

سنتر و ساختار بلوری ترکیب آدنینیوم بیس (پیریدین-۲،۶-دیکربوکسیلاتو) کرومات (III)، پیریدین-۲،۶-دیکربوکسیلیک اسید تتراهیدرات

ماکان اتفاق^۱، زانت سلیمان نژاد^{*}، سیما صدقی نیا^۱، کلودیا گرافی^۳

۱- دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، تهران

۲- دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

۳- دانشکده شیمی، علوم زیستی و پایداری زیست محیطی، دانشگاه پارما، ایتالیا

(دریافت مقاله: ۹۷/۵/۱۰، نسخه نهایی: ۹۷/۸/۹)

چکیده: در این پژوهش، ترکیب سوپرامولکولی جدید آدنینیوم بیس(پیریدین-۲،۶-دیکربوکسیلاتو) کرومات (III) پیریدین-۲،۶-دیکربوکسیلیک اسید تراهیدرات $O\text{H}_2\text{pydc}(\text{AdH}^+)[\text{Cr}(\text{pydc})_2](\text{H}_2\text{pydc})\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (۱) که Ad و H_2pydc به ترتیب لیگاندهای آدنین و پیریدین-۲،۶-دیکربوکسیلیک اسید هستند، به روش انتقال پروتون سنتر و ساختار بلوری آن به وسیله‌ی تکنیک بلورشناسی با پرتو X تعیین شد. این ترکیب در سیستم بلوری راستگوشی و گروه فضایی $Pbca$ متبلور شده است و پارامترهای یاخته یکه آن (۱۴) است. مقدار R نهایی برای ۲۵۲۳ بازتاب مستقل $0\cdot ۰۵۳$ (۱۲)، $a=۱۴\cdot ۱۸۰$ ، $b=۱۳\cdot ۰۳۶$ (۳)، $c=۳۳\cdot ۹۸$ درجه هستند. آنگستروم و زوايا ۹۰ در ترکیب (III) در ترکیب مورد بررسی دارای آرایش هشت وجهی انحراف یافته در نتیجه اتصال سه دندانه دو لیگاند پیریدین-۲،۶-دیکربوکسیلات به فلز مرکزی است. وجود برهمنکنش‌های بین‌مولکولی و غیرکووالانسی باعث ایجاد ساختارهای خود انباشته منسجم می‌شود. پیوندهای هیدروژنی و انباشتگی $\text{C}=\text{O}\dots \pi$ از جمله برهمنکنش‌های بین‌مولکولی هستند که موجب تشکیل ترکیب سوپرامولکولی بررسی شده‌اند.

واژه‌های کلیدی: سوپرامولکولی؛ ترکیب‌های انتقال پروتون؛ آدنین؛ پیوندهای هیدروژنی؛ انباشتگی $\text{C}=\text{O}\dots \pi$.

خودبه‌خودی ساختارهای مولکولی (مانند انباشت تکلايهها در تشکیل غشاء تشخیص مولکولی، پیوند پیش ماده به پروتئین‌ها، برهمکنش پروتئین-DNA، برهمکنش پادتن-پادگن) توسط نیروهای بین مولکولی به نسبت ضعیف مانند پیوند هیدروژنی، برهمکنش واندروالس، آبگریز-آبدوست، نیروهای یونی و برهمکنش‌های $\pi-\pi$ است [۵].

DNA در ساختار خود دارای دو نوکلئوباز پیریمیدینی به نامهای سیتوزین و تیمین و دو نوکلئوباز پورینی به نامهای آدنین و گوانین است. این نوکلئوبازها نقش مهمی را در

مقدمه
شیمی سوپرامولکولی شاخه‌ای از علم شیمی است که فراتر از ابعاد مولکولی به بررسی سیستم‌های شیمیایی برآمده از انباشت‌های بین‌مولکولی می‌پردازد. در ابعاد مولکولی، اتم‌ها با برقراری پیوندهای کووالانسی باعث بوجود آمدن مولکول‌ها می‌شوند در حالی که شیمی سوپرامولکولی توصیف‌کننده ترکیباتی است که مولکول‌ها در اثر انباشت با برقراری برهمکنش‌های غیرکووالانسی (بین‌مولکولی) در کنار یکدیگر چیده می‌شوند [۱-۴]. به عبارتی، شیمی سوپرامولکولی مربوط به انباشت

*نویسنده مسئول، تلفن: +۹۸۲۱۶۶۴۹۵۲۹۱، پست الکترونیکی: janet_soleimannejad@khayam.ut.ac.ir

نیتروژن (N1, N3, N6, N7 و N9) خود به فلز کثوردینه شود، اما در این مورد نیتروژن ایمیدازولی N9 ارجحیت دارد. اگر به یک گروه آلکیل و یا ریبوزیل متصل شده باشد، کوئوردینه آدنین به فلز از طریق N7 صورت می‌گیرد و اگر این نیتروژن نیز در گیر پیوند با گروههای دیگر باشد آنگاه نیتروژن‌های پس از آن به فلز کثوردینه می‌شوند [۸].

