

Спектр ЭПР иона Fe^{3+} в бромкрезоловом зеленом ($\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$), особенности динамики молекул окружения

В. В. Чабаненко, В. Н. Васюков

*Физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: chaban@host.dipt.donetsk.ua*

Р. О. Кочканян, М. М. Нечитайлов

*Институт физико-органической химии и углекислоты им. Л. М. Литвиненко НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 70, г. Донецк, 83114, Украина*

Г. Шимчак, С. Пехота, А. Набялек

Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, al. Lotników 32/46, 02-668 Warsaw, Poland

Статья поступила в редакцию 9 апреля 2001 г., после переработки 18 сентября 2001 г.

В интервале температур 4,2–295 К исследован спектр ЭПР примесного иона Fe^{3+} в органическом веществе бромкрезоловом зеленом ($\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$). При температуре 4,2 К спектр представляет собой суперпозицию двух линий с эффективными g -факторами $g_1 = 4,39$ и $g_2 = 2,03$. При понижении температуры происходит перераспределение интенсивностей между линиями. При возрастании температуры интегральная интенсивность первой линии уменьшается, а второй — увеличивается. Вторая особенность температурного изменения спектра ЭПР иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ проявляется в экспоненциальном возрастании ширины второй резонансной линии при уменьшении температуры. Обнаруженные в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ свойства ЭПР спектра являются типичными для систем с многоминимумным потенциалом и позволяют охарактеризовать динамику молекул окружения магнитного иона.

В інтервалі температур 4,2–295 К досліджено спектр ЕПР домішкового іона Fe^{3+} в органічній речовині бромкрезоловому зеленому ($\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$). При температурі 4,2 К спектр є суперпозицією двох ліній з ефективними g -факторами $g_1 = 4,39$ та $g_2 = 2,03$. При зниженні температури виникає розподіл інтенсивностей між лініями. При зростанні температури інтегральна інтенсивність першої лінії зменшується, а другої — збільшується. Друга особливість температурного змінення спектра ЕПР іона Fe^{3+} у $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ проявляється в експоненціальному зростанні ширини другої резонансної лінії при зменшенні температури. Виявлені у $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ властивості ЕПР спектра є типовими для систем з багатомінімунним потенціалом і дозволяють схарактеризувати динаміку молекул оточення магнітного іона.

PACS: 76.30.Fc, **61.41.+e**, **61.43.-j**

В работах [1,2] обнаружена необычная температурная зависимость спектра ЭПР иона Fe^{3+} в металлоорганическом веществе $\text{Na}[\text{FeO}_6(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N})_3]$ и полианилине. В этих веществах спектр ЭПР пред-

ставляет собой суперпозицию двух линий. При уменьшении температуры интенсивность одной из них возрастает, а другой убывает так, что одна линия сильнее выражена в области низких (ге-

лиевых) температур, а другая — в области комнатных. Первая линия получила название низкотемпературной (НТ) составляющей спектра вещества, а другая — высокотемпературной (ВТ) [1,2]. Изменение температуры приводит к перераспределению интенсивности поглощения между НТ и ВТ составляющими спектра. Подобное поведение спектра ЭПР свидетельствует о необычной динамике молекул, окружающих ион Fe^{3+} , которая может оказать существенное влияние на различные свойства веществ.

Кроме того, отметим, что исследование таких динамических переходов имеет самостоятельное значение, поскольку системы, проявляющие данные свойства, как правило, являются системами с многомнимым потенциалом. Экспериментально такие системы изучены недостаточно полно. Они могут иметь различную физическую природу, но общим их свойством является движение в потенциальной яме с несколькими минимумами, разделенными потенциальным барьером. Наиболее изученной системой такого типа является янтеллеровский ион двухвалентной меди в октаэдрическом окружении [3].

Особенностями системы с многомнимым потенциалом в спектре ЭПР являются: 1) наличие НТ и ВТ составляющих спектра ЭПР, 2) перераспределение интенсивности между НТ и ВТ спектрами при изменении температуры.

Для иона Fe^{3+} эффект Яна–Теллера не проявляется. Причина температурного перехода в спектре ЭПР, согласно [1,2], связана с особенностями структуры магнитного центра и определяется динамикой молекул, окружающих магнитный ион. В работах [1,2] структура магнитных центров определена недостаточно полно. Это затрудняет построение модели, описывающей поведение магнитных центров. Для выявления определяющих особенностей магнитных центров необходимо исследование этих центров в других молекулярных веществах. В настоящей работе исследован спектр ЭПР магнитных центров в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$.

