

# Inhaltsverzeichnis

	Seite
<b>1 Einleitung . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Definition . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Substanzen . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>1.3 Erzeugung . . . . .</b>	<b>2</b>
<b>1.4 Magnetische Eigenschaften . . . . .</b>	<b>2</b>
<b>1.5 Vorbemerkungen zu den Tabellen . . . . .</b>	<b>3</b>
<b>1.6 Symbole und Abkürzungen . . . . .</b>	<b>5</b>
<b>1.7 Literatur zu 1 . . . . .</b>	<b>5</b>
<b>1.7.1 Spin-Hamilton-Operator und Analyse von ESR-Spektren . . . . .</b>	<b>6</b>
<b>1.7.2 Theorie des <i>g</i>-Faktors . . . . .</b>	<b>6</b>
<b>1.7.3 Theorie der Aufspaltungsparameter . . . . .</b>	<b>6</b>
<b>1.7.4 Theorie der Linienbreiten und Relaxation . . . . .</b>	<b>7</b>
<b>1.7.5 Prinzipien der Spindichteberechnungen . . . . .</b>	<b>7</b>
<b>1.7.6 Monographien über ESR freier Radikale . . . . .</b>	<b>8</b>
<b>1.7.7 Zusammenfassende Berichte . . . . .</b>	<b>8</b>
<b>1.7.8 Übersichtsberichte . . . . .</b>	<b>8</b>
<b>2 Tabellen . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>2.1 Anorganische freie Radikale und Radikalionen. . . . .</b>	<b>9</b>
<b>2.1.1 ESR-Daten freier Atome . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>2.1.2 Neutrale anorganische freie Radikale . . . . .</b>	<b>13</b>
<b>2.1.3 Anorganische negative Radikalionen . . . . .</b>	<b>17</b>
<b>2.1.4 Anorganische positive Radikalionen . . . . .</b>	<b>20</b>
<b>2.2 Neutrale organische freie Radikale . . . . .</b>	<b>20</b>
<b>2.2.1 Kohlenstoffradikale . . . . .</b>	<b>20</b>
<b>2.2.1.1 <math>\sigma</math>-elektronische Kohlenstoffradikale . . . . .</b>	<b>20</b>
<b>2.2.1.2 Alkylradikale . . . . .</b>	<b>21</b>
<b>2.2.1.2.1 Alkylradikale vom Typ <math>\cdot\text{CH}_2-\text{R}</math>; <math>\text{R} \neq \text{H}</math>, <math>\text{R}=\text{H}</math> . . . . .</b>	<b>21</b>
<b>2.2.1.2.2 Alkylradikale vom Typ <math>\text{R}_1-\dot{\text{C}}-\text{R}_2</math>; <math>\text{R}_{1/2} \neq \text{H}</math> . . . . .</b>	<b>25</b>
<b>2.2.1.2.3 Alkylradikale vom Typ <math>\text{R}_1-\dot{\text{C}}-\text{R}_3</math>; <math>\text{R}_{1/2/3} \neq \text{H}</math> . . . . .</b>	<b>34</b>
<b><math>\text{R}_2</math></b>	
<b>2.2.1.3 Kohlenstoffradikale mit konjugierten <math>\pi</math>-Elektronensystemen . . . . .</b>	<b>39</b>
<b>2.2.1.4 Ketyle . . . . .</b>	<b>43</b>
<b>2.2.2 Stickstoffradikale . . . . .</b>	<b>45</b>
<b>2.2.2.1 Hydrazylradikale . . . . .</b>	<b>45</b>
<b>2.2.2.2 Andere Stickstoffradikale . . . . .</b>	<b>52</b>
<b>2.2.3 Stickoxidradikale . . . . .</b>	<b>54</b>
<b>2.2.4 Sauerstoffradikale. . . . .</b>	<b>57</b>
<b>2.2.4.1 Alkoxyradikale . . . . .</b>	<b>57</b>
<b>2.2.4.2 Nicht- und monosubstituierte Phenoxyle . . . . .</b>	<b>58</b>
<b>2.2.4.3 Disubstituierte Phenoxyde . . . . .</b>	<b>60</b>
<b>2.2.4.4 Tri- und tetrasubstituierte Phenoxyde . . . . .</b>	<b>61</b>
<b>2.2.4.4.1 2,6-Di-tert-butyl-4-(R)-substituierte Phenoxyde (<math>\text{R} \neq \text{H}</math>) . . . . .</b>	<b>61</b>
<b>2.2.4.4.2 Andere tri- und tetrasubstituierte Phenoxyde . . . . .</b>	<b>69</b>
<b>2.2.4.5 Andere Aryloxyradikale. . . . .</b>	<b>72</b>
<b>2.2.5 Thioradikale . . . . .</b>	<b>76</b>
<b>2.3 Organische negative Radikalionen . . . . .</b>	<b>77</b>
<b>2.3.1 Acyclische Verbindungen . . . . .</b>	<b>77</b>
<b>2.3.2 Isocyclische Verbindungen . . . . .</b>	<b>79</b>
<b>2.3.2.1 Alicyclische und halbaromatische Kohlenwasserstoffe . . . . .</b>	<b>79</b>
<b>2.3.2.2 Semichinone . . . . .</b>	<b>80</b>
<b>2.3.2.3 Benzol und Kohlenwasserstoff-substituierte Benzole . . . . .</b>	<b>84</b>
<b>2.3.2.4 Nitrobenzole . . . . .</b>	<b>86</b>
<b>2.3.2.4.A. Mononitrobenzole . . . . .</b>	<b>86</b>
<b>2.3.2.4.A.a Einfach substituierte Mononitrobenzole . . . . .</b>	<b>86</b>