مواد و دستگاهها

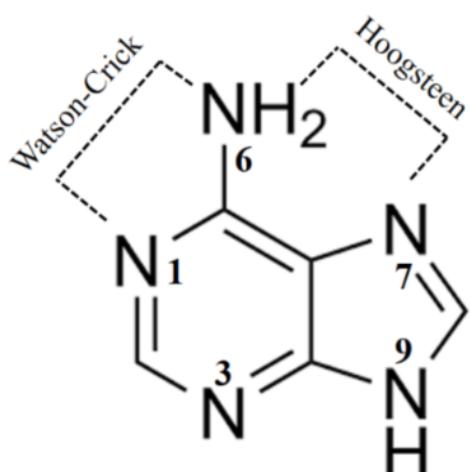
همه مواد استفاده شده در این پژوهش با خلوص تجزیه‌ای از شرکت مرک خریداری شده و بدون خالص سازی بیشتر به کار رفتند. تجزیه عنصری اتمهای کربن (C)، هیدروژن (H) و نیتروژن (N) با روش CHNS و دستگاه Thermo Finnigan Flash EA 1112 انجام شد و طیف تبدیل فوریه فروسخ (FT-IR) ترکیب مورد بررسی با دستگاه Bruker Tensor 27 ثبت گردید. داده‌های پراش پرتو X تک بلور با دستگاه پراش سنج (Mo- $\text{k}\alpha$) در دمای اتاق (با پرتو Bruker APEX II) در گستره طول موج $4000\text{--}600\text{ cm}^{-1}$ با قرص KBr ثبت گردید. داده‌های پراش پرتو X تک بلور با دستگاه پراش سنج (با پرتو F^2 با نرم افزار SHELXL-2014/7) برآش شد [۹]. برای تهیه تصاویر از نرم افزار مرکوری استفاده شده است [۱۰].

فایل اطلاعات بلورشناسی (cif) در مرکز داده‌های بلورشناسی کمبریج با کد ۱۸۹۳۱۱۴ به ثبت رسیده www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving از طریق آدرس .html قابل دریافت است.

فرآیندهای زیستی، فعالیت‌های سوخت و سازی و سیگنال‌های گسیل شده از سلول‌ها ایفا می‌کنند [۶]. نوکلئوبازها دارای توانایی برقراری برهمنش‌های متنوع غیرکووالان از قبیل پیوندهای هیدروژنی و برهمنش‌های $\pi-\pi$ هستند. این برهمنش‌ها نه تنها سبب پایداری، بلکه منجر به قابلیت ویژه‌ای در DNA می‌شود که DNA می‌تواند به عنوان یک الگو اطلاعات زننده‌ای را در خود ذخیره کند.

آدنین دارای گروه آمینی خارج حلقه پیریمیدینی و چهار نیتروژن به ترتیب در حلقه‌های پیریمیدین (دو نیتروژن) و ایمیدازولی (دو نیتروژن) در ساختار خود است (شکل ۱). پایداری و شکل‌های مختلف توتومری آدنین به عواملی چون pH، دما و حضور یون‌های فلزی بستگی دارد. ترکیب‌هایی مانند آدنین که دارای حلقه نامتجانس هستند به طور طبیعی دارای توانایی برقراری پیوندهای کثوردیناسیونی با فلزهای مختلف و به عبارتی نشان دهنده برهمنش میان فلز و نوکلئیک اسیدها نیز خواهد بود [۷]. شیمی کثوردیناسیون آدنین (به هر صورتی شامل آنیون تک ظرفیتی آدنین، آدنین طبیعی، کاتیون تک ظرفیتی آدنین و کاتیون دو ظرفیتی آدنین) به ویژه از وقتی که مشخص شد که این حلقه پورینی در ساختار DNA وجود دارد، مورد توجه قرار گرفته است. افزون بر این، آدنین ممکن است در ساختار داروهای ضد سرطان که حاوی پلاتین و یا دیگر فلزها هستند نیز وجود داشته باشد.