Изучение температурной зависимости спектра ЭПР примесного иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ представляет интерес в связи с проявлением эффекта температурного перехода от низкотемпературного искаженного состояния магнитного центра к высокотемпературному симметричному состоянию и возможностью более детально охарактеризовать особенности динамики ближайшего окружения иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$.

2. Экспериментальные результаты

Исследование спектра ЭПР выполнено на спектрометре с частотой СВЧ поля $\nu = (9,242 \pm 0,001)$ ГГц в интервале температур $T = 4,2\text{--}295$ К.

На рис. 1 приведены линии поглощения для температур 4,2; 10; 40; 295 К и их производные для комнатной и гелиевой температур. Линии поглощения (рис. 1,а) получены численным интегрированием экспериментально записанных линий (рис. 1,б). Как следует из этих данных, спектр ЭПР $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ при $T = 4,2$ К представляет собой суперпозицию двух резонансных линий.

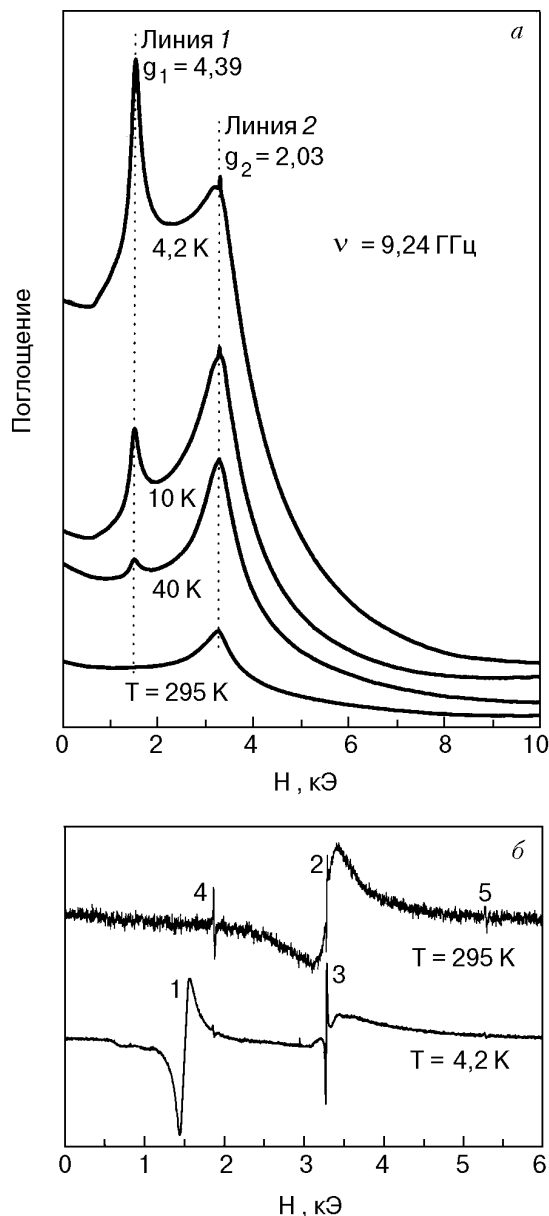


Рис. 1. Спектр ЭПР иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$: формы линий поглощения для температур $T = 4,2; 10; 40$ и 295 К (а); производные линий поглощения для $T = 4,2$ и 295 К (б). Линии 3, 4 и 5 использованы для калибровки магнитного поля.

Значение g -фактора линии 1 равно $g_1 = 4,39 \pm 0,03$. Вторая линия описывается g -фактором $g_2 = 2,08$. Понижение температуры приводит к перераспределению интенсивностей линий так, что при температуре 295 К остается только резонансная линия 2. При этой температуре она имеет g -фактор $g_2 = 2,03 \pm 0,02$ и ширину $\Delta H_{pp} = 0,31$ кЭ.

Три узкие ($\Delta H_{pp} \approx 15$ Э) резонансные линии 3, 4 и 5 спектра ЭПР на (рис. 1,б) использованы для калибровки магнитного поля и принадлежат магнитным центрам, которые не входят в структуру исследуемого вещества.

