

Structural diversity of crystalline copper(II) / L-arginine compounds by bromide as ligand and/or counterions– X-ray, spectroscopic, and theoretical studies

Autorzy

Agnieszka Wojciechowska

Anna Gągor

Magdalena Rowińska

Mostafa A. El-Naggar

Saied M. Soliman

Katarzyna Helios

Konrad Cyprych

Adam Szukalski

Marcin Sarewicz

Julia Jezierska

Rok wydania

2026

Czasopismo

Journal of Molecular
Structure

Numer woluminu

1374

Strony

146784/1-146784/12

DOI

10.1016/j.molstruc.2026.146784

Kolekcja

Naukowa

Streszczenie

Two novel copper(II) L-argininato coordination compounds: *trans*-[Cu(L-Arg)₂(H₂O)₂]Br₂·2H₂O (**1**) and [Cu(L-Arg)(phen)Br]Br·1.5H₂O (**2**) (where L-Arg = L-arginine and phen = 1,10-phenanthroline) were synthesized and comprehensively investigated to clarify the impact of the bromide, acting as two counterions in **1** and as both a counterion and a ligand in **2**, on the self-organization and molecular and electronic structures. Data on the crystal, molecular and electronic structures of compounds **1** and **2** were obtained via X-ray diffraction. These results formed the basis for the subsequent theoretical characterization of intramolecular interactions via electron density distribution in metal-ligand bonds using the atoms in molecules (AIM) method, and characterization of intermolecular interactions via Hirshfeld surface analysis (HAS). Additionally, the charge on copper(II) ions modified by electron transfer from ligands was determined using the natural bond orbitals (NBO). Furthermore, the following spectroscopic techniques were applied to establish correlations between molecular and electronic structures: FT-IR, Raman, NIR-VIS-UV, X- and Q-band EPR, and fluorescence.

Słowa kluczowe

Copper(II) complexes, L-arginine, Bromide ions, X-ray crystal structure, spectroscopy

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

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.molstruc.2026.146784>

Strona internetowa wydawcy

<http://www.elsevier.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-25 06:55:29

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/Hqpt_FT.