

Streszczenie

W niniejszej pracy opisano syntezę oraz badania strukturalne estrów i soli kwasu hypodifosforowego. Otrzymano i scharakteryzowano strukturalnie trzy sole nowego analogu ADP – 5'-hypodifosforanu adenozyiny (AhDP) i wykazano duże podobieństwo AhDP do ADP pod względem struktury molekularnej i oddziaływań międzycząsteczkowych. W celu uzupełnienia charakterystyki oddziaływań międzycząsteczkowych w kryształach hypodifosforanowych estrów nukleozydowych, otrzymano i przeanalizowano oddziaływania w serii układów modelowych, tj. w solach nukleozydów purynowych i pirymidynowych, zasad purynowych i cytozyny oraz w solach sodowych. W klasie połączeń nukleozydowych uzyskano i scharakteryzowano 13 kryształów zawierających uprotonowane nukleozydy: adenozyinę, cytydynę, 2'-deoksycytydynę i cytarabinę, a wśród soli zasad azotowych opisano 10 kryształów zawierających uprotonowaną adeninę, ksantynę, teofilinę, teobrominę, kofeinę i cytozynę. Otrzymano i scharakteryzowano 7 kryształów hypodifosforanowych soli sodowych.

Na podstawie uzyskanych kryształów estrów oraz soli nukleozydów i zasad azotowych scharakteryzowano krystalochemię ugrupowania hypodifosforanowego w tego typu połączeniach organicznych. Określono główne typy oddziaływań, wśród których wyróżniono bezpośrednie wiązania wodorowe typu zasada–hypodifosforan (B–PP) i hypodifosforan–hypodifosforan (PP–PP) oraz oddziaływania z udziałem wolnej pary elektronowej hypodifosforanowego atomu tlenu a elektronami pierścienia aromatycznego (oddziaływania lp– π). Przeanalizowano podstruktury anionowe tworzone w wyniku wiązań wodorowych PP–PP oraz wyznaczono preferowane motywy strukturalne.

Przedstawiono systematyczną charakterystykę strukturalną i supramolekularną hypodifosforanów w ich solach sodowych przeprowadzając analizę serii soli zawierających aniony hypodifosforanowe na różnym stopniu jonizacji. Określono m.in. sposób koordynacji anionów hypodifosforanowych do kationów Na^+ , scharakteryzowano otoczenie koordynacyjne kationów i anionów, a wyniki porównano z opublikowanymi danymi dla soli potasowych.