
47	629,1	0,00072	452,22	0,78271	412,05	0,00877	425,36	0,02364
48	674,59	0,02877	466,46	0,68101	437,92	0,07769	451,21	0,20700
49	699,81	0,00240	476,44	0,24484	454,35	0,12631	460,22	0,88032
50	708,79	0,03826	490,76	0,35280	462,52	0,37319	482,11	0,12470
51	710,34	0,01881	509,28	0,62175	475,37	0,59949	487,54	0,00024

52	712,9	0,03265	526,7	0,21128	475,99	0,21438	489,62	0,69276
53	718,06	0,03010	543,49	1,82054	520,71	1,21759	508,33	0,20115
54	722,53	0,00417	552,43	0,37275	544,94	2,92582	534,92	0,60514
55	729,14	0,01236	559,5	2,21366	556,15	3,79225	553,74	8,10539
56	739,1	0,10474	572,32	4,30353	591,04	0,40308	561,93	5,47319
57	758,08	0,07987	584,63	0,28498	604,89	0,81664	584,18	0,04547
58	762,81	0,01057	584,96	0,87823	629,20	0,00577	590,18	0,08173
59	769,73	0,03261	599,93	0,73716	631,09	0,00294	628,71	0,01219
60	776,52	0,01400	606,94	0,09104	672,32	0,78584	628,84	0,00821
61	797,96	0,15951	626,84	0,01202	674,79	0,65377	629,74	0,00500
62	807,09	0,23369	628,13	0,01254	710,39	0,14960	630,10	0,00107
63	869,04	0,00141	629,09	0,00585	713,58	0,27777	641,75	0,05265
64	871,57	0,00043	629,78	0,03267	716,34	1,87661	652,89	0,00321
65	873,47	0,00247	697,32	0,02260	737,09	1,43523	698,27	0,37429
66	888,74	0,00050	701,1	0,06545	761,73	0,06746	710,05	0,03054
67	943,02	0,00044	708,41	0,94005	767,83	0,38213	711,90	1,53407
68	946,32	0,00036	712,26	0,53121	770,50	0,44160	712,30	0,27616
69	951,55	0,00491	713,26	0,63576	822,25	1,11175	712,69	0,45397
70	968,96	0,00129	713,68	0,37790	836,09	0,38450	715,07	0,09560
71	989,6	0,00026	717,8	1,82023	840,77	0,45105	731,51	7,47146
72	992,15	0,00008	735,36	0,70351	846,22	0,60974	732,23	1,05125
73	993,8	0,00114	737,93	1,53268	873,15	0,00845	734,35	0,22198
74	1010,51	0,00012	741,51	0,99945	876,25	0,01243	742,21	2,29982
75	1014,39	0,00055	761,33	0,64993	945,40	0,00608	756,17	0,30782
76	1014,6	0,00012	763,31	0,49404	949,64	0,02419	763,24	0,01362
77	1016,73	0,00066	764,11	0,61808	964,91	0,04509	766,61	0,13494
78	1017,1	0,00052	767,52	0,55377	967,75	0,05412	767,61	0,00033
79	1018,19	0,00107	771,19	0,37054	968,48	0,03509	769,90	0,01229
80	1018,71	0,00051	773,9	0,22043	971,05	0,01908	804,73	0,00011
81	1018,9	0,00041	802,05	0,71798	974,47	0,02933	838,82	0,75434
82	1031,16	0,00168	820,86	0,02408	979,04	0,03283	868,35	0,03424
83	1064,88	0,00090	861,98	0,73502	982,97	0,01461	872,18	0,01155
84	1065,58	0,00027	866,72	0,01515	991,68	0,00153	872,82	0,00359
85	1066,38	0,00020	874,85	0,02400	994,61	0,00375	873,20	0,01245
86	1067,08	0,00084	876,33	0,01222	1014,54	0,00413	875,30	0,00328
87	1092,08	0,00170	885,2	0,10537	1016,40	0,05241	875,71	0,00251
88	1116,94	0,00805	888,81	0,03824	1016,73	0,10994	880,32	0,09216
89	1118,11	0,00261	918,04	0,82490	1018,43	0,02169	946,10	0,00711
90	1119,48	0,01941	934,02	0,01192	1021,86	0,01345	946,25	0,00564
91	1121,74	0,00839	940,85	0,01061	1035,33	0,00615	947,84	0,00318
92	1134,5	0,03552	948,44	0,00456	1045,36	0,09017	948,02	0,00359
93	1138,08	0,00293	949,52	0,00081	1051,27	0,01071	983,31	0,00247
94	1147,65	0,01405	951,51	0,00543	1054,56	0,27664	985,62	0,01865
95	1148,1	0,15465	964,29	0,03512	1059,55	0,01220	989,67	0,00013
96	1190,32	0,08161	983,13	0,00183	1065,83	0,01252	989,82	0,00012
