

บทที่ 6

สรุปผล

(SUMMARY)

บทนี้จะสรุปเปรียบเทียบผลการทดลองทั้งหมดของงานวิจัยนี้ แบ่งออกเป็นหมวดหมู่ เพื่อความสะดวกในการอ่านรายงานนี้ ดังนี้

6.1 สูตรของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

ข้อมูลสารประกอบ สูตร ตัวย่อ และชื่อของสารประกอบ 1-5 สรุปไว้ในตารางที่ 6.1

ตารางที่ 6.1 สูตรและอ่านชื่อของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

สารประกอบ	สูตร	ตัวย่อ	การอ่านชื่อ
1	$C_7H_4N_2O_6$ หรือ $C_6H_3(NO_2)_2COOH$	DNBA	3,5-dinitrobenzoic acid
2	$C_7H_6O_3$ หรือ $C_6H_4(OH)COOH$	HSal	salicylic acid
3	$C_{42}H_{32}Cu_2O_{12}$ หรือ $[Cu_2(BA)_4(HBA)_2]$		tetrakis(μ -benzoato)bis(benzoic acid)copper(II)
4	$C_{14}H_{16}CuN_2O_{13}$ หรือ $[Cu(DNBA)(HSal)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O$		diaqua3,5-dinitrobenzoatosalicylato copper(II) dihydrate
5	$C_{14}H_{16}CuN_2O_{13}$ หรือ $[Cu(DNBA)(HSal)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O$		diaqua3,5-dinitrobenzoatosalicylato copper(II) dihydrate

6.2 ผลึกของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

สรุปลักษณะทางกายภาพของผลึกของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5 ในตารางที่ 6.2 โดยมีรายละเอียด คือ

สารประกอบ 1 คือ กรด 3,5-ไดไนโตรเบนโซอิก ผลึกแผ่นบาง ๆ สีเหลืองอ่อนใส

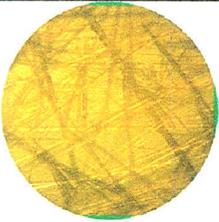
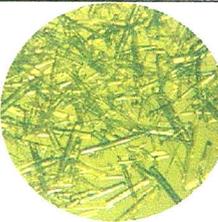
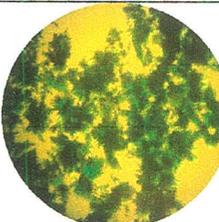
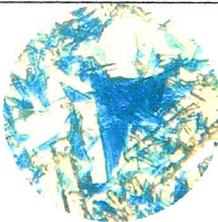
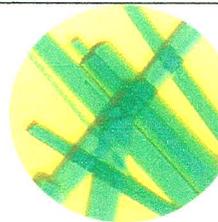
สารประกอบ 2 คือ กรดซาลิไซลิกอิก เป็นผลึกรูปเข็ม ใสไม่มีสี ผิวหนาเรียบ เห็นด้าน เหลี่ยมและมุมชัดเจน

สารประกอบ 3 มีผลึกสีเขียว ลักษณะคล้ายรูปเข็มรวมกันเป็นกระจุก ๆ คล้ายดอกไม้ ซึ่งมีสีเขียวเหมือนสารตั้งต้น $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

สารประกอบ 5 ผลึกสีเขียว ลักษณะเป็นแผ่นบางค่อนข้างยาว

โดยปกติแล้วผลึกของลิแกนด์ 1-2 จะไม่มีสี แต่ผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนจะมีสี ลักษณะรูปร่างของผลึกมีรูปร่างแบน ยกเว้นสารประกอบ 4 มีรูปร่างสามเหลี่ยม ทุกผลึกเห็นเหลี่ยมและมุมชัดเจนและมีผิวหน้าเรียบ แสดงว่าผลึกสมบูรณ์และเหมาะสมที่จะนำไปวิเคราะห์สมบัติอื่น ๆ ต่อไป

ตารางที่ 6.2 รูปผลึกของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

ลักษณะกายภาพของผลึกของสารประกอบ				
1	2	3	4	5
				

6.3 จุดหลอมเหลวของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

เพื่อหาความเชื่อมั่นของข้อมูลได้ทดสอบหาจุดหลอมเหลวของสารประกอบแต่ละสารจำนวน 2-3 ครั้ง ดังแสดงในตารางที่ 6.3

สารประกอบ 1 มีจุดหลอมเหลวที่ $205\text{ }^{\circ}\text{C}$ ซึ่งอยู่ในช่วงที่มีรายงานคือ $205\text{-}207\text{ }^{\circ}\text{C}$ มาก่อนหน้านี้แล้ว (M. Karabacak *et. al*, 2012)

สารประกอบ 2 มีจุดหลอมเหลวที่ $158\text{ }^{\circ}\text{C}$ ซึ่งใกล้เคียงกับงานวิจัยที่ Mehmet Karabacak *et. al* , 2012

สารประกอบ 3 4 และ 5 ไม่สามารถหาจุดหลอมเหลวได้ เนื่องจากเครื่องมือที่ใช้วัด (Bushi, Japan) สามารถวัดได้ที่อุณหภูมิสูงสุดที่ประมาณ $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าสารประกอบ 3-5 มีจุดหลอมเหลวสูงกว่า $300\text{ }^{\circ}\text{C}$

ตารางที่ 6.3 จุดหลอมเหลวของสารประกอบ 1 2 3 4 5 และสารอินทรีย์บางชนิด

สาร	จุดหลอมเหลว (°C)
Water *	0
Benzoic acid *	122
Benzamide	128
Salicylic acid *	157
3,5-nitrobenzoic acid *	205
<i>p</i> -nitrobenzoic acid	239
1	205
2	159
3	>300
4	>300
5	>300

* คัดแปลงมาจาก : http://www.chemistry.sc.chula.ac.th/course_info/2302275/chapter4.pdf

6.4 ความสามารถในการละลายของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

สารประกอบ 1 ละลายได้ดีมากในเอทานอลและเมทานอลและไดเมทิลซัลฟอกไซด์

สารประกอบ 2 ละลายได้เหมือนสารประกอบ 1 แต่เพิ่มการละลายในคลอโรฟอร์ม

สารประกอบ 3 ละลายได้ในตัวทำละลายเอทานอล เมทานอล คลอโรฟอร์ม และไดเมทิลซัลฟอกไซด์ และละลายได้เล็กน้อยในตัวทำละลายอะซิโตน

สารประกอบ 4 สามารถละลายได้ในตัวทำละลายเอทานอล เมทานอล ไดเมทิลซัลฟอกไซด์ และละลายได้เล็กน้อยในตัวทำละลายอะซิโตน และคลอโรฟอร์ม

สารประกอบ 5 สามารถละลายได้ในตัวทำละลายเอทานอล เมทานอล ไดเมทิลซัลฟอกไซด์ และละลายได้เล็กน้อยในตัวทำละลายอะซิโตนและคลอโรฟอร์ม ซึ่งเหมือนกับสารประกอบ 4