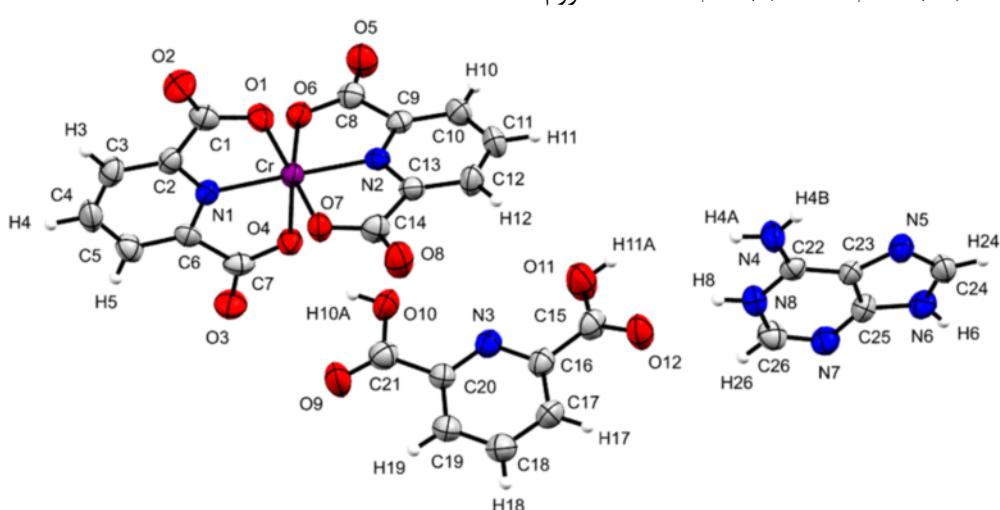
آدنین در همه شکل‌های خود می‌تواند از طریق هر پنج



شکل ۱ ساختار آدنین

و زوایا ۹۰ درجه هستند. داده‌های بلورشناسی ترکیب مورد بررسی در جدول ۱ ارایه شده‌اند.

واحد بی‌تقارن از سه جزء آنیونی، کاتیونی و خنثی تشکیل شده است (شکل ۲). جزء آنیونی کمپلکسی از یون Cr(III) است که دو واحد پیریدین-۶-دیکربوکسیلات به شکل سه دندانه به فلز کوئوردینه شده‌اند و جزء کاتیونی یک مولکول آدنین پروتونه شده در جایگاه N1 (شکل ۱) است. جزء خنثی شامل یک واحد مولکول پیریدین-۶-دیکربوکسیلیک اسید و چهار واحد مولکول آب تبلور است. با کوئوردینه شدن دو لیگاند پیریدین-۶-دیکربوکسیلات (pydc)⁻² به فلز Cr(III) کمپلکس فلزی دارای بار الکتریکی -۱ است و از طرفی آدنین با دریافت یکی از هیدروژن‌های اسیدی جدا شده بر نیتروژن N1 خود با بار الکتریکی +۱ نقش موازن‌ه کننده‌ی بار در ساختار بلوری ترکیب مورد بررسی را بر عهده دارد. فضای کفوردیناسیونی با همارایی ۶ اطراف یون فلزی Cr(III) در کمپلکس فلزی ترکیب مورد بررسی نتیجه اتصال سه دندانه دو لیگاند پیریدین-۶-دیکربوکسیلات از طریق چهار اکسیژن O4، O6 و O7 و دو نیتروژن N1 و N2 به یون فلزی است. در مجموع، زاویه N1-Cr-N2 برابر با ۱۷۷/۶۴ درجه و دو زاویه تقریباً عمود O1-Cr-O7 و O4-Cr-O6 برابر با ۹۱/۸۳ و ۹۰/۶۳ درجه و مجموع زاویه‌های O4-Cr-O7 برابر با ۳۶۰ درجه در کمپلکس فلزی Cr(III) تایید کننده هندسه کوئوردیناسیونی هشت وجهی انحراف یافته در کمپلکس فلزی ساختار ترکیب مورد بررسی هستند. طول پیوند و زاویه‌های مهم در جدول ۲ گردآوری شده است.



شکل ۲ ساختار ORTEP ترکیب ۱ (مولکول‌های آب برای وضوح بهتر نشان داده نشده‌اند).