97	1195,88	0,00069	983,32	0,00828	1066,73	0,00875	991,40	0,00127
98	1196,59	0,00005	990,69	0,00021	1115,89	0,40671	991,58	0,00198
99	1196,76	0,00005	993,28	0,00251	1116,91	0,07833	998,20	0,01786
100	1197,72	0,00040	1003,59	0,00759	1119,06	0,27843	998,66	0,01515
101	1217,7	0,02196	1004,95	0,01080	1135,73	0,63891	1012,02	0,00312
102	1220,78	0,09410	1006,36	0,00871	1149,53	1,80663	1012,08	0,00282
103	1222,49	0,00705	1012,35	0,00096	1172,31	1,71762	1013,57	0,00023
104	1223,54	0,01245	1015,7	0,00196	1179,56	0,14270	1013,59	0,00244
105	1228,91	0,01184	1017,07	0,05382	1195,18	0,00211	1018,52	0,02316
106	1242,21	0,12504	1017,93	0,02370	1196,01	0,00106	1018,58	0,01893
107	1343,82	0,00090	1018,98	0,02774	1197,15	0,29328	1018,74	0,03296
108	1347,76	0,00569	1019,14	0,01334	1200,67	0,99195	1018,77	0,03946
109	1349,15	0,00079	1024,68	0,00665	1217,53	0,09514	1021,61	0,40892
110	1356,84	0,00335	1060,89	0,03082	1219,60	0,11514	1042,32	0,00024
111	1384,58	0,00067	1064,89	0,00792	1234,84	0,10019	1064,45	0,08664
112	1386,39	0,00024	1065,8	0,01597	1238,67	1,27728	1065,49	0,00057
113	1387,72	0,00170	1066,55	0,01509	1241,18	0,42556	1065,93	0,01654
114	1391,28	0,00056	1095,38	0,33709	1242,04	1,06181	1066,17	0,01764
115	1438,84	0,02091	1098,13	0,12452	1251,58	0,08375	1066,36	0,01625
116	1489,43	0,00618	1108,87	0,11878	1258,27	0,12703	1117,09	0,02241
117	1489,66	0,00335	1116,72	0,08831	1268,90	0,06793	1117,44	0,02742
118	1492,48	0,01705	1117,65	0,41689	1339,69	0,12488	1118,20	0,23249
119	1493,36	0,04651	1118,1	0,18902	1346,30	0,02754	1118,48	0,21436
120	1537,95	0,00327	1121,68	0,02627	1349,55	0,12180	1132,19	0,04129
121	1539,19	0,00405	1134,53	0,53571	1384,91	0,02089	1132,59	0,00428
122	1540,57	0,00264	1135,6	0,82164	1387,83	0,01697	1147,86	2,01016
123	1542,85	0,00472	1147,02	1,53204	1414,57	0,04903	1148,16	1,94090
124	1657,31	0,00113	1150,84	2,01969	1419,13	0,16029	1148,90	5,81779

125	1658,74	0,00020	1182,24	0,60637	1420,92	0,04220	1150,31	0,60607
126	1660,57	0,00043	1188,48	0,11446	1426,10	0,27693	1150,74	0,21477
127	1661,62	0,00087	1191,01	0,08920	1438,62	0,13906	1152,97	0,21765
128	1675,83	0,00091	1195,15	0,00206	1449,94	0,40527	1195,84	0,00073
129	1676,05	0,00121	1195,67	0,00347	1458,58	0,19688	1195,88	0,00083
130	1676,82	0,00236	1196,19	0,00180	1477,68	0,76674	1196,23	0,00064
131	1677,43	0,00178	1211,54	0,47547	1490,76	0,11389	1196,46	0,00072
132	3092,33	0,00054	1217,3	0,08033	1493,61	0,67954	1218,18	0,14638
133	3151,4	0,00011	1218,86	0,10976	1501,18	0,00612	1218,65	0,17299
134	3189,16	0,04611	1220,52	2,32518	1505,23	0,01623	1219,95	0,32179
135	3208,7	0,00244	1223,25	0,78446	1509,87	0,04438	1220,31	0,06839
136	3208,71	0,00067	1230,17	1,18186	1514,71	0,00965	1222,85	0,08244
137	3209,86	0,00109	1237,7	1,33623	1516,88	0,05899	1231,61	0,00411
138	3211,17	0,00125	1252,68	3,71574	1517,48	0,06031	1240,08	0,41979
139	3216,38	0,00172	1269,21	1,47562	1527,68	0,13684	1240,18	4,64196
140	3218	0,00324	1280,82	1,24051	1530,06	0,04707	1330,78	0,05885
141	3220,67	0,01343	1340,56	0,14601	1534,85	0,24659	1332,16	0,00363
142	3221,69	0,00925	1343,66	0,03025	1538,54	0,08082	1337,38	0,01192
143	3226,46	0,01046	1346,38	0,08763	1539,06	0,04239	1344,75	0,04118
