

## البحث السادس (بحث رقم 2 في قائمة الأبحاث محل تقييم اللجنة الموقرة)

<b>Title</b>	Geometrical control of the magnetic anisotropy in six coordinate cobalt complexes
	التحكم الهندسي في التباين المغناطيسي لمتراكبات الكوبالت السداسية
<b>Authors</b>	<b>Mohamed R. Saber</b> , Mukesh K. Singh and Kim R. Dunbar
<b>Journal Information</b>	<i>Chem. Commun.</i> , 2010
<b>ISSN</b>	1359-7345 (print) 1364-548X (web)
<b>Impact factor</b>	Q1 – 6.16(2020)

### الملخص العربي

الهندسة الجزيئية لأيونات الكوبالت في المتراكب (1)  $[\text{Co}(\text{MeCN})_6](\text{BF}_4)_2$  ذو البيئة التراكبية ثمانية الأوجه تم مقارنتها لتلك الموجودة في متراكب (2)  $[\text{CoTppy}]\text{PF}_6$ . ذو البيئة المنشورية لتبين اختلافات جوهرية في التباين المغناطيسي. كلا من القياسات العملية والحسابات الكمية ab initio CASSCF/NEVPT2 تدعم خصائص مغناطيس الجزء الواحد الموجودة في مركب 2 والذي يمتلك تباين محوري ( $B_0^2 = -150.5 \text{ cm}^{-1}$ ) مع درجة طفيفة من التباين العرضي وهو ما تم ارجاعه لجمود المركب المعطى. التباين العرضي القوي ( $B_0^2 = +148.9 \text{ cm}^{-1}$ ,  $B_2^2 = 44.5 \text{ cm}^{-1}$ ) في المتراكب 1 أدى الى اثر نفقى كبير نتيجة لطبيعة الجزء المعطى غير الثابتة في البيئة التناسقية الثمانية.