

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ОБМЕННОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ОТНОСИТЕЛЬНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ
N,N'-ДИОКСИ-2,6-ДИАЗААДАМАНТАНОВОГО БИРАДИКАЛА ОТ
ПРИРОДЫ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В ОРГАНИЧЕСКОМ КАРКАСЕ**

Хафизов Н.Р.^а Маджидов Т.И.^а Кадкин О.Н.^б Антипин И.С.^а

^а Казанский Федеральный Университет, Химический институт им.

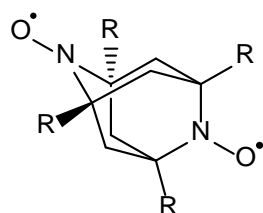
А.М. Бутлерова, 420008 г. Казань, ул. Кремлевская, д. 29/1

e-mail: nail-kh@yandex.ru.

^б Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, КазНЦ РАН, 420029 г.
Казань, ул. Сибирский тракт, д. 10/7

e-mail: oleg.kadkin@bk.ru.

Методом теории функционала плотности были проведены расчеты молекул бирадикалов на основе N,N'-диокси-2,6-диазаадамантанового каркаса с различными заместителями (см. рисунок) в базисе 6-311++G(2d,2p) с использованием UB3LYP функцио-



R = H, CH₃, C₂H₅, C₃H₇, CF₃, CCl₃,
CBr₃, CH₂Cl, CH₂Br, CH₂OH, OCH₃

N,N'-ДИОКСИ-2,6-ДИАЗААДАМАНТАНОВЫЙ
БИРАДИКАЛ.

налом. Обменное взаимодействие между спинами рассматривалось с применением подхода нарушенной сим-

метрии. Относительную стабильность бирадикалов оценивали по энергии образования связей O–H с атомом кислорода нитроксильного радикала. Результаты приведены в таблице.

Величины обменного параметра и относительные энергии образования связей OH (кДж/моль) на N,N'-диокси-2,6-диазаадамантановых бирадикалах

R	CH ₂ OH	H	CBr ₃	CCl ₃	CF ₃	CH ₃	C ₂ H ₅	C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₂ Cl	CH ₂ Br
<i>J</i> , см ⁻¹	14.19	11.87	11.65	9.26	7.33	6.56	5.22	4.43	0.33	-1.93	-2.35
<i>E</i> _{O-H}	-119	0	-146	-196	-211	-149	9	10	-186	-102	—

Значение параметра *J* зависит от донорно-акцепторных свойств заместителей и наличия специфических взаимодействий с N–O группами. Значения относительных стабильностей бирадикалов обсуждаются.