

سنتز و ساختار بلوری ترکیب آدنینیوم بیس (پیریدین-۲،۶-دی کربوکسیلاتو) کرومات (III)، پیریدین-۲،۶-دی کربوکسیلیک اسید تتراهیدرات

ماکان اتفاق^۱، ژانت سلیمان نژاد*^۱، سیما صدقی نیا^۱، کلودیا گرایف^۲

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

۲- دانشکده شیمی، دانشکده علوم، 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-دی کربوکسیلاتو) کرومات (III) پیریدین-۲،۶-دی-کربوکسیلیک اسید تتراهیدرات $(\text{AdH}^+)[\text{Cr}(\text{pydc})_2](\text{H}_2\text{pydc}) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ که (۱) که Ad و H_2pydc به ترتیب لیگاندهای آدنین و پیریدین-۲،۶-دی کربوکسیلیک اسید هستند، به روش انتقال پروتون سنتز و ساختار بلوری آن به وسیله 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) $a=14.180$ ، $b=13.036$ (۱۲)، $c=33.98$ (۳) آنگستروم و زوایا ۹۰ درجه هستند. مقدار R نهایی برای ۲۵۲۳ بازتاب مستقل ۰٫۰۵۳ است. واحد بی تقارن از سه جزء آنیونی و کاتیونی و خنثی تشکیل شده است. جزء آنیونی کمپلکسی از یون $\text{Cr}(\text{III})$ و دو واحد پیریدین-۲،۶-دی کربوکسیلات و جزء کاتیونی یک مولکول آدنین پروتونه است. جزء خنثی یک واحد مولکول پیریدین-۲،۶-دی-کربوکسیلیک اسید است و چهار واحد مولکول آب تبلور نیز وجود دارد. هر کمپلکس فلزی کروم (III) در ترکیب مورد بررسی دارای آرایش هشت وجهی انحراف یافته در نتیجه اتصال سه دندان دو لیگاند پیریدین-۲،۶-دی کربوکسیلات به فلز مرکزی است. وجود برهم کنش های بین مولکولی و غیر کووالانسی باعث ایجاد ساختارهای خود انباشته منسجم می شود. پیوندهای هیدروژنی و انباشتگی $\text{C}=\text{O} \dots \pi$ از جمله برهم کنش های بین مولکولی هستند که موجب تشکیل ترکیب سوپرامولکولی بررسی شده اند.

واژه های کلیدی: سوپرامولکولی؛ ترکیب های انتقال پروتون؛ آدنین؛ پیوندهای هیدروژنی؛ انباشتگی $\text{C}=\text{O} \dots \pi$

مقدمه

خودبه خودی ساختارهای مولکولی (مانند انباشت تک لایه ها در تشکیل غشاء تشخیص مولکولی، پیوند پیش ماده به پروتئین ها، برهم کنش پروتئین-DNA، برهم کنش پادتن-پادگن) توسط نیروهای بین مولکولی به نسبت ضعیف مانند پیوند هیدروژنی، برهم کنش واندروالس، آبگریز-آبدوست، نیروهای یونی و برهم کنش های $\pi-\pi$ است [۵].

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

شیمی سوپرامولکولی شاخه ای از علم شیمی است که فراتر از ابعاد مولکولی به بررسی سیستم های شیمیایی برآمده از انباشت های بین مولکولی می پردازد. در ابعاد مولکولی، اتم ها با برقراری پیوندهای کووالانسی باعث بوجود آمدن مولکول ها می شوند در حالی که شیمی سوپرامولکولی توصیف کننده ترکیباتی است که مولکول ها در اثر انباشت با برقراری برهم کنش های غیر کووالانسی (بین مولکولی) در کنار یکدیگر چیده می شوند [۴-۱]. به عبارتی، شیمی سوپرامولکولی مربوط به انباشت

