

# ภาคผนวก

## ภาคผนวก ก

## การติดตั้งโปรแกรมคอมพิวเตอร์ SHELXTL PC V5.03

การติดตั้งโปรแกรมใช้แผ่นดิสก์ติดตั้ง 3 แผ่นคือ SHELXTL PC Disk 1/3 ,2/3 และ 3/3

## 1. การติดตั้งโปรแกรม

1.1 ใส่แผ่น SHELXTL PC Disk 1/3 ใน disk drive A

1.2 ที่ C:\ พิมพ์คำสั่งดังนี้เพื่อติดตั้งโปรแกรมลงใน drive C

C:\ a:\install กด enter

หลังคำสั่ง install ไม่มีคำสั่งระบุ drive โปรแกรมจะติดตั้งลงใน drive C โดยตัวโปรแกรมจะถือ drive C เป็น default drive หรือถ้าต้องการติดตั้งใน drive D ให้ระบุดังนี้

C:\ a:\install D กด enter

1.3 หน้าจอจะปรากฏข้อความแสดงการติดตั้งดังนี้

SHELXTL V5 PC Installation 2.4

S. A. X. I. 8 FEB 1995

Installing shelxtl files

เมื่อติดตั้งแผ่นแรกเสร็จจะปรากฏข้อความให้ใส่แผ่น SHELXTL PC Disk 2/3 ดังนี้

Insert the floppy labeled SHELXTL PC Disk 2/3

Strike any key when ready

และจะปรากฏอีกครั้งเมื่อติดตั้งแผ่นที่ 2 เสร็จและให้ใส่แผ่นที่ 3 เมื่อติดตั้งโปรแกรมทั้ง 3 แผ่นเสร็จจะปรากฏข้อความเกี่ยวกับการติดตั้งโปรแกรม Kermit ซึ่งไม่ติดตั้งในขณะนี้

Included with this software distribution you  
might have received the Kermit communications  
software. You may install it at this time or  
you may skip this step and continue with the  
installation.

Do you wish to install kermit now ? (Y,N)

ให้กด N (No) เพื่อยกเลิกการติดตั้งโปรแกรมดังกล่าว  
จากนั้นจะปรากฏข้อความแสดงว่าการติดตั้งเสร็จสิ้นแล้วและข้อความแนะนำการใช้  
โปรแกรมดังนี้

SHELXTL Installation complete .  
Strike any key when ready

หลังจากกดปุ่มใด ๆ

to use the shelxtl software , you  
will need to call SAXI\_SXL.BAT to  
set up the environment. Edit the  
autoexec.bat file and add the line  
call c:\saxi\saxi\_sxl.bat to it.

## 2 . การติดตั้งและใช้โปรแกรมภายใต้ระบบปฏิบัติการ Windows 95

ในระบบปฏิบัติการ Windows 95 การติดตั้งโปรแกรมจะมีขั้นตอนในการติดตั้งเช่นเดียวกันกับในระบบ Dos แต่การติดตั้งใน Windows 95 ควรทำภายใต้ User interface แบบ Dos Mode ซึ่งเข้าสู่ Dos Mode ได้ในขณะที่เปิดเครื่องจะปรากฏข้อความ Starting Windows 95 ให้กดปุ่ม F8 จะปรากฏเมนูดังนี้

### Microsoft Windows 95 Startup Menu

1. Normal
2. Logged (\BOOTLOG.TXT)
3. Safe Mode
4. Step-by-Step confirmation
5. Command prompt only
6. Safe Mode Command prompt only
7. Previous version of MS-DOS

Enter a choice: \_

F5=Safe Mode    Shift+F5=Command prompt    Shift+F8=Step-by-Step confirmation [N]  
จากเมนูที่ปรากฏขึ้นให้เลือกหมายเลข 5 จะเป็นการเข้าสู่ Dos Mode จากนั้นทำการติดตั้งตามขั้นตอนดังที่ได้กล่าวไปแล้ว

สำหรับการเรียกใช้โปรแกรม SHELXTL ภายใต้ระบบปฏิบัติการ Windows 95 นั้นจำเป็นต้องทำใน Dos Mode เนื่องจากโปรแกรมย่อย XP ไม่สามารถทำงานได้ภายใต้สภาวะแวดล้อมของ Windows ดังนั้นใน Microsoft Windows 95 Startup Menu ให้เลือกหมายเลข 5 Command prompt only