При изменении температуры g -факторы резонансных линий 1 и 2 спектра практически не изменяются (рис. 1). Анализ поведения температурных зависимостей интенсивности обеих линий обнаруживает необычные для механизма спин-решеточной релаксации изменения. Так, при увеличении температуры интенсивность резонансной линии 1 уменьшается вплоть до полного исчезно-

вления при $T = 295$ К. В то же время интенсивность линии 2, наоборот, увеличивается. При этом ширина линии 1 с ростом температуры незначительно увеличивается (см. рис. 2,а).

Для количественного анализа наблюдаемых особенностей (рис. 1,а) во всем изучаемом диапазоне температур проведено разложение наблюдаемых спектров поглощения на составляющие. Результаты этого разложения для двух крайних значений температур 4,2 и 295 К показаны на рис. 3. На рисунке можно выделить две резонансные линии 1 и 2 и нерезонансный «фон». Интенсивность «фона» и резонансных линий 1 и 2, а также их форма, вычислялись при условии минимального отклонения экспериментальной результирующей линии поглощения (пунктирные линии) от модельной теоретически рассчитанной линии поглощения.

Обычный механизм уширения резонансной линии спектра ЭПР, обусловленный релаксацион-

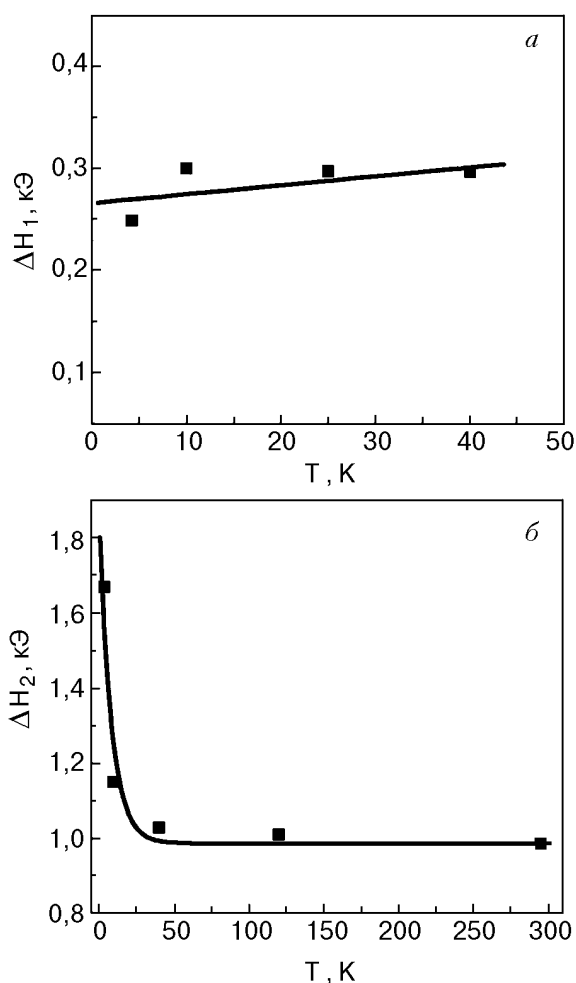


Рис. 2. Температурная зависимость ширины линий 1 (а) и 2 (б) на полувысоте.