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

مواد و دستگاه‌ها

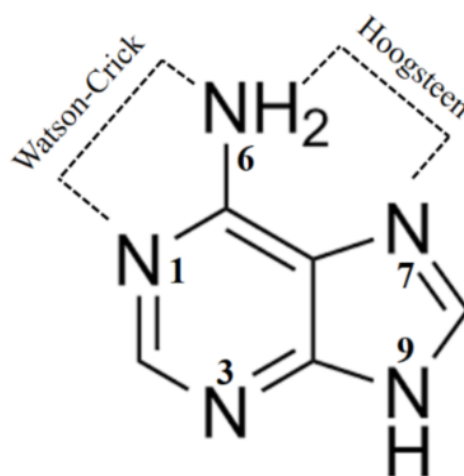
همه مواد استفاده شده در این پژوهش با خلوص تجزیه‌ای از شرکت مرک خریداری شده و بدون خالص سازی بیشتر به کار رفتند. تجزیه عنصری اتمهای کربن (C)، هیدروژن (H) و نیتروژن (N) با روش CHNS و دستگاه Thermo Finnigan Flash EA 1112 انجام شد و طیف تبدیل فوریه فروسرخ (FT-IR) ترکیب مورد بررسی با دستگاه Bruker Tensor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

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

فرآیندهای زیستی، فعالیت‌های سوخت و سازی و سیگنال‌های گسیل شده از سلول‌ها ایفا می‌کنند [۶]. نوکلئوبازها دارای توانایی برقراری برهم‌کنش‌های متنوع غیرکووالان از قبیل پیوندهای هیدروژنی و برهم‌کنش‌های $\pi-\pi$ هستند. این برهم‌کنش‌ها نه تنها سبب پایداری، بلکه منجر به قابلیت ویژه-ای در DNA می‌شود که DNA می‌تواند به عنوان یک الگو اطلاعات ژنتیکی 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 کئوردیناسیونی با فلزهای مختلف و به عبارتی نشان دهنده برهم‌کنش میان فلز و نوکلئیک اسیدها نیز خواهند بود [۷]. شیمی کئوردیناسیون 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

روش آزمایش

محلول آبی شامل ۰/۲۵ میلی مول (۳۴ میلی گرم) آدنین و ۰/۵ میلی مول (۸۴ میلی گرم) پیریدین - ۶،۲ - دی کربوکسیلیک اسید به مدت یک ساعت در شرایط بازروانی قرار گرفت. سپس ۰/۲۵ میلی مول (۶۷ میلی گرم) 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 تبخیر آهسته در دمای محیط قرار گرفت. پس از یک روز، بلورهای شفاف بنفش رنگی تشکیل شد. مقدار کل فرآورده (شامل رسوب و بلور) ۶۴/۵ میلی گرم بوده و بازده آن بر پایه لیگاند پیریدین - ۶،۲ - دی کربوکسیلیک اسید % ۳۴/۸۶ بدست آمد. دمای ذوب بلور ۱۸۷ درجه سانتیگراد اندازه گیری 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.

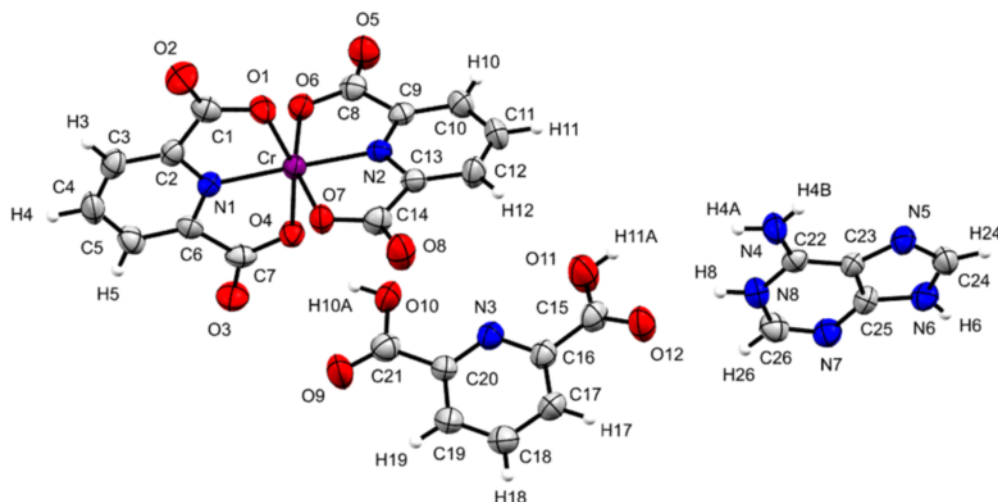
همچنین داده های طیفی FT-IR عبارتند از: (s) ۶۸۹، (s) ۷۶۷، (s) ۸۴۹، (s) ۸۹۱، (s) ۹۳۵، (s) ۱۰۲۳، (s) ۱۰۷۹، (s) ۱۰۶۹، (s) ۱۲۵۳، (s) ۱۳۸۱، (s) ۱۴۹۱، (s) ۱۶۰۶ و Cm^{-1} ۲۹۵۷.