ซึ่งพอสรุปได้ว่าละลายได้ดีในสารละลายที่มีขั้ว ยกเว้นสารประกอบเชิงซ้อน 4 และ 5 ที่สามารถละลายได้ในอะซิโตน ถึงแม้ว่าสารประกอบทุกตัวไม่ละลายน้ำ แต่สามารถละลายได้ในเอทานอลได้ดี ซึ่งน่าจะเหมาะที่นำสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5 นี้เป็นยาได้

ตารางที่ 6.4 ความสามารถในการละลายของสารประกอบ 1 2 3 4 5 และสารตั้งต้น $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

ตัวทำละลาย	1	2	3	4	5	$\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
น้ำ	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ละลาย
เฮกเซน	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย	ไม่ละลาย
อะซิโตน	ไม่ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย
			เล็กน้อย	เล็กน้อย	เล็กน้อย	เล็กน้อย
เอทานอล	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย
เมทานอล	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย
คลอโรฟอร์ม	ไม่ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ละลาย	ไม่ละลาย
ไดเมทิลซัลไฟ	ละลาย	ละลาย	ละลาย	เล็กน้อย	เล็กน้อย	ละลาย
ออกไซค์				ละลาย	ละลาย	

6.5 ข้อมูลทางผลึกของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

ข้อมูลการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์บนผลึกเดี่ยวของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5 บางส่วนนำเสนอไว้ในตารางที่ 6.5 และสามารถดูรายละเอียดของข้อมูลทั้งหมดในภาคผนวก 2

สารประกอบ 1 2 3 และ 5 มีระบบผลึกคือ มอนอคลินิก หมู่ปริภูมิของสารประกอบ 1 เป็น $C2/c$ สารประกอบ 2 และ 5 มีหมู่ปริภูมิ $P21/c$ ส่วนสารประกอบ 3 มีหมู่ปริภูมิ $P21/n$ ในขณะที่สารประกอบ 4 มีระบบออร์โทโรมบิก และหมู่ปริภูมิ $Pna2(1)$

ค่า R-factor ของสารประกอบทั้ง 5 ต่ำกว่า 0.05 แสดงว่าข้อมูลผลึกดีมาก และเชื่อถือได้ มีความผิดพลาดของข้อมูลน้อยมาก ซึ่งสอดคล้องกับผลึกในหัวข้อ 6.2 ที่มีผิวหน้าเรียบ มีมุมและเหลี่ยมอย่างชัดเจน และเป็นผลึกเดี่ยวที่บริสุทธิ์ และจากข้อมูลของการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์บนผลึกเดี่ยวนี้เองทำให้ทราบว่า

สารประกอบ 1 และ 2 มีพอลิมอร์ฟที่แตกต่างกันที่เคยรายงานมาก่อนหน้านี้แล้ว

สารประกอบ 4 และ 5 เกิดพอลิมอร์ฟิซึม หรือเป็นพอลิมอร์ฟซึ่งกันและกัน

ตารางที่ 6.5 ข้อมูลทางผลึกของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

พารามิเตอร์	ข้อมูลของสารประกอบ				
	1	2	3	4	5
Empirical formula	C ₇ H ₄ N ₂ O ₆	C ₇ H ₆ O ₃	C ₄₂ H ₃₂ Cu ₂ O ₁₂	C ₁₄ H ₁₆ CuN ₂ O ₁₃	C ₁₄ H ₁₆ CuN ₂ O ₁₃
Formula weight	212.12	138.12	855.76	483.84	483.84
Crystal system	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic	Orthorhombic	Monoclinic
Space group	C2/c	P2(1)/c	P2(1)/n	Pna2(1)	P2(1)/c
Unit cell dimensions	$a = 21.059(3) \text{ \AA}$ $b = 8.7368(13) \text{ \AA}$ $c = 9.7553(14) \text{ \AA}$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta = 111.013(9)^\circ$	$a = 4.9067(8) \text{ \AA}$ $b = 11.218(2) \text{ \AA}$ $c = 11.537(2) \text{ \AA}$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta = 90.806^\circ$	$a = 10.7755(3) \text{ \AA}$ $b = 11.7248(4) \text{ \AA}$ $c = 15.2284(5) \text{ \AA}$ $\alpha = 90^\circ$ $\beta = 91.1950(10)^\circ$ $\gamma = 90^\circ$	$a = 7.2952(6) \text{ \AA}$ $b = 34.943(3) \text{ \AA}$ $c = 7.378(6) \text{ \AA}$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = 15.2492(9) \text{ \AA}$ $b = 6.9556(4) \text{ \AA}$ $c = 17.317(1) \text{ \AA}$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta = 91.592(1)^\circ$
Volume	1675.5(4) \AA^3	635.0(2) \AA^3	1923.55(11) \AA^3	1880.8(3) \AA^3	1836.07(18) \AA^3
Z	8	4	2	4	4
Density (calculated)	1.682 Mg/m ³	1.445 Mg/m ³	1.477 Mg/m ³	1.709 Mg/m ³	1.750 Mg/m ³
Crystal size	0.44x0.32 x 0.26 mm ³	0.56 x 0.16 x 0.12 mm ³	0.40 x 0.34 x 0.30 mm ³	0.328 x 0.13 x 0.097 mm ³	0.279 x 0.257 x 0.131 mm ³
Final R indices [I>2 σ (I)]	R1 = 0.0359, wR2 = 0.1005	R1 = 0.0336, wR2 = 0.0866	R1 = 0.0272, wR2 = 0.0721	R1 = 0.0291, wR2 = 0.0694	R1 = 0.0295, wR2 = 0.0702
R indices (all data)	R1 = 0.0425, wR2 = 0.1060	R1 = 0.0476, wR2 = 0.0955	R1 = 0.0368, wR2 = 0.0783	R1 = 0.0378, wR2 = 0.0732	R1 = 0.0380, wR2 = 0.0723

6.6 โครงสร้างผลึกของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

โครงสร้างโมเลกุลของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5 รวบรวมไว้ในตาราง 6.6

สารประกอบ 1 มีสูตรโครงสร้างคือ C₇H₄N₂O₆ หรือ C₆H₃(NO₂)₂COOH หรือ กรด 3,5-ไดไนโตรเบนโซอิก หรือ DNBA สารประกอบ 1 ประกอบด้วยวงแหวนเบนซีนแบนราบ หมู่คาร์บอกซิลิก และหมู่ไนโตร 2 หมู่

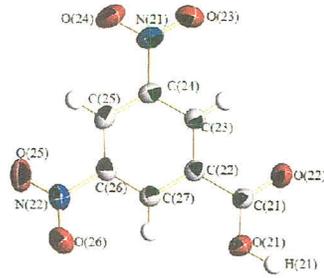
สารประกอบ 2 มีสูตรโครงสร้างคือ C₇H₆O₃ หรือ C₆H₄(OH)COOH ซึ่งมีชื่อว่างกรด 2-ไฮดรอกซีเบนโซอิก หรือ กรดซาลิไซลิก หรือ HSal ประกอบด้วยวงแหวนเบนซีนแบนราบ หมู่คาร์บอกซิลิก และไฮดรอกซี