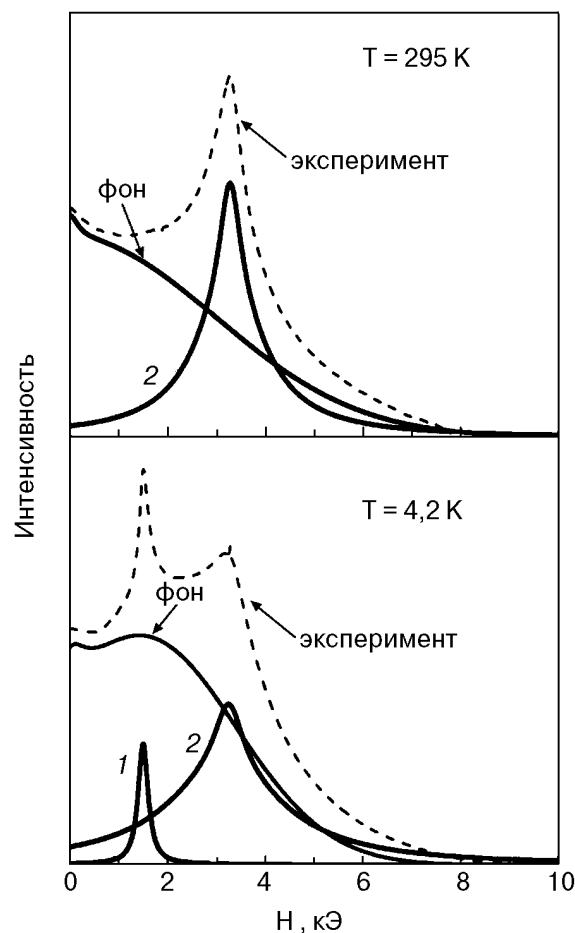


Рис. 3. Разложение результирующей линии поглощения спектра ЭПР иона Fe^{3+} в $C_{21}H_{14}Br_4O_5S$ (---) на составляющие резонансные линии 1 и 2 и нерезонансный «фон».

ными спин-решеточными процессами, приводит к возрастанию ширины линии и уменьшению пиковой интенсивности при увеличении температуры. Обнаруженное поведение линии 1 спектра (незначительное ($\approx 17\%$) уширение при понижении температуры) свидетельствует о том, что изменение ее интенсивности не связано с обычным релаксационным механизмом уширения резонансной линии.

Для объяснения наблюдаемых особенностей поглощения в исследуемом веществе рассмотрим модель, в которой температурное изменение спектра ЭПР иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ может быть описано двумя механизмами. Первый механизм приводит к обычному уменьшению интегральной интенсивности всех вкладов результирующей линии поглощения при увеличении температуры и определяется температурной зависимостью разности заселенностей резонансных состояний. Температурная зависимость суммарной интегральной интенсивности линии поглощения иона Fe^{3+} приведена на рис. 4,а. Интенсивность, представленная сплошной линией, описывается зависимостью $J(T) = J_0 \text{th}(h\nu/2kT)$.

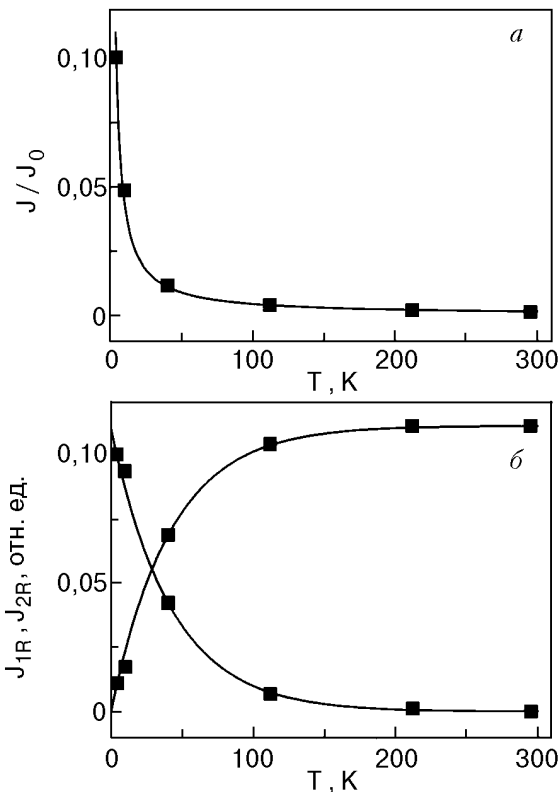


Рис. 4. Температурные зависимости суммарной интегральной интенсивности $J(T)/J_0 = \text{th}(h\nu/2kT)$ линий 1 и 2 (а) и относительных интегральных интенсивностей линий 1 (J_{1R}) и 2 (J_{2R}) (б); ■ — эксперимент, $J_{1R} = J_1/(J_1 + J_2)$; $J_{2R} = J_2/(J_1 + J_2) - 0,889$.

Второй механизм температурного изменения спектра ЭПР иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ определяет процесс перераспределения интегральной интенсивности между линиями 1 и 2 (см. рис. 4,б). На рисунке приведены температурные зависимости относительных интегральных интенсивностей первой J_{1R} и второй J_{2R} линий: $J_{1R} = J_1/(J_1 + J_2)$, $J_{2R} = J_2/(J_1 + J_2) - 0,889$. Эти зависимости могут быть аппроксимированы следующими соотношениями:

$$J_{1R} = 0,11(1 - e^{-E_0/kT}), \quad J_{2R} = 0,11 e^{-E_0/kT}, \quad (1)$$

где k — постоянная Больцмана, $E_0 = 15 \text{ см}^{-1}$ — эффективная энергия активации.

