



Figure S21. UV-vis spectrum of toluene solution of **70-4-3** compound.

Additional references on the fullerene OPVs and crystal disorder modeling.

OPVs:

Ross, R. B.; Cardona, C. M.; Swain, F. B.; Guldi, D. M.; Sankaranarayanan, S. G.; Van Keuren, E.; Holloway, B. C.; Drees, M. *Adv. Functional Mater.* **2009**, *19*, 2332-2337.

Delgado, J. L.; Bouit, P. A.; Filippone, S.; Herranz, M. A.; Martin, N. *Chem. Commun.*, *46*, 4853-4865.

Po, R.; Maggini, M.; Camaioni, N. *J. Phys. Chem.C* **2010**, *114*, 695-706.

Ross, R. B.; Cardona, C. M.; Guldi, D. M.; Sankaranarayanan, S. G.; Reese, M. O.; Kopidakis, N.; Peet, J.; Walker, B.; Bazan, G. C.; Van Keuren, E.; Holloway, B. C.; Drees, M. *Nature Mater.* **2009**, *8*, 208-212.

Crystal disorder modeling:

Deya, A.; Metrangolo, P.; Pilati, T.; Resnati, G.; Terraneo, G.; Wlassics, I. *J. Fluorine Chem.* **2009**, *130*, 816-823