بحث و نتیجه گیری

ساختار مولکولی ترکیب $(\text{AdH}^+)[\text{Cr}(\text{pydc})_2](\text{H}_2\text{pydc}) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ در شکل ۲ نشان داده شده است. ترکیب مورد بررسی در سیستم بلوری راستگوشی و گروه فضایی *Pbca* متبلور شده و مقدار *R* نهایی برای ۲۵۲۳ بازتاب مستقل ۰/۰۵۳ است. پارامترهای یاخته آن $a=14,180$ (۱۴)، $b=13,036$ (۱۲)، $c=33,98$ (۳) آنگستروم

و زوایا ۹۰ درجه هستند. داده های بلورشناسی ترکیب مورد بررسی در جدول ۱ ارایه شده اند.

واحد بی تقارن از سه جزء آنیونی، کاتیونی و خنثی تشکیل شده است (شکل ۲). جزء آنیونی کمپلکسی از یون $\text{Cr}(\text{III})$ است که دو واحد پیریدین - ۶،۲ - دی کربوکسیلات به شکل سه دندان به فلز کوئوردینه شده اند و جزء کاتیونی یک مولکول آدنین پروتونه شده در جایگاه N1 (شکل ۱) است. جزء خنثی شامل یک واحد مولکول پیریدین - ۶،۲ - دی کربوکسیلیک اسید و چهار واحد مولکول آب تبلور است. با کوئوردینه شدن دو لیگاند پیریدین - ۶،۲ - دی کربوکسیلات (pydc^{2-}) به فلز $\text{Cr}(\text{III})$ کمپلکس فلزی دارای بار الکتریکی -۱ است و از طرفی آدنین با دریافت یکی از هیدروژن های اسیدی جدا شده بر نیتروژن N1 خود با بار الکتریکی +۱ نقش موازنه کننده ی بار در ساختار بلوری ترکیب مورد بررسی را بر عهده دارد. فضای کوئوردیناسیونی با همارایی ۶ اطراف یون فلزی $\text{Cr}(\text{III})$ در کمپلکس فلزی ترکیب مورد بررسی نتیجه اتصال سه دندان دو لیگاند پیریدین - ۶،۲ - دی کربوکسیلات از طریق چهار اکسیژن O1، O4، O6، 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 O4-Cr-O6 و O1-Cr-O7 به ترتیب برابر با ۹۱/۸۳ و ۹۰/۶۳ درجه و مجموع زاویه های O4-Cr-O7، O1-Cr-O6، O1-Cr-O4 و O6-Cr-O7 بیشتر از ۳۶۰ درجه در کمپلکس فلزی $\text{Cr}(\text{III})$ تایید کننده هندسه کوئوردیناسیونی هشت وجهی انحراف یافته در کمپلکس فلزی ساختار ترکیب مورد بررسی هستند. طول پیوند و زاویه های مهم در جدول ۲ گردآوری شده است.



شکل ۲ ساختار ORTEP ترکیب ۱ (مولکول های آب برای وضوح بهتر نشان داده نشده اند).