Кроме отмеченных выше особенностей температурного поведения интенсивностей резонансных линий 1 и 2, в спектре ЭПР иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ наблюдается необычное изменение ширины линии 2. Эта зависимость приведена на рис. 2,б и получена в результате численного разложения результирующей линии поглощения на составляющие. Видно, что ширина линии 2 на полувысоте экспоненциально возрастает при понижении температуры. Температурная зависимость ΔH_2 может быть аппроксимирована соотношением

$$\Delta H_2 = 0,986 + 0,498 e^{-(T-5)/8,14} \quad (2)$$

(сплошная линия на рис. 2,б).

Необычное поведение интенсивности резонансной линии 1 и ширины резонансной линии 2 спектра ЭПР дает основания полагать, что линии 1 и 2 взаимосвязаны. При высоких температурах наблюдается только линия 2, поэтому ее можно назвать «высокотемпературным» спектром магнитных центров иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$. Резонансная линия 1 появляется при понижении температуры и достигает максимальной интенсивности при температуре $T = 4,2 \text{ К}$, поэтому ее можно назвать «низкотемпературным» спектром ЭПР.

3. Обсуждение результатов

Спектр ЭПР, исследованный в настоящей работе, состоит из двух резонансных линий (рис. 1). Одна линия с эффективным g -фактором $g_1 \approx 4,3$, а другая — с $g_2 \approx 2$. Линии спектра ЭПР с такими g -факторами характерны для ионов Fe^{3+} в поликристаллическом веществе.

1. Резонансная линия с g_2 типична для многих магнитных центров, в том числе и для иона Fe^{3+} . Линия 1 с g_1 в отличие от линии 2 с g_2 является линией, характерной только для ионов со спином

$S = 5/2$. Так, например, резонансная линия с $g = 4,3$ была обнаружена в ряде работ [4–6] при исследовании спектра ЭПР иона железа в силикатных стеклах, в которых, как и в изученном нами поликристаллическом образце, нет дальнего порядка. Подробный анализ результатов исследования спектра ЭПР ионов железа в аморфных веществах приведен в [7]. В этой работе показано, что спектр, состоящий из двух резонансных линий с $g \approx 2$ и $g \approx 4,3$, принадлежит иону Fe^{3+} . Авторы [7] также предполагают, что резонансные линии с данными g -факторами могут относиться к разным магнитным центрам, которые отличаются величиной низкосимметричной компоненты кристаллического поля, действующего на магнитный ион. Линия с $g \approx 2$ соответствует центру, низкосимметричная компонента кристаллического поля которого много меньше энергии Зеемана. Линия с $g \approx 4,3$ соответствует центру, низкосимметричная компонента кристаллического поля которого много больше энергии Зеемана.

2. Процесс перехода от низкотемпературной формы спектра к высокотемпературной происходит не скачкообразно, а постепенно (рис. 1, *a* и 4, *б*). Поэтому структурные фазовые переходы не могут быть причиной такого температурного изменения интенсивности спектра ЭПР.

Следует отметить, что температурные изменения, представленные на рис. 1, не могут быть объяснены температурной зависимостью параметров начального расщепления D и E [2]. В этом случае спектр состоял бы из одной резонансной линии, которая при низких температурах совпадала бы с линией 1, а при повышении температуры плавно переходила бы в линию 2.

В обычной ситуации интенсивность резонансной линии ЭПР пропорциональна количеству магнитных ионов для данного перехода. Наблюдаемое же перераспределение интенсивностей линий 1 и 2 (рис. 1, *a* и 4, *б*) свидетельствует об изменении количества магнитных ионов, соответствующих различным центрам.

Анализ температурной зависимости спектра ЭПР, приведенной на рис. 1 и 4, и результаты [7] позволяют сделать вывод, что по крайней мере для части магнитных центров низкосимметричная компонента кристаллического поля, действующая на ион Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$, при низких температурах много больше энергии Зеемана, а при высоких, наоборот, много меньше.

Более правильно, по-видимому, трактовать описанные температурные изменения спектра ЭПР не как перемещение ионов Fe^{3+} из одной неэквивалентной позиции в другую, а как пере-

ход магнитного центра из одного состояния в другое.

3. Следует отдельно подчеркнуть наличие ряда характерных свойств исследованных магнитных центров: а) существование низкотемпературного низкосимметричного и высокотемпературного высокосимметричного состояний магнитных центров; б) наличие температурной области одновременного наблюдения спектра ЭПР обоих состояний; в) уменьшение с ростом температуры интенсивности низкотемпературной составляющей спектра и увеличение интенсивности высокотемпературной.