ตารางที่ 6.6 โครงสร้างโมเลกุลของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

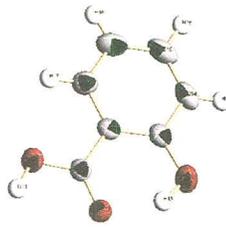
สารประกอบ

โครงสร้างโมเลกุลของ

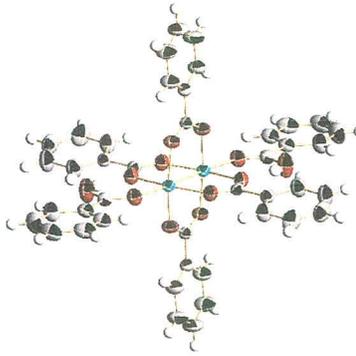
1



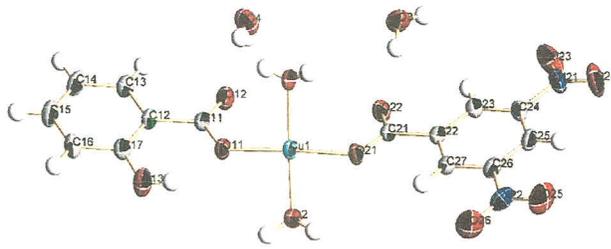
2



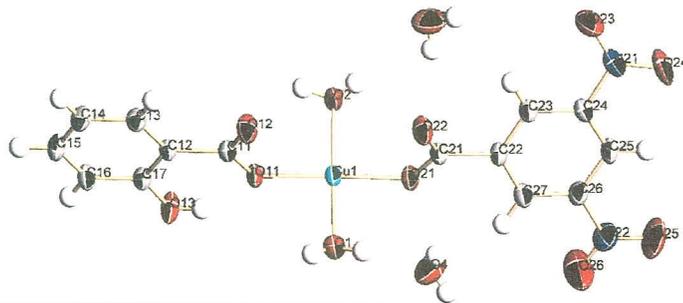
3



4



5



สารประกอบ 3 มีสูตรโครงสร้างคือ $C_{14}H_{10}CuN_4O_{14}$ หรือ $[Cu_2(BA)_4(HBA)_2]$ เป็นสารประกอบไดเมอร์หรือไดนิวเคลียร์ ที่ประกอบด้วยไอออนโลหะทองแดง สร้างพันธะโคออร์ดิเนตโคเวเลนต์กับอะตอมออกซิเจนจากหมู่คาร์บอกซิเลต (COO^-) 1 อะตอม ของลิแกนด์ HBA และออกซิเจน 4 อะตอมของลิแกนด์ BA ทำให้มีเลขโคออร์ดิเนชันเท่ากับ 5 ทำให้โครงสร้างทางเรขาคณิตของไอออนโลหะ Cu^{2+} คือ ปริซึมสี่เหลี่ยมและมีประจุ $+2 (Cu^{2+})$ หรือสารประกอบ d^9

สารประกอบ 4 มีสูตรโครงสร้างคือ $[Cu(HSal)(DNBA)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O$ ประกอบด้วยไอออนโลหะ Cu^{2+} สร้างพันธะโคออร์ดิเนตโคเวเลนต์กับอะตอมออกซิเจนอย่างละ 1 อะตอม จากลิแกนด์ HSal กับ DNBA และ 2 อะตอมจากลิแกนด์ H_2O ทำให้มีเลขโคออร์ดิเนชันเท่ากับ 4 ทำให้โครงสร้างทางเรขาคณิตของไอออนโลหะ Cu^{2+} คือสี่เหลี่ยมแบนราบ และมีน้ำอีก 2 โมเลกุลที่ทำหน้าที่คล้ายเคาน์เตอร์โมเลกุล

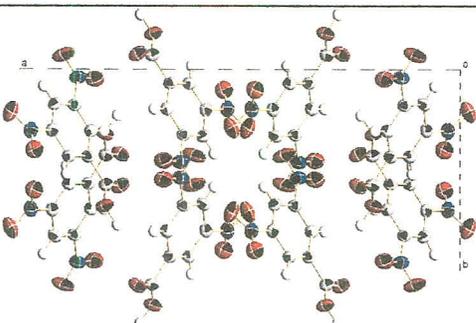
สารประกอบ 5 มีสูตรโครงสร้างคือ $C_{14}H_{16}CuN_2O_{13}$ หรือ $[Cu(Sal)(DNBA)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O$ ซึ่งเหมือนกับสารประกอบ 4 แตกต่างตรงที่ตำแหน่งของน้ำที่ทำหน้าที่เป็นเคาน์เตอร์โมเลกุล อยู่ตำแหน่งที่แตกต่างกัน

สารประกอบ 1 และ 2 คือ ลิแกนด์ สารประกอบ 3 ประกอบด้วยลิแกนด์ที่เป็นสารประกอบ 1 ส่วน สารประกอบ 4 และ 5 ประกอบด้วยลิแกนด์สารประกอบ 1 และ 2 สารประกอบ 4 และ 5 เป็นพอลิเมอร์พีซิมแตกต่างกันตรงที่ตำแหน่งของน้ำ 2 โมเลกุลที่เป็นเคาน์เตอร์โมเลกุล ที่อยู่นอกตำแหน่งโคออร์ดิเนตในหนึ่งหน่วยเซลล์

6.7 ข้อมูลการอัดแน่นของผลึก 1 2 3 4 และ 5

สารประกอบ 2 4 และ 5 มีการอัดแน่นของโมเลกุลในหนึ่งหน่วยเซลล์ เท่ากับ 4 ส่วนสารประกอบ 1 เท่ากับ 8 โมเลกุลในหนึ่งหน่วยเซลล์ ในขณะที่สารประกอบ 3 การอัดแน่นของโมเลกุลในหนึ่งหน่วยเซลล์ เท่ากับ 2 แสดงในตาราง 6.7

ตารางที่ 6.7 ข้อมูลการอัดแน่นของผลึก 1 2 3 4 และ 5

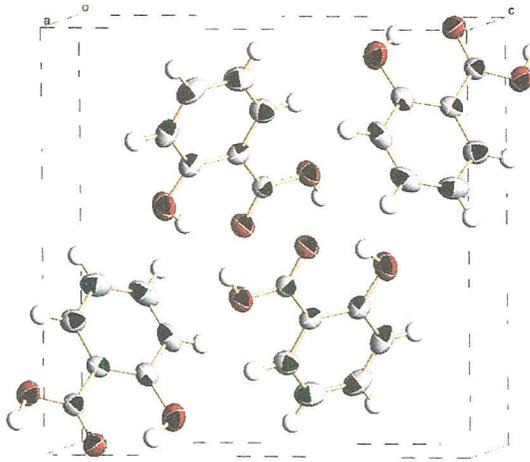
สารประกอบ	การอัดแน่นของผลึกในหนึ่งหน่วยเซลล์
1	