## Table of contents

	page
<b>1 Introduction . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Definition . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Substances . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>1.3 Generation . . . . .</b>	<b>2</b>
<b>1.4 Magnetic properties . . . . .</b>	<b>2</b>
<b>1.5 Arrangement of the tables . . . . .</b>	<b>3</b>
<b>1.6 Symbols and abbreviations . . . . .</b>	<b>5</b>
<b>1.7 References for 1 . . . . .</b>	<b>5</b>
1.7.1 Spin-Hamiltonian and analysis of ESR-spectra . . . . .	6
1.7.2 Theory of <i>g</i> -factors . . . . .	6
1.7.3 Theory of splitting parameters . . . . .	6
1.7.4 Theory of line width and relaxation . . . . .	7
1.7.5 Principles of spin density calculations . . . . .	7
1.7.6 Monographs on ESR of free radicals . . . . .	8
1.7.7 Review articles . . . . .	8
1.7.8 Survey articles . . . . .	8
<b>2 Tables . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>2.1 Inorganic free radicals and radical ions . . . . .</b>	<b>9</b>
2.1.1 ESR-data of free atoms . . . . .	9
2.1.2 Uncharged inorganic free radicals . . . . .	13
2.1.3 Inorganic negative radical ions . . . . .	17
2.1.4 Inorganic positive radical ions . . . . .	20
<b>2.2 Uncharged organic free radicals . . . . .</b>	<b>20</b>
<b>2.2.1 Carbon radicals . . . . .</b>	<b>20</b>
2.2.1.1 $\sigma$ -electronic carbon radicals . . . . .	20
2.2.1.2 Alkylradicals . . . . .	21
2.2.1.2.1 Alkylradicals of type $\cdot\text{CH}_2-\text{R}$ , $\text{R} \neq \text{H}$ , $\text{R}=\text{H}$ . . . . .	21
2.2.1.2.2 Alkylradicals of type $\text{R}_1-\dot{\text{C}}-\text{R}_2$ , $\text{R}_{1/2} \neq \text{H}$ . . . . .	25
2.2.1.2.3 Alkylradicals of type $\text{R}_1-\dot{\text{C}}-\text{R}_3$ , $\text{R}_{1/2/3} \neq \text{H}$ . . . . .	34
$\text{R}_2$	
2.2.1.3 Carbon radicals with conjugated $\pi$ -electron systems . . . . .	39
2.2.1.4 Ketyl s . . . . .	43
2.2.2 Nitrogen radicals . . . . .	45
2.2.2.1 Hydrazylradicals . . . . .	45
2.2.2.2 Other nitrogen radicals . . . . .	52
2.2.3 Nitric oxide radicals . . . . .	54
2.2.4 Oxy radicals . . . . .	57
2.2.4.1 Alkoxy radicals . . . . .	57
2.2.4.2 Non- and mono-substituted phenoxy radicals . . . . .	58
2.2.4.3 Disubstituted phenoxy radicals . . . . .	60
2.2.4.4 Tri- and tetra-substituted phenoxy radicals . . . . .	61
2.2.4.4.1 2,6-Di-tert-butyl-4-(R) phenoxy radicals ( $\text{R} \neq \text{H}$ ) . . . . .	61
2.2.4.4.2 Other tri- and tetra-substituted phenoxy radicals . . . . .	69
2.2.4.5 Other aryloxy radicals . . . . .	73
2.2.5 Thio radicals . . . . .	76
<b>2.3 Organic negative radical ions . . . . .</b>	<b>77</b>
<b>2.3.1 Acyclic compounds . . . . .</b>	<b>77</b>
<b>2.3.2 Isocyclic compounds . . . . .</b>	<b>79</b>
2.3.2.1 Alicyclic and semiaromatic hydrocarbons . . . . .	79
2.3.2.2 Semiquinones . . . . .	80
2.3.2.3 Benzene and hydrocarbon substituted benzenes . . . . .	84
2.3.2.4 Nitrobenzenes . . . . .	86
2.3.2.4.A Mononitrobenzenes . . . . .	86
2.3.2.4.A.a Monosubstituted mononitrobenzenes . . . . .	86