جدول ۱ داده‌های بلورشناسی ترکیب ۱ در دمای اتاق

فرمول	$C_{26}H_{25}CrN_8O_{16}$
وزن مولکولی (گرم بر مول)	۷۵۷٫۵۴
سیستم بلوری	راستگوشی
گروه فضایی	$Pbca$
a (آنگستروم)	$a=14,180 (14)$
b (آنگستروم)	$b=13,036 (12)$
c (آنگستروم)	$c=33,98 (3)$
$\alpha = \beta = \gamma$ (درجه)	۹۰
حجم یاخته یکه (آنگستروم مکعب)	۶۲۸۲(۱۰)
تعداد واحد فرمولی در یاخته یکه	۸
چگالی (میلی گرم بر سانتی متر مکعب)	۱٫۵۷۶
شاخص R_1	۰٫۰۵۳
شاخص $R_2 (WR_2)$	۰٫۱۳۱
R_{int}	۰٫۰۷۵
شاخص نیکویی برازش	۱٫۰۶۷
تعداد بازتاب های مستقل	۲۵۲۳

جدول ۲ پیوندها و زوایه‌های 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، هرکاتیون 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 $R_2^2(10)^2$ را می‌دهد. هر یک از این جفت‌های کاتیونی آدنین از طریق پیوندهای هیدروژنی $N6-H6...O13$ و $O13-H131...N7$

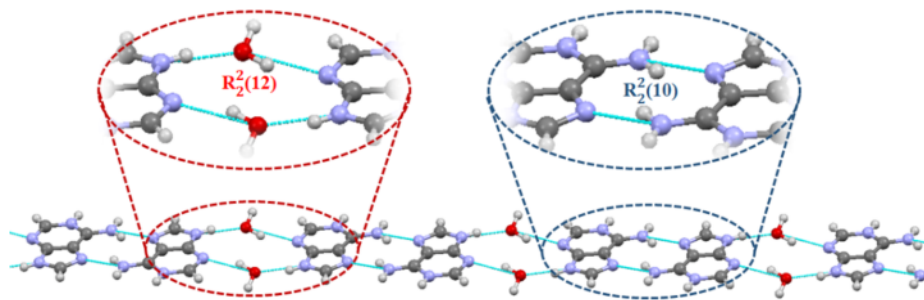
زاویه‌های داخلی نیتروژن‌های پروتونه شده $N1$ و $N9$ در آدنین پروتونه شده در ساختار ترکیب مورد بررسی برای زاویه-های $C24-N6-C25$ و $C22-N8-C26$ به ترتیب برابر با $107,12$ و $123,11$ درجه و مشابه حالت توتومری $N1-H$ آدنین و زاویه‌های داخلی نیتروژن‌های $N3$ و $N7$ برای زاویه-های $C25-N5-C26$ و $C23-N7-C24$ به ترتیب برابر با $103,32$ و $111,95$ درجه و مشابه حالت خنثی در آدنین است (شکل ۲) [۱۱].

1- Hoogsteen face

هستند.

باتوجه به جدول ۳، قوی‌ترین پیوند هیدروژنی ساختار مورد بررسی، پیوند $O14-H141...O15^{iii}$ با زاویه ۱۷۱ درجه و طول پیوند ۱٫۷۸ آنگستروم و مربوط به پیوند هیدروژنی بین دو مولکول آب تبلور و ضعیفترین پیونده هیدروژنی، پیوند $C12-H12...O5^{iv}$ با زاویه ۱۵۱ درجه و طول پیوند ۲٫۶۶ آنگستروم و مربوط به پیوند هیدروژنی بین دو کمپلکس فلزی مجاور است.