ตารางที่ 6.7 ข้อมูลการอัดแน่นของผลึก 1 2 3 4 และ 5 (ต่อ)

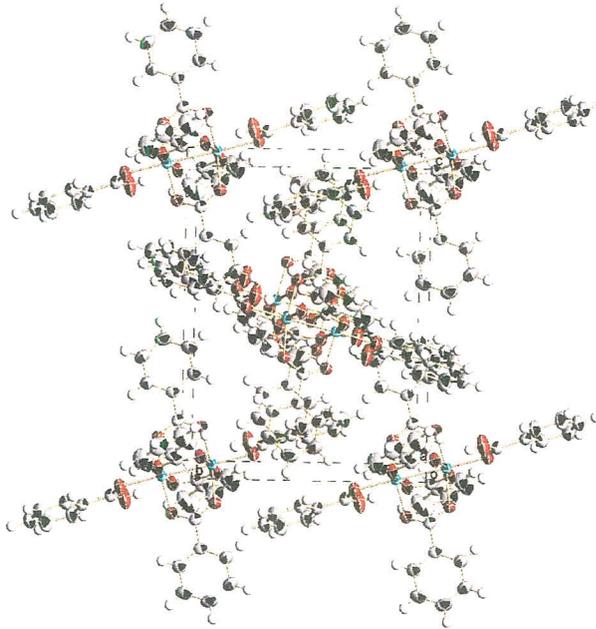
สารประกอบ

การอัดแน่นของผลึกในหนึ่งหน่วยเซลล์

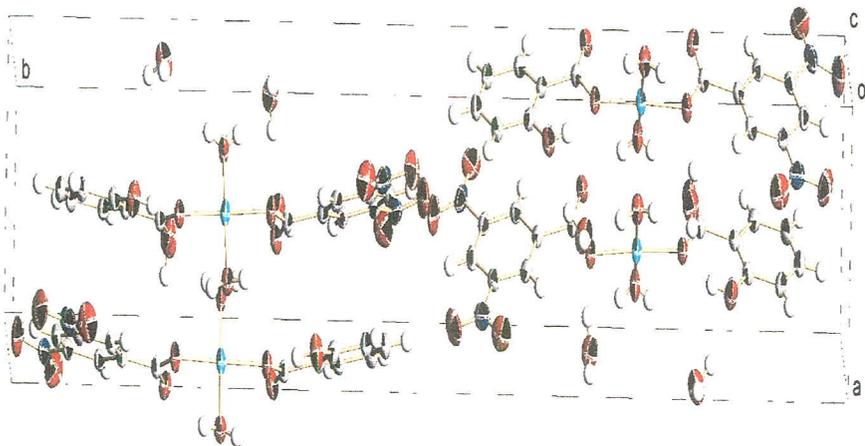
2



3



4



ตารางที่ 6.7 ข้อมูลการอัดแน่นของผลึก 1 2 3 4 และ 5 (ต่อ)

สารประกอบ	การอัดแน่นของผลึกในหนึ่งหน่วยเซลล์
5	

6.8 สารประกอบไดนิวเคลียร์และพอลินิวเคลียร์

สารประกอบ 3 เป็นไดนิวเคลียร์ไอออนโลหะทองแดง มีเลขโคออร์ดิเนชันเท่ากับ 5 มีรูปร่างปริซึมฐานสี่เหลี่ยม และมีพันธะเทียมระหว่าง Cu-Cu ที่ใกล้กันมาก

สารประกอบ 4 เกิดพอลิเมอร์ผ่านอะตอมออกซิเจนของหมู่คาร์บอกซิลิกของลิแกนด์ HSal และ DNBA จนเกิดเป็นพอลิเมอร์ 1 มิติ ทำให้เป็นสารประกอบพอลินิวเคลียร์ และทำให้เกิดผลกระทบจากรังสีแกมมา [CuO₄O₂] ที่มีรูปร่างทรงแปดหน้า

สารประกอบ 5 เป็นไดนิวเคลียร์จากอะตอมออกซิเจนของหมู่ไฮดรอกซีที่สร้างพันธะกับไอออนโลหะทองแดง มีเลขโคออร์ดิเนชันเท่ากับ 5 มีรูปร่างปริซึมฐานสี่เหลี่ยมเหมือนกับสารประกอบ 3

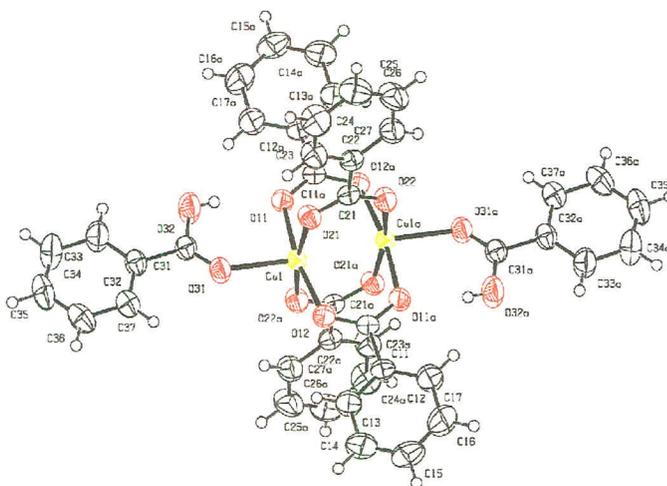
ภาพแสดงการเกิดสารประกอบพอลินิวเคลียร์และไดนิวเคลียร์ของสารประกอบ 3 4 และ 5 รวบรวมไว้ในตารางที่ 6.8

