

การศึกษาโครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน Bis(di-2-pyridylamine)propionato-copper(II) Bromide โดยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์บนผลึกเดี่ยว

บทคัดย่อ

การวิจัยนี้เป็นการขยายการศึกษาเกี่ยวกับ โครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(bipyam)_2(O_2CCH_2CH_3)]Y$ และการวิเคราะห์หาโครงสร้างผลึกของสาร โดยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์บนผลึกเดี่ยว โดยใช้โปรแกรม SHELXTL

ได้สังเคราะห์สารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(bipyam)_2(O_2CCH_2CH_3)]Br$ โดยวิธีเตรียมโดยตรง พร้อมวิเคราะห์ผลิตภัณฑ์จาก elemental microanalysis, อินฟราเรดสเปกตรัม, ดิฟฟิวส์รีเฟรคแตนซ์สเปกตรัม และสมบัติทางแม่เหล็ก จากการศึกษาโครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(bipyam)_2(O_2CCH_2CH_3)]Br$ โดยเทคนิคเอ็กซ์เรย์คริสตัลโลกราฟี พบว่าตกผลึกในระบบ โมโนคลินิก หมู่ปริภูมิ $P2_1/c$ มีโครงสร้างพื้นฐานของโครโมฟอร์ CuN_4O_2 แบบ cis-distorted octahedral แต่กลุ่มโพรพionatoโคออร์ดิเนตกับไอออนคอปเปอร์(II) อย่างอสมมาตรมาก ๆ $\Delta O = \{[Cu-O(2)]-[Cu-O(1)]\} = 0.672 \text{ \AA}$ ดังนั้นโครงสร้างที่เหมาะสมที่สุด สำหรับโครโมฟอร์ CuN_4OO' ของสารประกอบเชิงซ้อนนี้คือ แบบ square-pyramidal distorted octahedral ซึ่งมีรูปแบบการโคออร์ดิเนตกับไอออนคอปเปอร์(II) แบบ $(4+1+1^*)$

Crystal Structure Determination of Bis(di-2-pyridylamine)propionato-copper(II) Bromide by Single Crystal X-ray Diffraction Technique.

Abstract

This project sets out to extend the studies on the crystal structure of a series of complexes $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Y}$ and the crystal structure determination by the single crystal X-ray diffraction technique using the SHELXTL programme.

The complex of $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$ was prepared directly from its component. The characterisations using elemental microanalysis, infrared spectrum, diffuse reflectance spectrum and the magnetic moment were reported. The crystal structure of $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$ has been determined crystallographically and found to crystallise in the monoclinic system with the space group of $P2_1/c$. The structure involves a cis-octahedral CuN_4O_2 chromophore, but with very asymmetrically coordinated OXO group, $\Delta O = \{[\text{Cu}-\text{O}(2)] - [\text{Cu}-\text{O}(1)]\} = 0.672 \text{ \AA}$. The structure is best described as involving a square-pyramidal distorted octahedral $(4+1+1^*) \text{CuN}_4\text{OO}'$ chromophore.