روش آزمایش

محلول آبی شامل ۰/۲۵ میلی‌مول (۳۴ میلی‌گرم) آدنین و ۰/۵ میلی‌مول (۸۴ میلی‌گرم) پیریدین-۶-دیکربوکسیلیک اسید به مدت یک ساعت در شرایط بازروانی قرار گرفت. سپس ۰/۲۵ میلی‌مول (۶۷ میلی‌گرم) کروم (I) کلرید ۶ آبه به این محلول اضافه شد. که به سرعت رسوب بنفش رنگی به دست آمد. محلول صاف شد و محلول زیر صافی جهت تغییر آهسته در دمای محیط قرار گرفت. پس از یک روز، بلورهای شفاف بنفس رنگی تشکیل شد. مقدار کل فرآورده (شامل رسوب و بلور) ۶۴/۵ میلی‌گرم بوده و بازده آن برپایه لیگاند پیریدین-۶-دیکربوکسیلیک اسید ۳۴/۸۶٪ بدست آمد. دمای ذوب بلور ۱۸۷ درجه سانتیگراد اندازه‌گیری شد که با دمای ذوب رسوب یکسان بود. مقدار عناصر موجود در بلور و رسوب ترکیب مورد بررسی بدست آمده از روش تجزیه عنصری CHNS به ترتیب عبارتند از: کربن ۴۱/۲۳ و ۴۱/۴۴، هیدروژن ۳/۳۰ و ۳/۴۳ و نیتروژن ۱۴/۸ و ۱۵/۱۷ درصد.

همچنین داده‌های طیفی FT-IR عبارتند از: ۶۸۹(S)، ۷۶۷(S)، ۸۴۹(S)، ۸۹۱(S)، ۹۳۵(S)، ۱۰۲۳(S)، ۱۰۷۹(S) Cm⁻¹ ۱۰۶۹(S)، ۱۲۵۳(S)، ۱۳۸۱(S)، ۱۴۹۱(S) و ۱۶۰۶(S). ۲۹۵۷(S)

بحث و نتیجه‌گیری

ساختار مولکولی ترکیب در شکل ۲ نشان داده شده است. ترکیب مورد بررسی در سیستم بلوری راستگوشی و گروه فضایی Pbca متبادر شده و مقدار *R* نهایی برای ۲۵۲۳ بازتاب مستقل ۰/۰۵۳ است. پارامترهای یاخته آن *c*=۳۳/۹۸ (۳)، *b*=۱۳۰/۳۶ (۱۲)، *a*=۱۴/۱۸۰ (۱۴) آنگستروم

جدول ۱ داده‌های بلورشناسی ترکیب ۱ در دمای اتاق

$C_{26}H_{25}CrN_8O_{16}$	فرمول
۷۵۷,۵۴	وزن مولکولی (گرم بر مول)
راستگوشی	سیستم بلوری
$Pbca$	گروه فضایی
$a=۱۴,۱۸۰ (۱۴)$	(آنگستروم) a
$b=۱۳,۰۳۶ (12)$	(آنگستروم) b
$c=۳۳,۹۸ (۳)$	(آنگستروم) c
۹۰	(درجه) $\alpha = \beta = \gamma$
۶۲۸۲(۱۰)	حجم یاخته یکه (آنگستروم مکعب)
۸	تعداد واحد فرمولی در یاخته یکه
۱,۵۷۶	چگالی (میلی گرم بر سانتی متر مکعب)
۰,۱۰۵۳	R_I شاخص
۰,۱۳۱	(WR ₂) R_2 شاخص
۰,۰۷۵	R_{int}
۱,۰۶۷	شاخص نیکوئی برازش
۲۵۲۳	تعداد بازتاب های مستقل

جدول ۲ پیوندها و زاویه‌های انتخابی ترکیب ۱.