Описанное характерное поведение магнитных центров присуще системам с многомнимным потенциалом. Наиболее изученной системой с многомнимным потенциалом является ян-теллеровский ион двухвалентной меди в октаэдрическом кристаллическом окружении. Температурные изменения интенсивности спектров, соответствующих низкосимметричным и высокосимметричным состояниям, для таких систем обычно описывают с помощью модели «динамического усреднения» [8]. Согласно этой модели, спектр и деформации усредняются в результате быстрых «перескоков» системы из одной потенциальной ямы в другую. Этот механизм динамического усреднения деформаций описан во многих работах.

Совпадение температурных изменений спектра ЭПР иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ с аналогичными температурными изменениями спектра ЭПР хорошо изученной системы с многомнимным потенциалом дают основание предполагать, что молекулы окружения иона Fe^{3+} в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ имеют несколько эквивалентных по энергии деформаций, соответствующих низкой симметрии окружения иона Fe^{3+} . В этом случае причиной необычного температурного изменения спектра является особенность динамики молекул, окружающих ион Fe^{3+} .

При этом следует отметить, что Fe^{3+} является S -ионом и проявление эффекта Яна–Теллера в обычном понимании для данного иона маловероятно. Однако многомнимная система в $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ возможна. Природа этой системы, по-видимому, аналогична описанной в работе [9] и наблюдающейся в спектре ЭПР иона Fe^{3+} в полипарафенилене. Согласно [9], ион Fe^{3+} имеет стационарное положение между двумя ароматическими фрагментами соседних молекул полипарафенилена. Расчет энергии магнитного центра, проведенный в [9], показывает, что при определенном значении расстояния между ароматическими фрагментами стационарное положение иона Fe^{3+}

расположено не в центре, а смещено к одному из фрагментов. Если ароматические фрагменты эквивалентны, то магнитный ион имеет два стационарных положения, которые разделены потенциальным барьером.

В рамках системы с многомимумным потенциалом удастся объяснить необычную температурную зависимость интенсивности резонансной линии 1 (рис. 1) спектра ЭПР, необычное поведение ширины резонансной линии 2 (рис. 2,б) и ряд других особенностей температурного изменения спектра. Физическая картина происходящих при этом явлений может состоять в следующем.

При гелиевой температуре молекулы окружения «заморожены» на дне потенциальных ям, соответствующих наибольшей величине низкосимметричной компоненты кристаллического поля. При этом анизотропия электрического поля максимальна и поэтому наблюдается резонансная линия 1. При повышении температуры часть магнитных центров переходит возбужденные вибронные состояния. Возбужденные состояния систем с многомимумным потенциалом, как правило, менее анизотропны, чем основные [3]. Надбарьерные состояния (состояния, энергия которых больше высоты барьера, разделяющего потенциальные ямы [3]) наименее анизотропны. Заселение надбарьерных состояний увеличивает вклад в резонансную линию 2 спектра ЭПР (рис. 1,а и 4,б). Увеличение количества магнитных центров, находящихся в возбужденном состоянии, приводит к уменьшению количества магнитных центров в основном состоянии. Это обстоятельство является причиной уменьшения интенсивности резонансной линии 1 при увеличении температуры (см. рис. 1,а и 4,б).

Необычная температурная зависимость ширины резонансной линии 2 (рис. 2,б) связана с распределением магнитных центров по возбужденным состояниям. Чем выше энергия возбужденного состояния, тем меньше магнитный ион чувствует низкосимметричное электрическое поле. Если энергия возбуждения больше высоты барьера между потенциальными ямами (надбарьерные состояния), влияние этой компоненты становится минимальным или равным нулю.

При высоких температурах большая часть магнитных центров находится в надбарьерных состояниях. Спектр ЭПР этих центров определяется g -фактором перехода $+1/2 \leftrightarrow -1/2$. Значение g -фактора резонансной линии, соответствующей этому переходу, близко к значению $g = 2,0$. При этом ширина резонансной линии вклада этого пере-

хода относительно невелика и составляет $\Delta H_2 = 0,986$ кЭ (см. рис. 2,б).