144	3227,16	0,01308	1348,67	0,07381	1539,93	0,16875	1345,33	0,03462
145	3230,33	0,01018	1352,82	0,16528	1546,29	0,81236	1347,17	0,11623
146	3231,38	0,01653	1386,2	0,03533	1553,16	0,17908	1347,67	0,08755
147	3235,53	0,00249	1386,58	0,01112	1638,42	0,35927	1353,09	0,19455
148	3235,73	0,01442	1387,75	0,00639	1643,64	0,37077	1376,74	0,02397
149	3238,43	0,01837	1388,72	0,04616	1658,71	0,01187	1385,83	0,02930
150	3238,91	0,01830	1404,96	0,03232	1661,39	0,00788	1385,94	0,02501
151	3241,46	0,02531	1419,6	0,08297	1676,46	0,03439	1387,39	0,00638
152	3241,77	0,01129	1461,33	0,95721	1677,23	0,05897	1387,46	0,00246
153	3243,53	0,00985	1465,85	3,25486	3056,39	0,43786	1445,25	0,54443
154			1487,11	1,03078	3058,41	0,38759	1457,80	0,16485
155			1489,29	0,23817	3064,47	1,06476	1489,26	0,31437
156			1491,09	0,16482	3068,64	0,50540	1489,51	0,29591
157			1491,64	0,77319	3076,15	0,80554	1491,77	0,81718
158			1523,08	0,94500	3081,11	0,52340	1492,02	0,56222
159			1533,17	0,04408	3132,25	0,50436	1537,70	0,07627
160			1536,99	0,05841	3136,02	0,20878	1538,06	0,05410
161			1537,5	0,06726	3136,48	1,03837	1538,13	0,07603
162			1540,84	0,07287	3149,66	0,42954	1538,17	0,07024
163			1541,18	0,00806	3154,98	0,56033	1540,42	0,32625
164			1655,08	0,53487	3161,20	0,12851	1569,45	0,00856
165			1658,64	0,04830	3164,84	0,29323	1618,01	0,21936
166			1658,92	0,03383	3169,68	0,22590	1645,05	0,07311
167			1660,44	0,00727	3176,09	0,20799	1658,78	0,10147
168			1661,34	0,04278	3178,72	0,22358	1658,98	0,05232
169			1667,35	0,17708	3180,21	0,35796	1660,50	0,00978
170			1671,98	0,40512	3201,13	0,24996	1660,57	0,01687
171			1673,58	0,10678	3204,32	0,14817	1676,09	0,03021
172			1676,19	0,03565	3211,55	0,10688	1676,16	0,03058
173			1676,94	0,03305	3215,81	0,08987	1676,62	0,05386
174			1679,11	0,05366	3222,46	0,07111	1676,76	0,05282
175			1694,77	0,09389	3224,58	0,03441	1684,04	1,31870
176			3207,43	0,09933	3228,30	0,07792	1684,39	0,02082
177			3210	0,00805	3228,36	0,10971	3209,44	0,01910
178			3210,27	0,00382	3233,95	0,28070	3210,09	0,01921
179			3211,89	0,01159	3236,81	0,42622	3211,14	0,01083
180			3218,8	0,01203	3241,05	0,12641	3211,19	0,01040
181			3219,04	0,05868	3249,45	0,40592	3213,37	0,30289
182			3220,31	0,05461	3249,71	0,46110	3213,63	0,02507
183			3221,55	0,18033	3258,86	0,09870	3217,07	0,03459
184			3222,58	0,01157			3217,68	0,03319
185			3223,7	0,56070			3218,62	0,04688
186			3225,5	0,11457			3218,92	0,04923
187			3227,05	0,18914			3219,58	0,02156
188			3228,06	0,23592			3220,45	0,17973
189			3233,23	0,37585			3226,21	0,26653
190			3234,36	0,30248			3226,67	0,26010
191			3234,46	0,13023			3228,01	0,32824
192			3236,05	0,21242			3228,02	0,24273
193			3236,24	0,13695			3231,35	0,25438
194			3239,58	0,27763			3231,52	0,04797
195			3240,29	0,32340			3234,93	0,22138
196			3242,57	0,53185			3235,26	0,21206
197			3242,93	0,81299			3236,28	0,28747

198			3242,99	0,04428			3236,71	0,30591
199			3243,24	0,26259			3239,78	0,16156
200			3246,03	0,29399			3240,39	0,03450
201			3253,11	0,32420			3241,44	0,54339
202							3241,81	0,61487
203							3243,05	0,31288
204							3243,08	0,44324

Table S6. Orbital energies (DFT eigenvalues) for near fronties molecular orbitals of PO1-PO4 ligands.

