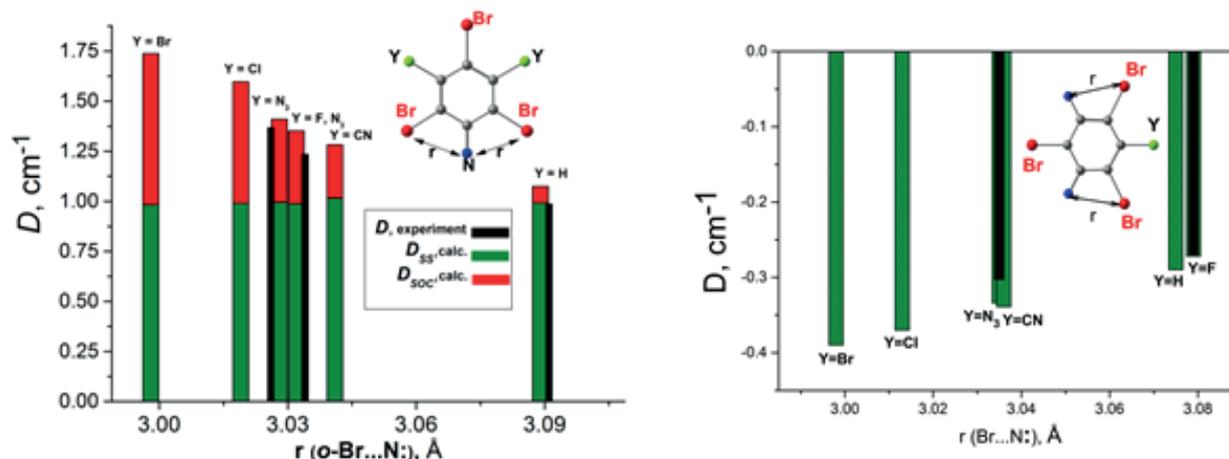


## СТЕРИЧЕСКОЕ ВЛИЯНИЕ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В ВЫСОКОСПИНОВЫХ ПОЛИБРОМФЕНИЛНИТРЕНАХ НА СПИН-ОРБИТАЛЬНЫЙ ВКЛАД В РАСЩЕПЛЕНИЕ В НУЛЕВОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Корчагин Д.В., Акимов А.В., Чапышев С.В., Мисочко Е.Я.

Институт проблем химической физики Российской Академии Наук,  
142432, Черноголовка, проспект Акад. Семенова, 1  
e-mail: korden@icp.ac.ru

Недавно мы сообщали о первых высокоспиновых арилнитренах с преобладающим спин-орбитальным вкладом в величину расщепления в нулевом магнитном поле  $D$ , обусловленным присутствием атомов брома (“эффект тяжелого атома”) <sup>1</sup>. Дальнейшее развитие этих работ показало, что в отличие от септетных ( $S=3$ ) и квинтетных ( $S=2$ ) полинитренов, “эффект тяжелого атома” в триплетных ( $S=1$ ) бром- и йодфенилнитренах не проявляется сам по себе <sup>2,3</sup>, но может быть модулирован некоторыми заместителями в фенильном кольце <sup>3,4</sup>.



В данной работе на экспериментальном и теоретическом уровне детально исследуется “эффект тяжелого атома” в ряду триплетных и квинтетных 2,4,6-трибромфенилнитренов. Установлена стерическая природа влияния заместителей Y на спин-орбитальный вклад ( $D_{SOC}$ ) в параметр  $D$ , выражающимся в сближении o-Br заместителей с нитреновым центром.

### Литература

- Misochko E. Ya., Akimov A. V., Masitov A. A., Korchagin D. V., Yakushchenko I. K., and Chapyshev S. V., J. Chem. Phys., 2012, 137, 064308.
- Sugisaki K., Toyota K., Sato K., Shiomi D., Kitagawa M., Takui T. Phys. Chem. Chem. Phys. 2014, 16, 9171.
- Korchagin D. V., Akimov A. V., Yureva E. A., Aldoshin S. M., Misochko E. Ya., Chem. Phys. Lett., 2016, 659, 234.
- Korchagin D. V., Akimov A. V., Savitsky A., Chapyshev S. V., Aldoshin S. M., Misochko E. Ya., J. Phys. Chem. A, 2018, 122, 8931.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-03-00644.