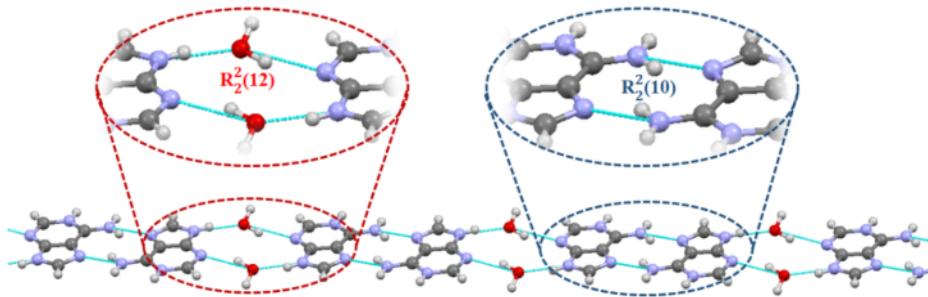
طول پیوند (آنگستروم)			
N1-Cr	۱,۹۸۴(۵)	O4-Cr	۲,۰۲۴(۴)
N2-Cr	۱,۹۷۶(۵)	O6-Cr	۲,۰۱۳(۴)
O1-Cr	۱,۹۹۴(۴)	O7-Cr	۲,۰۰۲(۴)
زاویه پیوند (درجه)			
N2-Cr-N1	۱۷۷,۶۶(۱۷)	N2-Cr-O6	۷۸,۶۰(۱۶)
N2-Cr-O1	۱۰۳,۶۵(۱۶)	N1-Cr-O6	۱۰۰,۵۲(۱۵)
N1-Cr-O1	۷۸,۵۵(۱۶)	O1-Cr-O6	۹۳,۹۱(۱۵)
N2-Cr-O7	۷۸,۶۹(۱۶)	O7-Cr-O6	۱۵۷,۲۸(۱۶)
N1-Cr-O7	۱۰۲,۲۰(۱۶)	N2-Cr-O4	۹۹,۵۱(۱۵)
O1-Cr-O7	۹۰,۶۴(۱۵)	N1-Cr-O4	۷۸,۳۶(۱۶)
O1-Cr-O4	۱۵۶,۸۱(۱۶)	O7-Cr-O4	۹۲,۶۷(۱۵)
O6-Cr-O4	۹۱,۸۴(۱۵)		

در ترکیب مورد بررسی، هر کاتیون آدنین از طریق پیوندهای هیدروژنی N4U-H4BU...N5 و N4-H4B...N5U و جفت شدن بازی وجه هاگستین^۱ خود با کاتیون آدنین معادل خود در شبکه تشکیل سینتن^۲(10) R₂²(10) را می‌دهد. هر یک از این جفت‌های کاتیونی آدنین از طریق پیوندهای هیدروژنی O13-H131...N7 و O13...O13-H131...N7 و N6-H6...O13 و O13-H131...N7 در

زاویه‌های داخلی نیتروژن‌های پروتونه شده N1 و N9 در آدنین پروتونه شده در ساختار ترکیب مورد بررسی برای زاویه‌های C24-N6-C26 و C22-N8-C26 به ترتیب برابر با N1-H و ۱۰۷,۱۱ درجه و مشابه حالت توتموری N1-H ۱۲۳,۱۱ درجه و آدنین و زاویه‌های داخلی نیتروژن‌های N3 و N7 برای زاویه‌های C23-N7-C24 و C25-N5-C26 به ترتیب برابر با ۱۰۳,۳۲ و ۱۱۱,۹۵ درجه و مشابه حالت خنثی در آدنین است (شکل ۲). [۱۱]

هستند. با توجه به جدول ۳، قوی‌ترین پیوند هیدروژنی ساختار مورد بررسی، پیوند $\text{O}14\text{-H}141\ldots\text{O}15^{\text{iii}}$ با زاویه 171° درجه و طول پیوند 1.78 \AA آنگستروم و مربوط به پیوند هیدروژنی بین دو مولکول آب تبلور و ضعیفترین پیوندهای هیدروژنی، پیوند $\text{C}12\text{-H}12\ldots\text{O}5^{\text{iv}}$ با زاویه 151° درجه و طول پیوند 2.66 \AA آنگستروم و مربوط به پیوند هیدروژنی بین دو کمپلکس فلزی مجاور است.

وجه قند خود به واسطه دو مولکول آب و تشکیل سینتن $\text{R}_2^2(12)^2$ به طور متناوب با هم در ارتباط بوده و نوارهای سوبرامولکولی جالبی از کاتیون‌های آدنین و مولکول‌های آب تشکیل می‌دهند (شکل ۳). سرانجام نوارهای سوبرامولکولی آدنین-آب از طریق وجه واتسون-کریک کاتیون‌های آدنین خود و با تشکیل پیوندهای هیدروژنی $\text{N}8\text{-H}8\ldots\text{O}12$ و $\text{N}4\text{-H}4\text{A}\ldots\text{O}6$ به ترتیب با پیریدین-۶-دیکربوکسیلیک اسید خنثی و جزء آنیونی کمپلکس فلزی مجاور در ارتباط



شکل ۳ توالی آدنین و مولکول‌های آب و سینتن‌های موجود در نوارهای سوبرامولکولی آدنین-آب در ترکیب ۱.

