

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И СПЕКТРОВ ЭПР АНИОН-РАДИКАЛОВ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

В. В. Жильцов, В. М. Казакова

*Московская государственная академия тонкой химической технологии
имени М. В. Ломоносова*

Одной из важнейших задач современной физической химии является изучение строения радикалов и ион-радикалов. Общепринятым является подход, при котором экспериментальные результаты ЭПР-спектроскопии подтверждаются квантовомеханическими расчетами. С другой стороны моделирование спектров ЭПР часто требует проведения квантовохимических расчетов.

В работе приведены результаты расчета рядом квантовохимических методов анион-радикалов гетероциклических кремнийорганических соединений, включающих атом кремния в гетероцикл (производные силациклобутана и силаиндена) и их аналогов.

Моделирование спектров ЭПР проведено путем сравнения экспериментальных спектров и смоделированных на основе проведенных расчетов. Обсуждается влияние выбранного метода на адекватность моделирования спектров ЭПР.

Предложены модели распределения спиновой плотности в анион-радикалах орто-замещенных производных бензола с кремнийорганическим и непредельным заместителями.