وجه قند خود به واسطه دو مولکول آب و تشکیل سینتن $R_2^2(12)^2$ به طور متناوب با هم در ارتباط بوده و نوارهای سوپرامولکولی جالبی از کاتیون‌های آدنین و مولکول‌های آب تشکیل می‌دهند (شکل ۳). سرانجام نوارهای سوپرامولکولی آدنین-آب از طریق وجه واتسون-کریک کاتیون‌های آدنین خود و با تشکیل پیوندهای هیدروژنی $N8-H8...O12$ و $N4-H4A...O6$ به ترتیب با پیریدین-۶،۲-دی‌کربوکسیلیک اسید خنثی و جزء آنیونی کمپلکس فلزی مجاور در ارتباط



شکل ۳ توالی آدنین و مولکول‌های آب و سینتن‌های موجود در نوارهای سوپرامولکولی 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	۰٫۹۳	۲٫۵۷	۳٫۴۸۴(۷)	۱۶۷
C5-H5...O2 ⁱⁱ	۰٫۹۳	۲٫۲۵	۳٫۱۲۲(۷)	۱۵۶
C10-H8...O8 ⁱⁱⁱ	۰٫۹۳	۲٫۴۱	۳٫۱۸۶(۷)	۱۴۱
C12-H12...O5 ^{iv}	۰٫۹۳	۲٫۶۶	۳٫۴۹۸(۷)	۱۵۱
C24-H24...O9 ^v	۰٫۹۳	۲٫۴۴	۳٫۲۰۷(۸)	۱۴۰
N4-H4A...O6 ^{iv}	۰٫۸۶	۲٫۱۴	۲٫۸۵۴(۶)	۱۴۰
N4-H4B...N5 ^{vi}	۰٫۸۶	۲٫۱۴	۲٫۹۴۷(۷)	۱۵۵
N6-H6...O13	۰٫۸۶	۱٫۸۷	۲٫۷۱۷(۶)	۱۶۸
N8-H8...O12	۰٫۸۶	۱٫۹۴	۲٫۷۴۴(۶)	۱۵۵
O10-H10A...O4	۰٫۸۲	۱٫۸۷	۲٫۶۴۹(۵)	۱۵۸
O11-H11A...O14	۰٫۸۲	۱٫۷۳	۲٫۵۴۰(۶)	۱۶۹
O13-H131...N7 ^{vii}	۱٫۰۰(۱)	۲٫۰۲(۲)	۲٫۹۶۰(۷)	۱۵۷(۳)
O13-H132...O15 ^v	۱٫۰۰(۱)	۲٫۰۳(۲)	۲٫۹۹۴(۷)	۱۶۱(۴)
O14-H141...O15 ⁱⁱⁱ	۱٫۰۰(۱)	۱٫۷۸(۱)	۲٫۷۷۱(۷)	۱۷۱(۴)
O14-H142...O1 ^{viii}	۱٫۰۰(۱)	۱٫۹۸(۱)	۲٫۹۶۷(۶)	۱۶۸(۳)
O14-H142...O2 ^{viii}	۱٫۰۰(۱)	۲٫۴۲(۴)	۳٫۰۷۹(۶)	۱۲۳(۳)
O15-H151...O8	۱٫۰۰(۱)	۱٫۸۳(۱)	۲٫۸۱۶(۶)	۱۶۸(۳)
O15-H152...O16	۱٫۰۰(۱)	۱٫۷۴(۱)	۲٫۷۰۵(۷)	۱۶۱(۳)
O16-H161...O3 ^{ix}	۱٫۰۰(۱)	۱٫۹۱(۱)	۲٫۸۸۱(۷)	۱۶۵(۳)
O16-H162...O5 ^x	۱٫۰۰(۱)	۱٫۹۳	۲٫۸۹۲(۶)	۱۶۱(۳)

کدهای تقارنی برای تولید اتم‌های معادل:

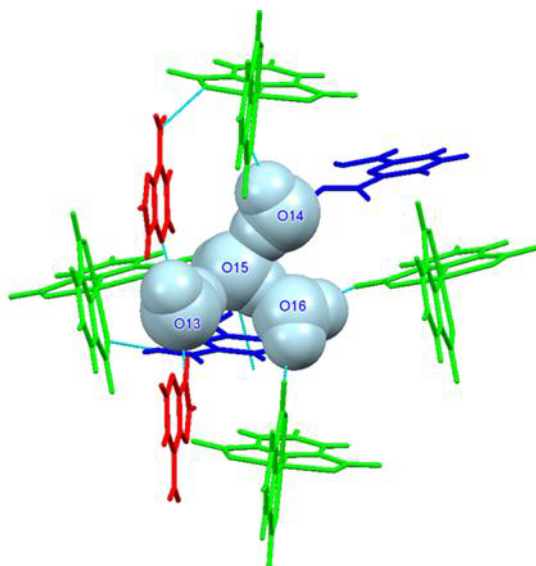
(i) $x+1/2, -y+3/2, -z+2$; (ii) $x-1/2, -y+3/2, -z+2$; (iii) $-x+1, y+1/2, -z+3/2$; (iv) $-x+1, y-1/2, -z+3/2$; (v) $-x+1/2, -y+1, z-1/2$; (vi) $-x+1, -y+1, -z+1$; (vii) $-x, -y+1, -z+1$; (viii) $x-1/2, y, -z+3/2$; (ix) $-x+1/2, y-1/2, z$; (x) $x, y-1, z$.

گروه $C=O$ ($C1-O2$) و ($C7-O3$) حلقه‌های پیریدینی $(pydc^{2-})$ کمپلکس‌های فلزی به ترتیب با حلقه پیریمیدینی ($۹۷/۴۱$ درجه) و ایمیدازولی ($۱۱۳/۴۸$) آدنین مجاور برقرار است. شکل ۵ برهم‌کنش‌های $C=O \dots \pi$ و زوایای برهم‌کنش‌ها را نشان می‌دهد.

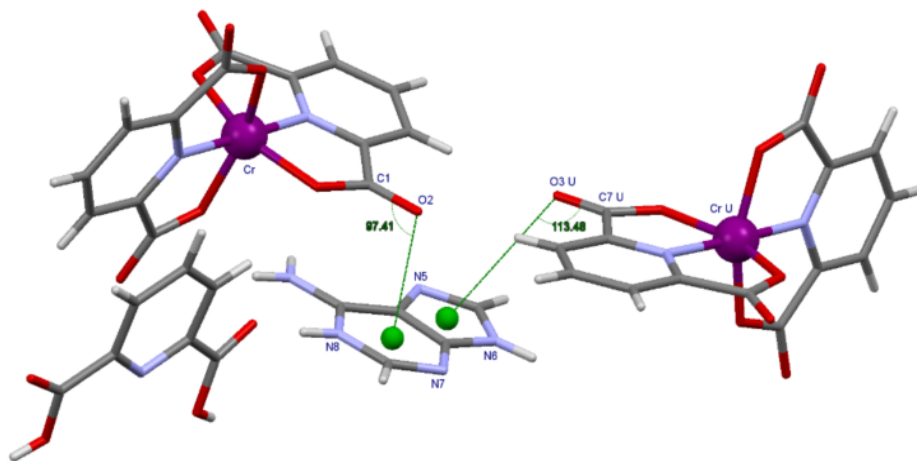
در سرانجام کاتیون‌های آدنین با قابلیت برقراری پیوندهای هیدروژنی متنوع و جالب سبب برقراری ارتباط بین اجزای مختلف آنیونی، خنثی و تترامرهای آب شده و نقش مهمی را در گسترش ساختار بلوری ترکیب مورد بررسی ایفا می‌کنند. ساختار انباشته ترکیب $[Cr(pydc)_2](AdH^+)$ در شکل ۶ دیده می‌شود.

هر یک از مولکول‌های آب موجود در نوارهای سوپرامولکولی آدنین-آب از طریق پیوند هیدروژنی $O15 \dots H132 \dots O13$ با یک مولکول آب که آن نیز به نوبه خود با دو مولکول آب دیگر (از طریق پیوندهای هیدروژنی $O16 \dots H152 \dots O15$ و $O15 \dots H141 \dots O14$) 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، آنیونی و خنثی در شبکه بلوری نقش مهمی را در رشد و تشکیل ساختار خود انباشته منسجم ترکیب ۱ ایفا می‌کنند (شکل ۴).

