

双大环配体与铜双核配合物的合成、晶体结构和磁偶合性质

卜显和,陈巍,张若桦,陈荣悌

南开大学化学系,天津(300071)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 由新型双功能配体2,6-双(1,5,9-三氮杂环十二烷)-2,6-二甲基苯甲酸(L)与溴化铜在甲醇中反应得到新型铜双核配合物 $[\text{Cu}_2\text{LBr}_2]\text{Br}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ 单晶。晶体结构分析表明:2个Cu(II)中心离子由配体L中的羧基团桥联;2个等价的Cu(II)中心离子均由双功能配体L的1,5,9-三氮杂环十二烷([12aneN<sub>3</sub>])的3个氮原子和羧酸的1个氧原子及1个Br<sup>-</sup>离子配位,并都处在三角双锥的配位环境中;分子内Cu...Cu双核间的距离为0.5884(6)nm。变温磁化率数据表明:在同一分子中的2个铜核之间存在反铁磁偶合作用( $J=-22.49\text{cm}^{-1}$ )。

**关键词** [铜络合物](#) [双核络合物](#) [晶体结构](#) [反铁磁性](#) [氮杂环化合物](#) [苯甲酸P](#)

分类号 [0611.662](#)

### Synthesis, crystal structure and magnetic properties of a new dicopper(II) complex with a bis (macrocyclic) ligand

Bu Xianhe, Chen Wei, Zhang Ruohua, Chen Rongti

Nankai Univ, Dept Chem, Tianjin(300071)

**Abstract** A new binuclear copper(II) complex,  $[\text{Cu}_2\text{LBr}_2]\text{Br}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ , where L is a new binucleating macrocyclic ligand 2,6-bis(1,5,9-triazacyclododecan-9-ylmethyl) benzoate, has been prepared and characterized by X-ray crystallography. Crystal data: monoclinic, space group  $P2_1/c$ ,  $a=1.1666(2)$ ,  $b=1.3541(3)$ ,  $c=2.2750(5)\text{nm}$ ,  $\beta=99.38(3)^\circ$ ,  $Z=4$ . The binuclear copper(II) center ions are bridged by a  $\mu$ -carboxyl group of L and separated by 0.5884nm. Both of the copper(II) ion centers are coordinated by three amine nitrogens of [12]aneN<sub>3</sub> subunit and one oxygen of the carboxyl group, as well as one bromide ion. The copper(II) ion is in the trigonal bipyramid environment. Variable temperature magnetic susceptibility studies indicate that there exists intramolecular antiferro-magnetic coupling ( $J=-22.49\text{cm}^{-1}$ ) between the two copper(II) centers.

**Key words** [COPPER COMPLEX](#) [DINUCLEAR COMPLEX](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [ANTIFERROMAGNETISM](#) [NITROGEN HETEROCYCLICS](#) [BENZENECARBOXYLIC ACID P](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(557KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“铜络合物”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [卜显和](#)

· [陈巍](#)

· [张若桦](#)

· [陈荣悌](#)