ตารางที่ 6.8 สารประกอบพอลินิวเคลียร์และไดนิวเคลียร์ของสารประกอบ 3 4 และ 5

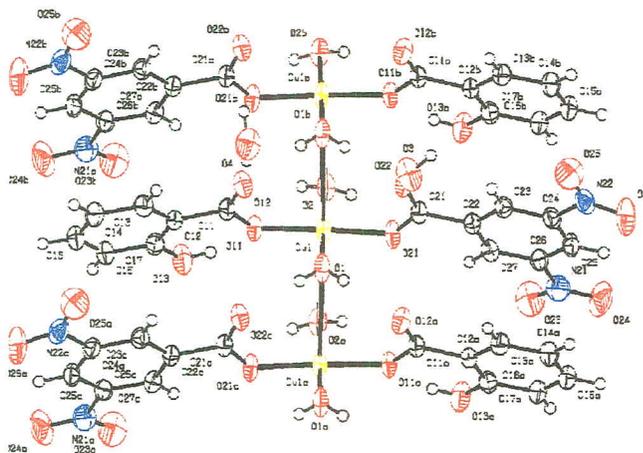
สารประกอบ

พอลินิวเคลียร์และไดนิวเคลียร์

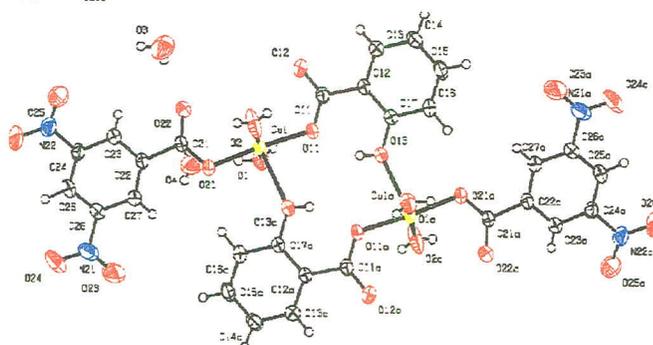
3



4



5



6.9 การเกิดอันตรกิริยาของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

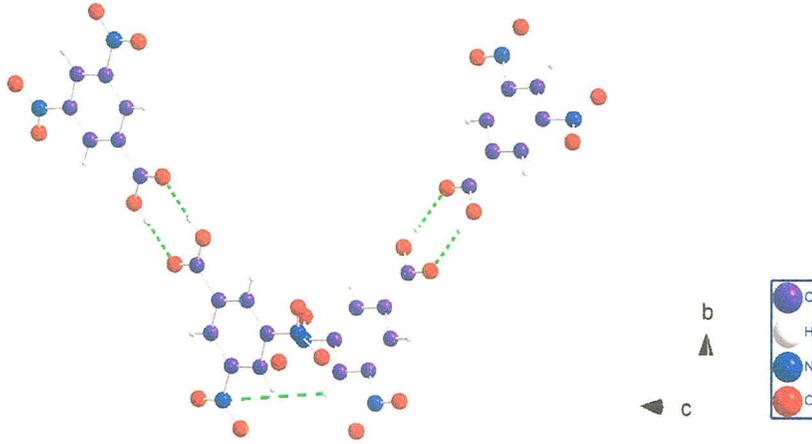
สารประกอบ 1 2 3 4 และ 5 ประกอบด้วยหมู่ฟังก์ชันที่สามารถเกิดอันตรกิริยาอย่างอ่อนได้ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 6.9

ตารางที่ 6.9 อันตรกิริยาของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

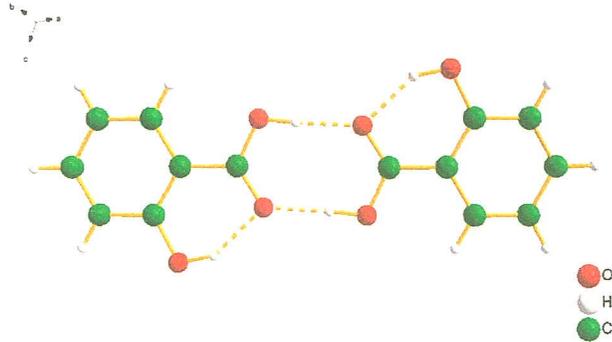
สารประกอบ

อันตรกิริยาของสารประกอบ

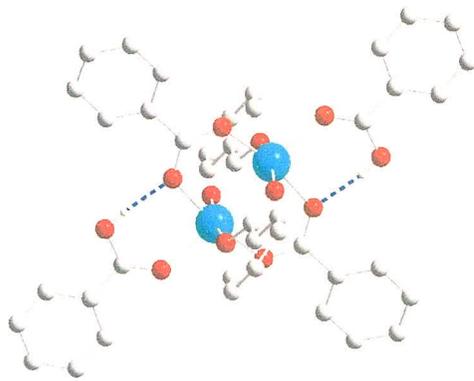
1



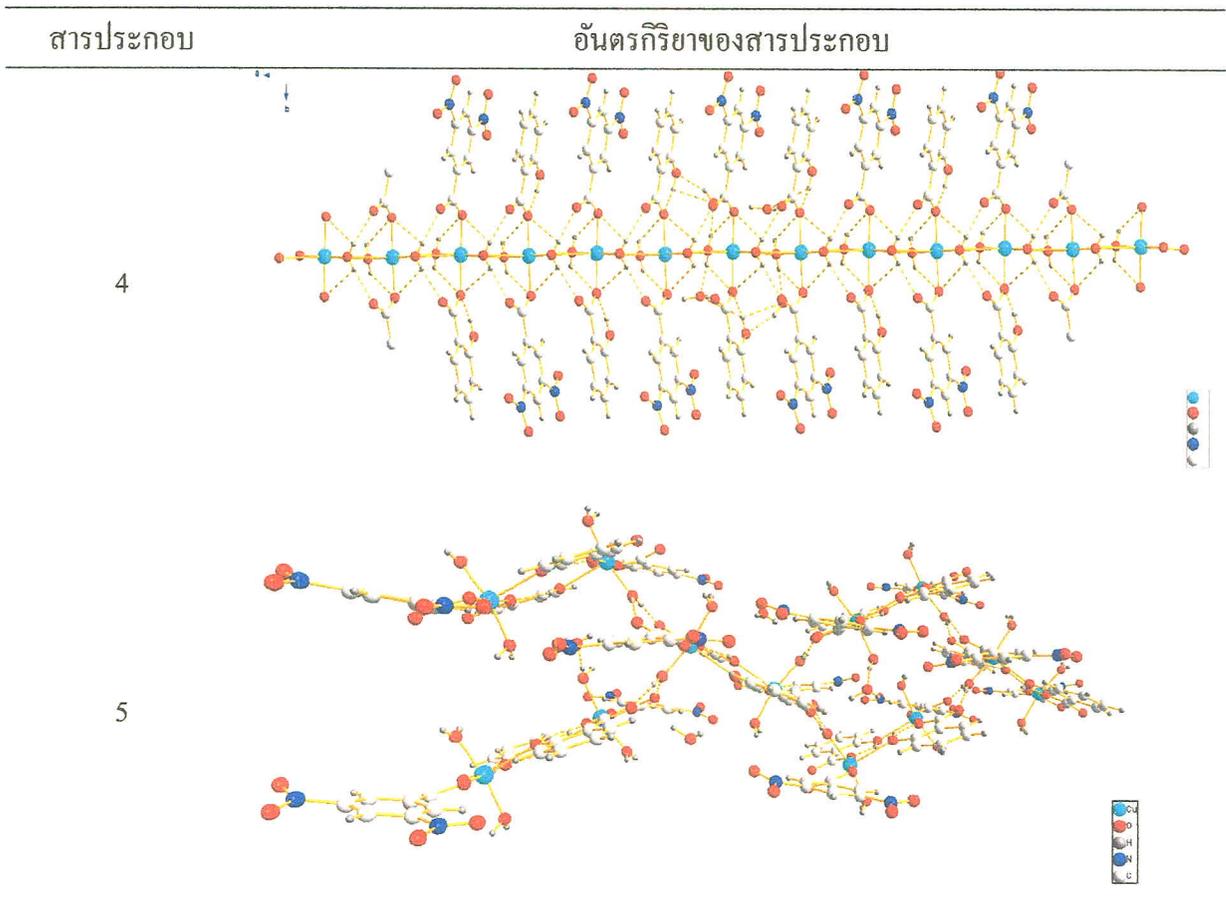
2



3



ตารางที่ 6.9 อันตรกิริยาของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5 (ต่อ)