При низких температурах значительная часть магнитных центров находится в подбарьерных возбужденных состояниях. Чем меньше энергия возбуждения, тем больше влияние низкосимметричной компоненты электрического поля и тем дальше расположены резонансные линии переходов $\pm 5/2 \leftrightarrow \pm 3/2$ от линии перехода $+1/2 \leftrightarrow -1/2$. В результате ориентационного усреднения по направлениям осей симметрии вклад переходов $\pm 5/2 \leftrightarrow \pm 3/2$ и $\pm 3/2 \leftrightarrow \pm 1/2$ в области низких температур приведет к уширению резонансной линии 2. Чем ниже температура, тем больше вклад в линию 2 подбарьерных возбужденных состояний по сравнению с надбарьерными. Это является причиной уширения резонансной линии 2 при уменьшении температуры.

Следует отметить, что описанный механизм температурного изменения спектра ЭПР в чистом виде должен приводить к полному исчезновению линии 2 при низких температурах. Именно такое изменение наблюдалось в [1]. Для $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{Br}_4\text{O}_5\text{S}$ наблюдается подобное перераспределение энергии. Однако даже при $T = 4,2$ К линия 2 имеет еще значительную интенсивность. По-видимому, это связано с наличием статического распределения деформаций молекулярного окружения магнитного иона, которое, как и в [9], приводит к возникновению магнитных центров двух типов: симметричного центра, который дает вклад в линию 2, и несимметричного, для которого проявляются свойства моногимумной системы.

4. Заключение

Исследования резонансных линий СВЧ поглощения примесных ионов Fe^{3+} в бромкрезоловом зеленом позволили охарактеризовать динамику молекул этого вещества. Показано, что в рамках предложенной модели динамических переходов удастся объяснить температурное изменение спектров ЭПР ряда молекулярных веществ, общим свойством которых является наличие физических систем с многомимумным потенциалом.

1. В. П. Дьяконов, В. Н. Васюков, В. А. Шаповалов, Е. И. Аксиментьева, Г. Шимчак, С. Пехота, *ФТВД* **8**, 60 (1998).
2. В. Н. Васюков, В. П. Дьяконов, В. Шаповалов, Е. И. Аксиментьева, Н. Szymczak, S. Pichota, *ФНТ* **26**, 363 (2000).
3. В. Н. Васюков, Б. Я. Сухаревский, *ФНТ* **20**, 821 (1994).

4. T. Castner, G. S. Newell, W. C. Holton, and C. P. Slechter, *J. Chem. Phys.* **32**, 668 (1960).
5. E. Burzo, M. Chipara, D. Ungur, and I. Ardelean, *Phys. Status Solidi* **B124**, K117 (1984).
6. R. Sing, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **17**, 157 (1984).
7. Я. Г. Клява, *ЭПР-спектроскопия неупорядоченных твердых тел*, Знание, Рига (1988).
8. А. Абрагам, Б. Блини, *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, Мир, Москва (1973), т. 2.
9. V. N. Vasyukov, V. A. Shapovalov, V. P. Dyakonov, A. F. Dmitruk, E. I. Aksimentjeva, H. Szymczak, and S. Piechota, *Investigation of Structure of Fe³⁺ Magnetic Center in Polyparaphenylene*, III Всероссий. школа-семинар по квантовой и вычислительной химии им. В. А. Фока, В. Новгород, 21–25 мая 2001 г., стр. 39.

The EPR spectrum of a Fe³⁺ ion in bromcresol green (C₂₁H₁₄Br₄O₅S); the features in the dynamics of surrounding molecules

V. V. Chabanenko, V. N. Vasyukov,
R. O. Kochkanjan, M. M. Nechitailov,
G. Szymczak, S. Piechota, and A. Nabjalek

The EPR spectrum of an impurity Fe³⁺ ion in the organic bromcresol green (C₂₁H₁₄Br₄O₅S) has been investigated in the temperature range $T = 4.2\text{--}295$ K. For $T = 4.2$ K the spectrum is a superposition of two lines with effective g -factors $g_1 = 4.39$ and $g_2 = 2.03$. As the temperature is decreased the intensities is redistributed between the lines. The integral intensity of line 1 decreases and the intensity of line 2 increases with increasing temperature. The second feature of the temperature change of the EPR spectrum of the ion Fe³⁺ in C₂₁H₁₄Br₄O₅S is an exponential increase of width of resonance line 2 with decreasing of temperature. The properties of the EPR spectrum observed in C₂₁H₁₄Br₄O₅S are typical of systems with a multiminimum potential and permit the molecular dynamics of a surrounded magnetic ion to be characterized.