PO1		PO2		PO3		PO4	
MO	E_{orb}, eV	MO	E_{orb}, eV	MO	E_{orb}, eV	MO	E_{orb}, eV
		HOMO-15	-8,44	HOMO-15	-9,25	HOMO-15	-8,19
		HOMO-14	-7,87	HOMO-14	-9,24	HOMO-14	-7,70
		HOMO-13	-7,81	HOMO-13	-9,16	HOMO-13	-7,70
		HOMO-12	-7,61	HOMO-12	-9,02	HOMO-12	-7,58
HOMO-11	-7,91	HOMO-11	-7,52	HOMO-11	-8,76	HOMO-11	-7,48
HOMO-10	-7,89	HOMO-10	-7,49	HOMO-10	-8,54	HOMO-10	-7,43
HOMO-9	-7,68	HOMO-9	-7,40	HOMO-9	-8,13	HOMO-9	-7,40
HOMO-8	-7,48	HOMO-8	-7,35	HOMO-8	-7,89	HOMO-8	-7,34
HOMO-7	-7,46	HOMO-7	-7,34	HOMO-7	-7,66	HOMO-7	-7,34
HOMO-6	-7,42	HOMO-6	-7,23	HOMO-6	-7,47	HOMO-6	-7,33
HOMO-5	-7,33	HOMO-5	-7,08	HOMO-5	-7,44	HOMO-5	-7,32
HOMO-4	-7,24	HOMO-4	-6,94	HOMO-4	-7,37	HOMO-4	-7,23
HOMO-3	-7,16	HOMO-3	-6,84	HOMO-3	-7,31	HOMO-3	-7,23
HOMO-2	-7,03	HOMO-2	-6,73	HOMO-2	-7,29	HOMO-2	-7,21
HOMO-1	-6,98	HOMO-1	-6,69	HOMO-1	-6,88	HOMO-1	-7,21
HOMO	**-6,92**	**HOMO**	**-6,56**	**HOMO**	**-6,84**	**HOMO**	**-6,69**
LUMO	**-0,92**	**LUMO**	**-1,30**	**LUMO**	**-1,26**	**LUMO**	**-1,35**
LUMO+1	-0,59	LUMO+1	-0,82	LUMO+1	-0,98	LUMO+1	-0,69
LUMO+2	-0,48	LUMO+2	-0,61	LUMO+2	-0,85	LUMO+2	-0,68
LUMO+3	-0,24	LUMO+3	-0,57	LUMO+3	-0,41	LUMO+3	-0,48
LUMO+4	-0,17	LUMO+4	-0,41	LUMO+4	-0,20	LUMO+4	-0,38
LUMO+5	0,03	LUMO+5	-0,26	LUMO+5	-0,10	LUMO+5	-0,31

LUMO+6	0,16	LUMO+6	-0,13			LUMO+6	-0,22
LUMO+7	0,31	LUMO+7	-0,02			LUMO+7	-0,10
		LUMO+8	0,08			LUMO+8	-0,07
		LUMO+9	0,25			LUMO+9	-0,05
		LUMO+10	0,53			LUMO+10	-0,04
		LUMO+11	0,78			LUMO+11	0,26