	Seite
2.3.2.4.A.b Mehrfach substituierte Mononitrobenzole . . . . .	97
2.3.2.4.B Di- und Trinitrobenzole . . . . .	100
2.3.2.5 Nitril-, formyl-, acetyl-, silyl- und germyl-substituierte Benzole . . . . .	103
2.3.2.6 Nichtkondensierte polycyclische isocyclische Aromaten . . . . .	107
2.3.2.7 Kondensierte isocyclische Aromaten . . . . .	111
2.3.3 Heterocyclische Verbindungen . . . . .	113
2.3.3.1 Stickstoffheterocyclen . . . . .	113
2.3.3.2 Schwefel-, Sauerstoff-, Selenheterocyclen . . . . .	117
2.3.4 Organische Silicium-, Phosphor- und Borverbindungen . . . . .	120
2.4 Organische positive Radikalionen . . . . .	121
2.4.1 Acyclische Verbindungen . . . . .	121
2.4.2 Isocyclische Verbindungen . . . . .	121
2.4.2.1 Nichtkondensierte Aromaten . . . . .	121
2.4.2.2 Wurster's Blau und andere Aminiumverbindungen . . . . .	122
2.4.2.3 Kondensierte Aromaten . . . . .	123
2.4.3 Heterozyklische Verbindungen . . . . .	125
2.5 Organische Biradikale und organische Donator-Akzeptor-Komplexe . . . . .	128
3 Literaturverzeichnis zu 2 . . . . .	129
4 Weitere Literatur . . . . .	141
4.1 Literatur über Suszeptibilitätsmessungen an stabilen freien Radikalen . . . . .	141
4.2 Literatur über freie Radikale in bestrahlten niedermolekularen Verbindungen . . . . .	142
4.3 Literatur über freie Radikale in bestrahlten Polymeren . . . . .	144
4.4 Literatur über freie Radikale während der Polymerisation . . . . .	148
4.5 Literatur über freie Radikale, die bei elektrischer Entladung, mechanischem Abbau und Pyrolyse in organischen Verbindungen entstehen . . . . .	148
4.6 Literatur über paramagnetische Zentren in Polymeren mit konjugierten Doppelbindungen . .	149
4.7 Literatur über freie Radikale in biologischen Systemen . . . . .	150

	page
2.3.2.4.A.b Polysubstituted mononitrobenzenes . . . . .	97
2.3.2.4.B Di- and trinitrobenzenes . . . . .	100
2.3.2.5 Nitrile-, formyl-, acetyl-, silyl- and germyl-substituted benzenes . . . . .	103
2.3.2.6 Non condensed polycyclic isocyclic aromatic compounds . . . . .	107
2.3.2.7 Condensed isocyclic aromatic compounds . . . . .	111
2.3.3 Heterocyclic compounds . . . . .	113
2.3.3.1 Nitrogen heterocyclic compounds . . . . .	113
2.3.3.2 Sulfur, oxygen, and seleno heterocyclic compounds . . . . .	117
2.3.4 Organic compounds of silicon, phosphorus and boron . . . . .	120
2.4 Organic positive radical ions . . . . .	121
2.4.1 Acyclic compounds . . . . .	121
2.4.2 Isocyclic compounds . . . . .	121
2.4.2.1 Non condensed aromatic compounds . . . . .	121
2.4.2.2 Wurster's blue and other aminium compounds . . . . .	122
2.4.2.3 Condensed aromatic compounds . . . . .	123
2.4.3 Heterocyclic compounds . . . . .	125
2.5 Organic biradicals and organic donor-acceptor-complexes . . . . .	128
3 References for 2 . . . . .	129
4 Further references . . . . .	141
4.1 References on susceptibility measurements with stable free radicals . . . . .	141
4.2 References on free radicals in irradiated low molecular compounds . . . . .	142
4.3 References on free radicals in irradiated polymers . . . . .	144
4.4 References on free radicals during polymerization . . . . .	148
4.5 References on free radicals formed by electrical discharge, mechanical destruction and pyrolysis in organic compounds . . . . .	148
4.6 References on paramagnetic centers in polymers with conjugated double bonds . . . . .	149
4.7 References on free radicals in biological systems . . . . .	150