

## Thiocyanate copper complexes with pyrazole-derived ligands : synthesis, crystal structures, DFT calculations and magnetic properties.

### Autorzy

Anna Świtlicka

K. Czerwińska

Barbara Machura

Mateusz Penkala

Alina Bieńko

Dariusz Bieńko

Wiktor Zierkiewicz

### Rok wydania

2016

### Czasopismo

CrystEngComm

### Numer woluminu

18

### Strony

9042-9055

### DOI

10.1039/c6ce01739h

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Angielski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

This paper presents the synthesis, X-ray studies, spectroscopic characterization and variable temperature magnetic investigations and DFT calculation of four novel thiocyanato Cu(II) compounds  $[\text{Cu}(\text{mpz})_2(\text{NCS})_2]_n \cdot n\text{H}_2\text{O}$  (**1**),  $\{[\text{Cu}_2(\text{dmpz})_4(\text{NCS})_4][\text{Cu}(\text{dmpz})(\text{NCS})_2]\}_n \cdot 2n\text{MeOH}$  (**2**)  $[(\text{bdmpzm})\text{Cu}^{\text{II}}(\text{SCN})_2(\mu_{1,3}\text{-SCN})\text{Cu}^{\text{I}}(\text{bdmpzm})]_n$  (**3**) and  $[\text{Cu}(\text{bpzpy})(\text{NCS})_2]$  (**4**). Three of them (**1**, **2** and **3**) display one-dimensional coordination structures while complex (**4**), incorporating a tridentate N-donor ligand, possesses a 0D molecular structure. Complex **3** belongs to a relatively rare group of mixed-valence  $\text{Cu}^{\text{II}}/\text{Cu}^{\text{I}}$  coordination polymers.

### Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1039/c6ce01739h>

### Strona internetowa wydawcy

<https://www.rsc.org/>

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/IX0BEf0>.