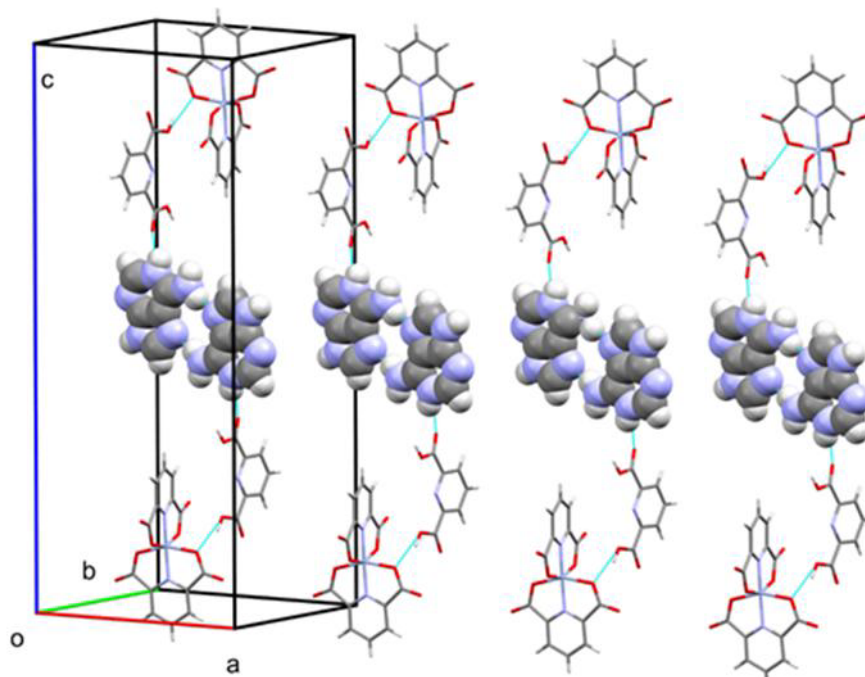
در ترکیب ۱، دو برهم‌کنش $C=O \dots \pi$ میان دو



شکل ۴ تترامر آب و ارتباط مولکول‌های آب با اجزاء آنیونی (کمپلکس فلزی به رنگ سبز)، کاتیونی (آدنین به رنگ قرمز) و خنثی (پیریدین-۲،۶-دی‌کربوکسیلیک اسید به رنگ آبی تیره) در ترکیب ۱.



شکل ۵ برهم‌کنش‌های $C=O \dots \pi$ در ترکیب ۱.



شکل ۶ ساختار انباشته ترکیب ۱ (پیوندهای هیدروژنی با نقطه چین مشخص شده‌اند).

برداشت

ترکیب سوپرامولکولی، $(\text{AdH}^+)[\text{Cr}(\text{pydc})_2](\text{H}_2\text{pydc}) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ، 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-۲،۶-دی کربوکسیلیک اسید و ۴ مولکول آب تبلور است. در حالی که بررسی پیوندهای هیدروژنی متعدد آدنین از طریق وجوه مختلف واتسون-کریک، هاگستین و قند آن یکی از نکات جالب توجه و مهم در درک ساختار موجود است، پیوندهای هیدروژنی تترامرهای آب و انباشتگی‌های $\text{C}=\text{O} \dots \pi$ نیز از عوامل موثر در رشد ساختار سوپرامولکولی ترکیب مورد بررسی در سه بعد هستند.

مراجع

- porphyrins*", Coordination Chemistry Reviews 196 (2000): 307-329.
- [3] Beletskaya I., Tyurin V. S., Tsivadze 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 grapheme-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 $[\text{CuII}(\text{tren})(\text{nucleobase})] \text{X}_2$ [*tren*= tris-(2-aminoethyl)

- [1] Solov'ev V. P., Tsivadze 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.