สารประกอบ 1 มีอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล $C(O)-H \cdots N$ เท่ากับ 4.407 Å ทำให้เกิดไดเมอร์เพิ่มความเสถียรให้กับผลึกสารประกอบ 1

สารประกอบ 2 มีอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล 2 โมเลกุล และอันตรกิริยาภายในโมเลกุล (intramolecular interaction) ที่เกิดผ่าน $O(13)-OH(13) \cdots O(12)$ เท่ากับ 2.617 Å จึงทำให้โมเลกุลของสารประกอบ 2 มีความเสถียรมากขึ้น และน่าจะส่งผลให้จุดหลอมเหลวสูงขึ้นเล็กน้อย

สารประกอบ 3 มีอันตรกิริยาอย่างอ่อนภายในโมเลกุลระหว่าง H ของ HBA กับ O11 ของ Bz มีความยาวเท่ากับ 2.627 Å สารประกอบ 3 ไม่ปรากฏอันตรกิริยาอื่นๆ

สารประกอบ 4 มีอันตรกิริยาที่เกิดผ่านไฮโดรเจนของน้ำ และ ออกซิเจนของหมู่คาร์บอกซิเลตของลิแกนด์ DNBA เกิดพันธะ $(O-H \cdots O)$ ซึ่งมีอันตรกิริยาเหล่านี้เพิ่มความเสถียรให้กับผลึกสารประกอบ 4 น่าจะมาจากความบริสุทธิ์ของผลึก และทำให้เกิดพอลิเมอร์ 3 มิติได้ผ่านอันตรกิริยาภายในโมเลกุล และพอลิเมอร์ระหว่างโมเลกุล

สารประกอบ 5 มีอันตรกิริยาภายในโมเลกุลและระหว่างโมเลกุลจากโมเลกุลน้ำอิสระ 2 โมเลกุล ทำให้สารประกอบ 5 เกิดโครงสร้างแบบ 3 มิติ มีความเสถียรกว่าเดิม

6.10 สเปกตรัมอินฟราเรดที่แสดงหมู่ฟังก์ชันหลัก ๆ ของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

รวบรวมสัญญาณการสั่นของหมู่ฟังก์ชันหลัก ๆ ของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5 ดังแสดงในตาราง

6.10 และสามารถศึกษารายละเอียดสัญญาณทั้งหมดในภาพผนวก 3

ตารางที่ 6.10 สเปกตรัมอินฟราเรดของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

1	2	3	4	5	Frequency, cm ⁻¹	Bond	Functional group
	3748(s)	3(s)			3640–3610 (s, sh)	O–H stretch, free hydroxyl	alcohol, phenol
	3455(m)	3447(m)	3360(m)	3425(m)	3300–2500 (m)	O–H stretch	carboxylic acid
3093(s)	3097(s)	3119(s) 3062(m)	3102(s)	3093(s) 2928(ms)	3100–3000 (s)	C–H stretch	aromatic
1704(s)	1734(s)	678(s)	1618(s)	1624(s)	1760–1665 (s)	C=O stretch	carboxylic acid
1631(m)	1629(m)	1612(m)	1593(m)	1577(m)	1600–1585 (m)	C–C stretch (in–ring)	aromatic
1547	1545	-	1542 (s)	1542 (s)	1550–1475 (s)	N–O asymmetric stretch	nitro compound
1471 (m)	1469(m)	1453(m)	1467(m)	1457 (m)	1500–1400 (m)	C–C stretch (in–ring)	aromatic
1348(m)	1347 (m)	-	1345 (m)	1346 (m)	1360– 1290(m)	N–O symmetric stretch	nitro compound
1286(s)	1278 (s)	-	1251 (s)	(s)	1320–1210 (s)	C–O stretch	carboxylic acid
923 (m)	923(m)	834(m)	919 (m)	916 (m)	950–910 (m)	O–H bend	carboxylic acid
697 (s)	665 (s)	684(s)	697 (s)	674 (s)	900–675 (s)	C–H "oop"	aromatic
		504(m)	526 (m)	535 (m)	590-520 (m)	Cu–O stretch	Metal-O

หมายเหตุ br= broad ; m=medium; s=strong; sh=shoulder; w=weak; v=stretching, δ =bending

สารประกอบ 1 คือ กรด 3,5-ไดไนโตรเบนโซอิก ดังนั้น จะประกอบด้วยหมู่ฟังก์ชันหลัก คือ การยืดของ O-H ของหมู่คาร์บอกซิลิก (3092 cm^{-1}) สัญญาณการยืดของ C=O (1702 cm^{-1}) และสัญญาณการยืดของ C-H ของแอมโรแมติก (3097 cm^{-1}) สัญญาณของ C=C ของแอมโรแมติก (1629 cm^{-1}) และ สัญญาณของหมู่ไนโตรปรากฏสัญญาณเข้ม 2 ย่านซึ่งเป็นสัญญาณการยืดแบบอสมมาตรและสมมาตรปรากฏที่ 1547 cm^{-1} และ 1348 cm^{-1} ตามลำดับ สารประกอบ 2 คือกรดซาลิไซลิก มีสัญญาณของหมู่ฟังก์ชันคล้ายกับสารประกอบ 1 แต่แตกต่างที่ จะไม่มีสัญญาณของหมู่ไนโตรแต่จะมีสัญญาณการยืดของไฮดรอกซี O-H ที่เลขคลื่น 3445 cm^{-1} ที่สูงกว่าการยืดของ O-H ของหมู่คาร์บอกซิลิก สารประกอบ 3 เป็นสารประกอบเชิงซ้อนที่มีลิแกนด์กรดเบนโซอิกและเบนโซเอตเป็นส่วนประกอบสัญญาณหมู่ฟังก์ชันจะต่ำกว่าในลิแกนด์เล็กน้อย ซึ่งปกติสำหรับสารประกอบเชิงซ้อน สัญญาณที่เพิ่มมาคือ Cu-O ที่ 504 cm^{-1} ซึ่งสอดคล้องกับสัญญาณของ M-O (โดยที่ M=ไอออนโลหะใด ๆ) ที่รายงานโดย A.K. Brisdon , 1998 และ Oxford Chemistry Press, Oxford, 1998

พอลิเมอร์ 4 และ 5 หรือสารประกอบ 4 และ 5 มีสัญญาณหลัก ๆ ใกล้เคียงกัน สัญญาณของลิแกนด์ HSAI จะต่ำกว่าในสารประกอบ 2 และลิแกนด์ DNBA จะต่ำกว่าในสารประกอบ 1 สัญญาณ Cu-O อยู่ในย่าน $590\text{-}520\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งสอดคล้องกับสัญญาณของ M-O สิ่งที่แตกต่างกันจากสารประกอบ 3 คือสัญญาณการยืดของ O-H ของน้ำอิสระที่สูงกว่า 3360 cm^{-1}