جدول ۳ طول و زاویه‌های پیوند هیدروژنی ترکیب ۱.

D-H...A	D-H(Å)	H...A(Å)	D...A(Å)	D-H...A >
C3-H3...O3 ⁱ	0.93	2.57	3.484(7)	167
C5-H5...O2 ⁱⁱ	0.93	2.25	3.122(7)	156
C10-H8...O8 ⁱⁱⁱ	0.93	2.41	3.186(7)	141
C12-H12...O5 ^{iv}	0.93	2.66	3.498(7)	151
C24-H24...O9 ^v	0.93	2.44	3.207(8)	140
N4-H4A...O6 ^{iv}	0.86	2.14	2.854(6)	140
N4-H4B...N5 ^{vi}	0.86	2.14	2.947(7)	155
N6-H6...O13	0.86	1.87	2.717(6)	168
N8-H8...O12	0.86	1.94	2.744(6)	155
O10-H10A...O4	0.82	1.87	2.649(5)	158
O11-H11A...O14	0.82	1.73	2.540(6)	169
O13-H131...N7 ^{vii}	1.00(1)	2.02(2)	2.960(7)	157(3)
O13-H132...O15 ^v	1.00(1)	2.03(2)	2.994(7)	161(4)
O14-H141...O15 ⁱⁱⁱ	1.00(1)	1.78(1)	2.771(7)	171(4)
O14-H142...O1 ^{viii}	1.00(1)	1.98(1)	2.967(6)	168(3)
O14-H142...O2 ^{viii}	1.00(1)	2.42(4)	3.079(6)	122(3)
O15-H151...O8	1.00(1)	1.83(1)	2.816(6)	168(3)
O15-H152...O16	1.00(1)	1.74(1)	2.705(7)	161(3)
O16-H161...O3 ^{ix}	1.00(1)	1.91(1)	2.881(7)	165(3)
O16-H162...O5 ^x	1.00(1)	1.93	2.892(6)	161(3)

کدهای تقارنی برای تولید اتم‌های معادل:

(i) $x+1/2, -y+3/2, -z+2$; (ii) $x-1/2, -y+3/2, -z+2$; (iii) $-x+1, y+1/2, -z+3/2$; (iv) $-x+1, y-1/2, -z+3/2$; (v) $-x+1/2, -y+1, z-1/2$; (vi) $-x+1, -y+1, -z+1$; (vii) $-x, -y+1, -z+1$; (viii) $x-1/2, y, -z+3/2$; (ix) $-x+1/2, y-1/2, z$; (x) $x, y-1, z$.

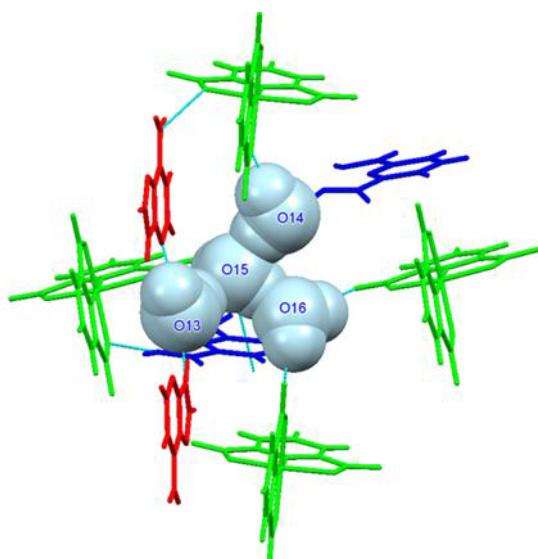
گروه C=O (C1-O2) و (C7-O3) حلقهای پیریدینی (pydc²⁻) کمپلکس‌های فلزی به ترتیب با حلقة پیریمیدینی (۹۷/۴۱ درجه) و ایمیدازولی (۱۱۳/۴۸) آدنین مجاور برقرار است. شکل ۵ برهمنش‌های $\pi\cdots\pi$ و زوایای برهمنش‌ها را نشان می‌دهد.

