

Design, synthesis and magneto-structural analysis of Cu(II)-coordination networks sustained by N—H···O and O—H···O hydrogen bond

Autorzy

Archana Yadav

Alina Bieńko

Dariusz C. Bieńko

Daria Wojtala

Kafeel Ahmad Siddiqui

Rok wydania

2022

Czasopismo

Polyhedron

Numer woluminu

222

Strony

115892/1-115892/10

DOI

10.1016/j.poly.2022.115892

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Two new coordination network based on mixed ligands, orotic acid potassium salt with 1,3-Di(4-pyridyl)propane (dpp) and malonic acid at room temperature were synthesized as $[\text{Cu}_2(\text{dpp})(\text{HOr})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]_n$ (**1**) and $[\text{Cu}(\text{HOr})(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ (**2**) respectively. To strategically design and synthesize Cu(II)-coordination networks where N—H···O and O—H···O hydrogen bonds act as connecting tools in the construction of three dimensional networks have been discussed. The both complexes have been characterized by single crystal X-ray analysis, elemental analysis, magneto-structural study along with EPR study. The magnetic data reveals that the complex **1** shows antiferromagnetic exchange interactions while complex **2** shows ferromagnetic exchange interaction through {···HNCO} dimer. The DFT calculation and HOMO/LUMO molecular orbitals analysis is used to rationalized the magnetic behavior in these coordination polymers.

Słowa kluczowe

Crystal Engineering, Magnetic exchange interactions, Nsingle bondH···O/Osingle bondH···O supramolecular synthon, Metal- orotate coordination polymers, DFT calculation

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1016/j.poly.2022.115892>

Strona internetowa wydawcy

<http://www.elsevier.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-25 23:07:55

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/6E-zVZ7>.