อย่างไรก็ตามสิ่งที่สังเกตเห็นได้อย่างชัดเจนคือ การกว้างของสเปกตรัมช่วง $> 2800\text{ cm}^{-1}$ ยืนยันการเกิดอันตรกิริยาซึ่งสอดคล้องกับข้อมูลการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึก

6.11 สเปกตรัมอุลตราไวโอเลต-วิสิเบิลของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

สเปกตรัมทั้งหมดรวบรวมไว้ในตารางที่ 6.11

ตารางที่ 6.11 ค่าการดูดกลืนแสงของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

สารประกอบ	ค่าความยาวคลื่น (nm)	แอมพลิจูด	การแทนที่
1	297	0.92	$\pi \rightarrow \pi^*$
	305	0.98	$\pi \rightarrow \pi^*$
2	305	0.84	n- π^*
	284	1.63	$\pi \rightarrow \pi^*$
	790	0.87	d-d
4	284	1.52	$\pi \rightarrow \pi^*$
	665	0.53	d-d
5	287	1.69	$\pi \rightarrow \pi^*$
	435	0.45	ML CT
	732	0.52	d-d

สารประกอบ 1 พบสเปกตรัมการดูดกลืนแสง UV-Vis ที่ 297 nm มีค่าแอมพลิจูดของแบนด์เท่ากับ 0.922 และความยาวคลื่นที่ 335 nm มีค่าแอมพลิจูดของแบนด์ เท่ากับ 0.325 ยืนยันว่าเป็นการแทนที่ชั้นของ $\pi \rightarrow \pi^*$ ของ C=C ของวงแหวนแอโรแมติก และ $n-\pi^*$ ของอิเล็กตรอนคู่อิสระของคาร์บอกซิลิก ออกซิเจน ตามลำดับ

สารประกอบ 2 พบสเปกตรัมการดูดกลืนแสง UV-Vis ที่ 305 nm เป็นเป็นการแทนที่ชั้นของ $n-\pi^*$ ของอิเล็กตรอนคู่อิสระของคาร์บอกซิลิกออกซิเจน

สารประกอบ 3 4 และ 5 เป็นสารประกอบเชิงซ้อน ดังนั้นจะพบการแทนที่ชั้นจาก $\pi \rightarrow \pi^*$ ของลิแกนด์ที่ต่ำกว่า 300 nm และแตกต่างกันกับสารประกอบอื่นคือสารประกอบ 5 มีการถ่ายโอนประจุจากลิแกนด์กับไอออนโลหะ (Metal-ligand charge transfer MLCT) ที่ 435 nm และอาศัยหลักการว่า สารประกอบจะดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นหนึ่งและจะปล่อยแสงที่เหลือจากการดูดกลืนแสงออกมา (ซึ่งตาของคนมองเห็น) และจากวงล้อของการดูดกลืนแสง ยืนยันว่าสารประกอบ 3 และ 5 มีลิแกนด์ ส่วนสารประกอบ 4 มีลิแกนด์ ซึ่งเป็นแทนที่ชั้นของ d-d ของ Cu^{2+} (d^9)

6.12 วิเคราะห์การสูญเสียน้ำหนักของสารประกอบ 3 4 และ 5

ตารางที่ 6.12 วิเคราะห์การสูญเสียน้ำหนักจากเทอร์โมแกรม TGA ของสารประกอบ 3 4 และ 5

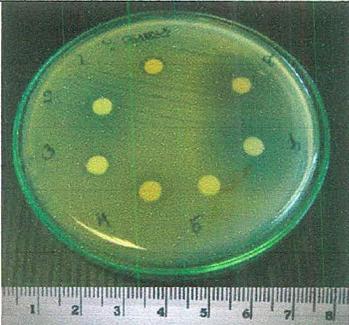
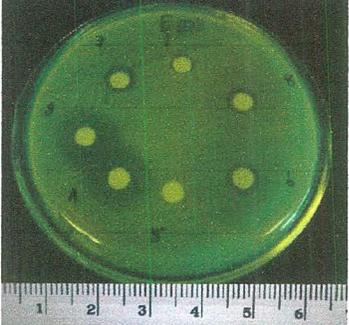
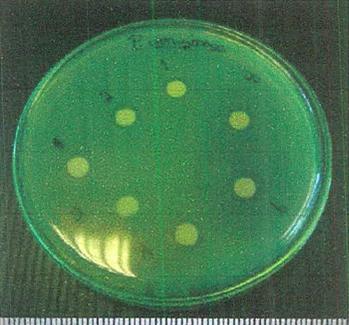
สารประกอบ	ขั้นสูญเสีย	อุณหภูมิ (°C)	น้ำหนักหายไป (%)	สูญเสีย	หมายเหตุ
3	1	193-230	27.755	HBA	
	2	285-350	43.119	BA	มีชั้นย่อยๆ 2 ครั้ง
	3	400-450	10.517	พันธะ Cu-Cu	
4	1	84	187	น้ำ	มีชั้นย่อยๆหลายชั้น
	2	210	63.8	ลิแกนด์	มีการเปลี่ยนแปลง
	3	623	19.8	ลิแกนด์	
	4	เกิน 1000	4.45	CuO	
5	1	163	6.1	ลิแกนด์น้ำ	
	2	336	90.161	ลิแกนด์ DNBA	

ผลการวิเคราะห์ของสารประกอบ 3 4 และ 5 พบว่าเทอร์โมแกรมของการวิเคราะห์การสูญเสีย น้ำหนักของโมเลกุลเมื่อได้รับความร้อนหรือเทอร์โมแกรมของ TGA สัมพันธ์กับเทอร์โมแกรมของ DTA ที่เป็นปฏิกิริยาคูดความร้อนเข้าไปเพื่อสลายพันธะ

โดยทั่วไปที่อุณหภูมิที่ต่ำกว่า 200 °C จะสัมพันธ์กับการสลายของน้ำในโครงสร้าง หรือน้ำอิสระ ช่วงสูงกว่านั้นจะเป็นการสลายของลิแกนด์ HSal BA HBA หรือ DNBA และถ้าสูงกว่า 400 °C จะเหลือ CuO ในที่สุด

6.13 การศึกษาฤทธิ์ในการยับยั้งการเจริญของจุลินทรีย์ของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

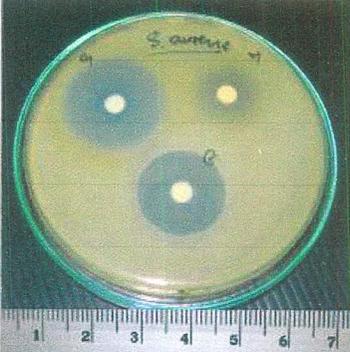
ตารางที่ 6.13 หมายเลขของสารประกอบ 1 2 3 และ 5 บนจานเพาะเชื้อที่ศึกษาฤทธิ์แต่ละชนิด

เชื้อ	หมายเลขบนจาน จานเพาะเชื้อ	หมายเลขของ สารประกอบ			
		1	2	3	5
<i>S. aureus</i>		1	2	6	8
<i>E. coli</i>		1	2	6	8
<i>P. aeruginosa</i>		1	2	6	8