در سرانجام کاتیون‌های آدنین با قابلیت برقراری پیوندهای هیدروژنی متنوع و جالب سبب برقراری ارتباط بین اجزای مختلف آبیونی، خنثی و تترامرهای آب شده و نقش مهمی را در گسترش ساختار بلوری ترکیب مورد بررسی ایفا می‌کنند. ساختار انباسته ترکیب $(\text{AdH}^+)[\text{Cr}(\text{pydc})_2]$

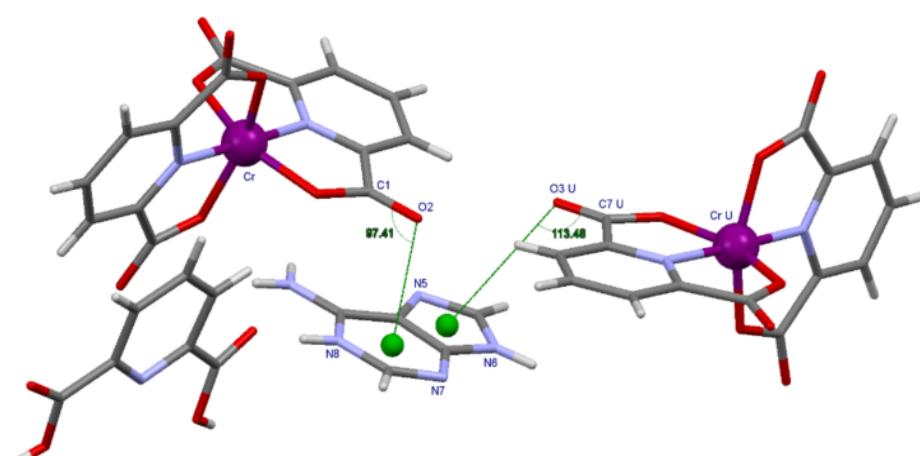
در شکل ۶ دیده می‌شود.

هر یک از مولکول‌های آب موجود در نوارهای سوپرامولکولی آدنین-آب از طریق پیوند هیدروژنی O13-H132...O15 با یک مولکول آب که آن نیز به نوبه خود با دو مولکول آب دیگر (از طریق پیوندهای هیدروژنی O15-H152...O16 و O14-H141...O15) در ارتباط است، تشکیل تترامرهای آب در ساختار ترکیب مورد بررسی را می‌دهند. در واقع تترامرهای آب با برقراری پیوندهای هیدروژنی متعدد بین اجزاء کاتیونی، آبیونی و خنثی در شبکه بلوری نقش مهمی را در رشد و تشکیل ساختار خود انباسته منسجم ترکیب ۱ ایفا می‌کنند (شکل ۴).

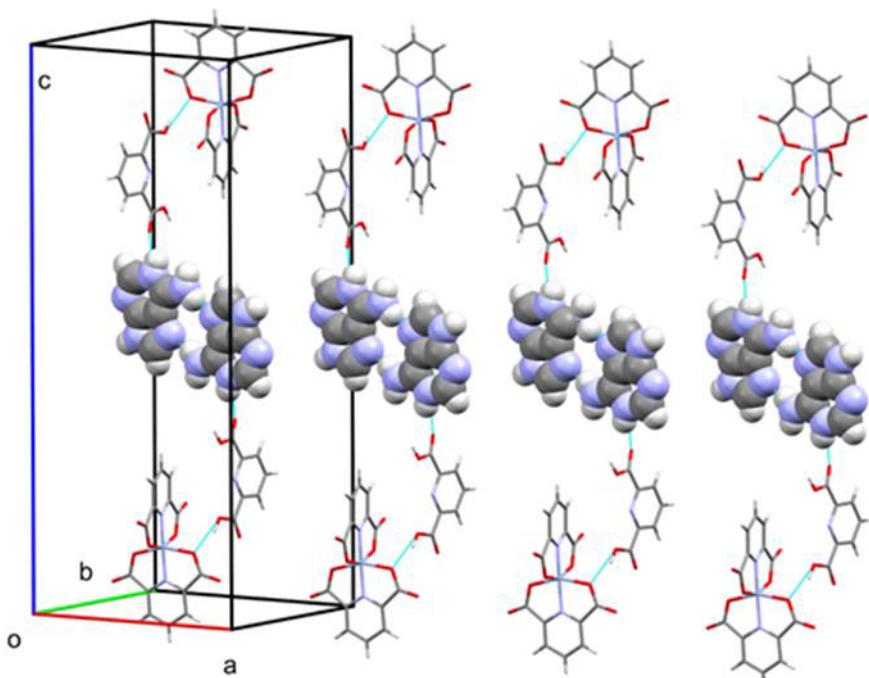
در ترکیب ۱، دو برهمنش $\pi\cdots\pi$ میان دو



شکل ۴ تترامر آب و ارتباط مولکول‌های آب با اجزاء آبیونی (کمپلکس فلزی به رنگ سبز)، کاتیونی (آدنین به رنگ قرمز) و خنثی (پیریدین-۲-دی‌کربوکسیلیک اسید به رنگ آبی تیره) در ترکیب ۱.



