

สารบัญ

	หน้า
กิตติกรรมประกาศ	ข
บทคัดย่อ	ค
Abstract	ง
สารบัญ	จ
สารบัญตาราง	ช
สารบัญรูป	ซ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความสำคัญและที่มาของปัญหา	1
1.2 โปรแกรมคอมพิวเตอร์ SHELXTL PC-V5.03	2
1.3 วัตถุประสงค์และขอบเขตของการวิจัย	3
บทที่ 2 การสังเคราะห์และสมบัติสเปกโทรสโกปีของสารประกอบเชิงซ้อน [Cu(II)(bipyam) ₂ (O ₂ CCH ₂ CH ₃)]Br	4
2.1 การสังเคราะห์สารประกอบเชิงซ้อน [Cu(II)(bipyam) ₂ (O ₂ CCH ₂ CH ₃)]Br	4
2.2 การวิเคราะห์สารประกอบเชิงซ้อน [Cu(II)(bipyam) ₂ (O ₂ CCH ₂ CH ₃)]Br	5
2.2.1 ฟลูออโรสเปกโตรสโกปีอินฟราเรดสเปกตรัม	5
2.2.2 อิเล็กตรอนดิฟฟิวส์รีเฟลคแตนซ์สเปกตรัม	6
บทที่ 3 การศึกษาหาโครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน [Cu(II)(bipyam) ₂ (O ₂ CCH ₂ CH ₃)]Br โดยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว	7
3.1 การวิเคราะห์หาโครงสร้างผลึกด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ SHELXTL PC V5.03	7
3.1.1 การสร้างไฟล์เริ่มต้น	7
3.1.2 การคำนวณหาตำแหน่งอะตอม	8
3.1.3 การดูโครงสร้างอะตอมเบื้องต้น	9
3.1.4 การขัดเกลาค่าตำแหน่งอะตอมและหาอะตอมเพิ่ม	9
3.1.5 การดูภาพโครงสร้างโมเลกุลและคัดเลือกอะตอมที่ถูกต้อง	9

สารบัญ(ต่อ)

	หน้า
3.1.6 การใส่ anisotropic และหา disorder atom	9
3.1.7 การหา H อะตอมหรือกำหนด H อะตอม	9
3.1.8 การสร้าง CIF ไฟล์และการพิมพ์ข้อมูลผลึกเพื่อการนำเสนอ	10
3.1.9 การใช้โปรแกรม PARST พิมพ์ข้อมูลผลึก	10
3.2 โครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน	
$[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	15
3.3 การเปรียบเทียบโครงสร้างผลึกและสมบัติสเปกโทรสโกปี	19
3.3.1 โครงสร้างผลึก	19
3.3.2 อิเล็กทรอนิกส์ฟิวส์รีเฟลคแตน์สเปกตรา	21
บทที่ 4 สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง	22
4.1 การสังเคราะห์และสมบัติสเปกโทรสโกปีของ	
$[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	22
4.2 การวิเคราะห์หาโครงสร้างและโครงสร้างผลึกของ	
$[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	23
4.2.1 การวิเคราะห์หาโครงสร้างผลึกด้วย โปรแกรม SHELXTL	23
4.2.2 โครงสร้างผลึกของ $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	24
เอกสารอ้างอิง	25
ภาคผนวก	26
ภาคผนวก ก. การติดตั้งโปรแกรมคอมพิวเตอร์ SHELXTL PC V5.03	27
ภาคผนวก ข. พิกัดของอะตอม ความยาวและมุมพันธะและเทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมใน โมเลกุลของ $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	30

สารบัญตาราง	หน้า
ตารางที่ 3.1 ข้อมูลผลึกและการจัดเคลตาสำหรับสารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	11
ตารางที่ 3.2 ความยาวพันธะ (Å), มุมพันธะ (°) และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานที่สำคัญของสารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	12
ตารางที่ 3.3 สมการของ least-square plane ในรูปแบบของ $\text{AX}+\text{BY}+\text{CZ} = \text{Z}$ เมื่อ X, Y, Z เป็นแกน orthogonal พร้อมค่าเบี่ยงเบน (Å) ของอะตอมที่เกี่ยวข้องในระนาบของสารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	13
ตารางที่ 3.4 ข้อมูลทางคริสตัลโลกราฟีของแอนไอออน $[\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3]^-$ และ $[\text{O}_2\text{CCH}_3]^-$	18
ตารางที่ 3.5 แสดงข้อมูลโครงสร้างโมเลกุลของสารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Y}$ เมื่อ $[\text{Y}] = \text{Br}^-$ [1], NO_3^- [2], I^- [3] และ Cl^- [4]	20
ตารางที่ 3.6 แสดงรีเฟลคแตนซ์สเปกตรัมของ $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Y}$ เมื่อ $\text{Y} = \text{Br}^-, \text{NO}_3^-, \text{I}^-$ และ Cl^-	21
ตารางที่ ข 1 พิกัดของอะตอมในโมเลกุลของ $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	30
ตารางที่ ข 2 พิกัดของอะตอมไฮโดรเจนในโมเลกุลของ $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	31
ตารางที่ ข 3 ความยาวพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	32
ตารางที่ ข 4 มุมพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	34
ตารางที่ ข 5 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล $[\text{Cu(II)}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	35

สารบัญรูป

	หน้า
รูปที่ 2.1 แสดงอินฟราเรดสเปกตรัมของ $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	5
รูปที่ 2.2 แสดงอิเล็กทรอนิกส์เฟลคแดนซ์สเปกตราในระบบโพรพืออเนตของ สารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Y}$ เมื่อ $\text{Y} = \text{NO}_3^-$ (A), Cl^- (B), Br^- (C) และ I^- (D)	6
รูปที่ 3.1 แสดงโครงสร้างแบบ asymmetric cis-distorted octahedral และ ORTEP thermal ellipsoid plot, 30% probability ellipsoids ของโครโมฟอร์ CuN_4O_2 ของสารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	15
รูปที่ 3.2 แสดงโครงสร้างแบบ distorted square-based pyramidal five-coordinate ของโครโมฟอร์ $\text{CuN}_3\text{O}_2\text{N}'$ ที่มีพันธะที่ 6 ยาวมาก	16
รูปที่ 3.3 แสดงโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$, site occupantion factor ของ C(23) 60%	17
รูปที่ 3.4 แสดงโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$, site occupantion factor ของ C(23) 40%	18
รูปที่ 3.5 แสดงเซลล์หน่วยของ $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$	19