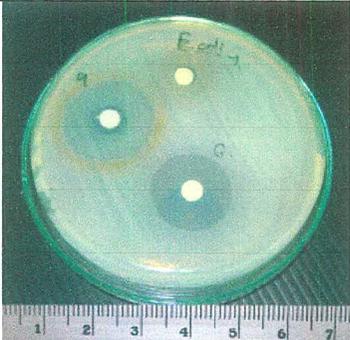
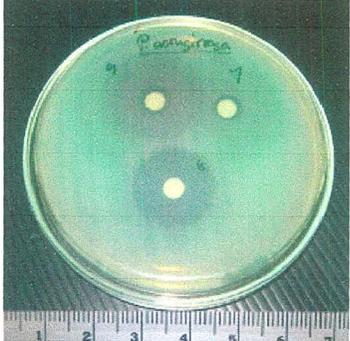
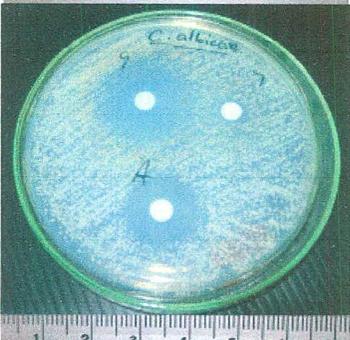
ตารางที่ 6.13 หมายเลขของสารประกอบ 1 2 3 และ 5 บนจานเพาะเชื้อที่ศึกษาฤทธิ์แต่ละชนิด (ต่อ)

เชื้อ	หมายเลขบนจานเพาะเชื้อ	หมายเลขของสารประกอบ			
		1	2	3	5
<i>C. albicans</i>		1	2	6	8
<i>A. niger</i>		1	2	6	8

ตารางที่ 6.14 หมายเลขของสารประกอบ 4 บนจานเพาะเชื้อที่ศึกษาฤทธิ์แต่ละชนิด

เชื้อ	จานเพาะเชื้อ	หมายเลขสารประกอบ 4
<i>S. aureus</i>		7

ตารางที่ 6.14 หมายเลขของสารประกอบ 4 บนจานเพาะเชื้อที่ศึกษาฤทธิ์แต่ละชนิด (ต่อ)

เชื้อ	จานเพาะเชื้อ	หมายเลขสารประกอบ 4
<i>E. coli</i>		7
<i>P. aeruginosa</i>		7
<i>C. albicans</i>		7
<i>A. niger</i>		7

ตารางที่ 6.15 ฤทธิ์การยับยั้งการเจริญของจุลินทรีย์ของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

ที่	เชื้อ	1	2	3	4	5	ขามาตรฐาน (วงใส)
1	<i>S. aureus</i>	10.3 mm	13.0 mm	17.3 mm	8.6 mm	12.0 mm	Gen. (20.3 mm)
2	<i>E. coli</i>	10.3 mm	8.6 mm	10.0 mm	6.6 mm	10.0 mm	Gen. (20.3 mm)
3	<i>P. aeruginosa</i>	11.6 mm	10.0 mm	9.6 mm	10.6 mm	10.3 mm	Gen. (22.0 mm)
4	<i>C. albicans</i>	11.3 mm	9.0 mm	7.0 mm	8.6 mm	16.3 mm	Am. (17.0 mm)
5	<i>A. niger</i>	-	-	11.0 mm	-	-	Am. (15.0 mm)

สารประกอบ 1 มีฤทธิ์การยับยั้งเชื้อทั้ง 4 ชนิดได้ปานกลาง ไม่มีฤทธิ์การยับยั้ง เชื้อรา *A. niger*

สารประกอบ 2 มีฤทธิ์การยับยั้งเหมือนสารประกอบ 1

สารประกอบ 3 มีฤทธิ์การยับยั้งต่อเชื้อแบคทีเรียแกรมบวก *S. aureus* ได้ดีที่สุดและรา *A. niger* ก่อนข้างดี ส่วนที่เหลือมีฤทธิ์อ่อนถึงปานกลาง

สารประกอบ 4 มีฤทธิ์การยับยั้งใกล้เคียงกับสารประกอบ 1 และ 2

สารประกอบ 5 ซึ่งเป็นพอลิเมอร์กับสารประกอบ 4 แต่มีมีฤทธิ์ฤทธิ์การยับยั้งก่อนข้างดีกว่าสารประกอบ 4

ถ้าพิจารณาเปรียบเทียบ พบว่าเชื้อ *S. aureus* จะถูกยับยั้งโดยสารประกอบ 3 ได้ดีที่สุด เชื้อ *C. albicans* จะถูกยับยั้งโดยสารประกอบ 4 ได้ดีที่สุด และมีเพียงสารประกอบ 3 เท่านั้นที่สามารถยับยั้งเชื้อ *A. niger* ได้ และจากขนาดของบริเวณยับยั้งเชื้อ สารประกอบ 3 ที่ได้ไปใช้ร่วมกับยาเคมีต้านเชื้อราเพื่อใช้เป็นแนวทางในการรักษาโรคติดเชื้อราประเภท *S.aureus* และ *A. niger* ในคลินิกได้อย่างมีประสิทธิภาพต่อไปในอนาคต ส่วนการยับยั้งเชื้ออีก 4 ชนิด ก่อนข้างดี

ตารางที่ 6.16 ความไวของการยับยั้งการเจริญของจุลินทรีย์ของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

สารประกอบ	Conc.mg/ml	ฤทธิ์การยับยั้งของสารต่อเชื้อ				
		<i>S.aureus</i>	<i>E.Coli</i>	<i>P.aeruginosa</i>	<i>C.albicans</i>	<i>A.niger</i>
1	25	moderate	moderate	moderate	high	-
2	25	high	moderate	moderate	moderate	-
3	25	high	weak	weak	weak	high
4	25	weak	weak	moderate	weak	-
5	25	moderate	moderate	moderate	high	-

ปริมาณยาหรือปริมาณสารประกอบต่ำสุดของที่ป้องกันไม่ให้เกิดการเจริญของเชื้อในการทดลอง หรือค่าการยับยั้งที่ความเข้มข้น 6.5 mg/ml ทุกสารประกอบ ยกเว้นในการยับยั้งเชื้อ *P.aeruginosa* มีค่าเท่ากับ 3.25 mg/ml ของสารประกอบ 3 และการยับยั้งเชื้อ *E.Coli* มีค่าเท่ากับ 3.25 mg/ml ของสารประกอบ 4

ตารางที่ 6.17 ค่า MIC ของสารประกอบ 1 2 3 4 และ 5

สารประกอบ	MIC (mg/ml)				
	<i>S.aureus</i>	<i>E.Coli</i>	<i>P.aeruginosa</i>	<i>C.albicans</i>	<i>A.niger</i>
1	6.5	6.5	6.5	6.5	6.5
2	6.5	6.5	6.5	6.5	6.5
3	6.5	6.5	3.25	6.5	6.5
4	6.5	3.25	6.5	6.5	6.5
5	6.5	6.5	6.5	6.5	6.5