شکل ۵ برهمنش‌های $\pi\cdots\pi$ در ترکیب ۱.



شکل ۶ ساختار انباسته ترکیب ۱ (پیوندهای هیدروژنی با نقطه‌چین مشخص شده‌اند).

porphyrins", Coordination Chemistry Reviews 196 (2000): 307-329.

[3] Beletskaya I., Tyurin V. S., Tsividze A. Y., Guillard R., Stern C., "Supramolecular chemistry of metalloporphyrins." *Chemical reviews* 109 (2009): 1659-1713.

[4] Lindsey J. S., "Self-assembly in synthetic routes to molecular devices. Biological principles and chemical perspectives: a review." *ChemInform* 22, (1991): 153-179.

[5] Chi X., Guerin A. J., Haycock R. A., Hunter C. A., Sarson L. D., "The thermodynamics of self-assembly." *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications* 24 (1995): 2563-2565.

[6] Yin H., Zhou Y., Ma Q., Ai S., Ju P., Zhu L., Lu L., "Electrochemical oxidation behavior of guanine and adenine on graphene-Nafion composite film modified glassy carbon electrode and the simultaneous determination." *Process Biochemistry* 45, no. 10 (2010): 1707-1712.

[7] Verma S., Mishra A. K., Kumar J., "The many facets of adenine: coordination, crystal patterns, and catalysis." *Accounts of chemical research* 43, (2009): 79-91.

[8] Marzotto A., Ciccarese A., Clemente D. A., Valle G., "Co-ordination chemistry of adenine (HAd): synthesis and characterization of [CuII (tren)(nucleobase)] X2 [tren= tris-(2-aminoethyl)

برداشت

ترکیب سوپرامولکولی، $(\text{AdH}^+)[\text{Cr}(\text{pydc})_2](\text{H}_2\text{pydc}).4\text{H}_2\text{O}$ از روش انتقال پروتون تهیه شد و ساختار آن با استفاده از پراش پرتوی X، راستگوشی با گروه فضایی *Pbca* مشخص شد. واحد بی تقارن ساختار شامل یک کمپلکس فلزی آنیونی از فلز کرم (III)، یک مولکول آدنین پروتونه همراه با یک واحد خنثی پیریدین-۶،۲-دی کربوکسیلیک اسید و ۴ مولکول آب تبلور است. در حالی که بررسی پیوندهای هیدروژنی متعدد آدنین از طریق وجود مختلف واتسون-کریک، هاگستین و قند آن یکی از نکات جالب توجه و مهم در درک ساختار موجود است. پیوندهای هیدروژنی تترامرهای آب و انباستگی‌های $\text{C}=\text{O}\dots\pi$ نیز از عوامل موثر در رشد ساختار سوپرامولکولی ترکیب مورد بررسی در سه بعد هستند.

مراجع

- [1] Solov'ev V. P., Tsividze A. Y., "Supramolecular complexes: Determination of stability constants on the basis of various experimental methods." *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces* 51 (2015): 1-35.
- [2] Toma H. E., Araki K., "Supramolecular assemblies of ruthenium complexes and

A., "Mercury CSD 2.0-new features for the visualization and investigation of crystal structures." Journal of Applied Crystallography 41 (2008): 466-470.

[11] Tamilselvi D., Muthiah P. T., "Supramolecular patterns in benzyladeninium p-toluenesulfonate." Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications 67.5 (2011): o192-o194.

amine, $X= Cl$ or NO_3] complexes and crystal structure of $[CuII(tren)(Ade)]Cl \cdot 2H_2O$." Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions 9 (1995): 1461-1468.

[9] Sheldrick G. M., "SHELXTL Version 2014/7." Programs for the determination of small and macromolecular crystal structures by single crystal X-ray and neutron diffraction" University of Göttingen Germany. URL <http://shelx.uni-ac-gwdg.de/SHELX/index.php> (2014).

[10] Macrae C. F., Bruno I. J., Chisholm J. A., Edgington P. R., McCabe P., Pidcock E., Wood P.