### 3. แก้ไขไฟล์ autoexec.bat

การแก้ไขไฟล์ autoexec.bat สามารถทำได้หลายวิธี แต่ในที่นี้จะใช้ Editor ของ DOS ดังนี้  
ที่ C:\ พิมพ์ Edit autoexec.bat กด enter จะปรากฏหน้าต่างแก้ไขของไฟล์ autoexec.bat ขึ้นจากนั้นให้พิมพ์คำสั่งเพิ่มเข้าไปดังนี้

```
Call C:\SAXISAXI_SXL.BAT
```

หากมีบรรทัดคำสั่ง path อยู่ให้เพิ่ม C:\SAXISXTL เข้าไปหรือหากยังไม่มีให้ใส่เข้าไปดังนี้

```
Path = ..;C:\windows\command;C:\SAXISXTL;
```

จากนั้นทำการบันทึกไฟล์ autoexec.bat ที่แก้ไขแล้ว แล้วจึงจบ โปรแกรม Editor

### 3. การแก้ไขไฟล์ Config.sys

การแก้ไขสามารถทำได้เช่นเดียวกับไฟล์ autoexec.bat ด้วยการ ใช้ Editor ของ dos หลังจากปรากฏหน้าต่างแก้ไขให้พิมพ์คำสั่งเพิ่มเข้าไปดังนี้ ( หากคำสั่งใดมีอยู่แล้วไม่ต้องพิมพ์ใส่อีก )

```
DEVICE=C:\DOS\HIMEM.SYS
```

```
DEVICE=C:\DOS\ANSI.SYS
```

```
FILES=30*
```

```
BUFFER=30*
```

```
DOS=HIGH*
```

```
SHELL=C:\DOS\COMMAND.COM C:\DOS\ /E:512 /P*
```

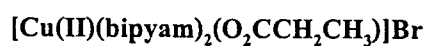
\* หมายเหตุ คำสั่งเหล่านี้ไม่มีผลกับการทำงานของโปรแกรมมากนักจึงอาจไม่ใส่ก็ได้

ในไฟล์ config.sys ถ้ามีคำสั่ง DEVICE=C:\DOS\EMM386.EXE noems อยู่ให้ลบบรรทัดคำสั่งนี้ทิ้งหรือใส่คำสั่ง REM ไว้ข้างหน้าคำสั่งดังกล่าวก็ได้ สำหรับระบบปฏิบัติการ Windows 95 จะไม่มีคำสั่งดังกล่าว แต่จะมีคำสั่ง keyb th,,C:\WINDOWS\COMMAND\keybrd5.sys แทน ให้ใส่คำสั่ง REM ไว้หน้าบรรทัดนี้ บันทึกไฟล์แล้วออกจากโปรแกรม Edit

จากนั้นให้ทำการ Restart เครื่องคอมพิวเตอร์ใหม่เพื่อให้การติดตั้ง โปรแกรมเสร็จสมบูรณ์

## ภาคผนวก ข

พิกัดของอะตอม ความยาวและมุมพันธะและเทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล

ตารางที่ ข 1 พิกัดของอะตอมในโมเลกุลของ  $[\text{Cu(II)(bipyam)}_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$ 

อะตอม	x	y	z	U(eq)
Br	10575(1)	-2673(1)	1028(1)	72(1)
Cu	6840(1)	5696(1)	1234(1)	41(1)
O(1)	6162(3)	3755(4)	894(2)	55(1)
O(2)	5709(3)	3639(5)	1866(2)	71(1)
N(1)	5490(3)	6750(5)	1193(2)	43(1)
N(2)	7271(3)	7183(5)	1916(2)	43(1)
N(3)	5583(4)	7599(6)	2219(2)	51(1)
N(4)	8072(3)	4312(5)	1293(2)	48(1)
N(5)	7564(3)	6801(5)	469(2)	47(1)
N(6)	8390(4)	4471(6)	228(2)	53(1)
C(1)	4907(4)	6530(7)	675(2)	52(1)
C(2)	3898(4)	6757(7)	643(3)	61(2)
C(3)	3410(5)	7243(8)	1166(3)	66(2)
C(4)	3978(4)	7541(7)	1698(3)	59(2)
C(5)	5023(4)	7280(6)	1696(2)	45(1)
C(6)	6607(4)	7818(6)	2311(2)	45(1)
C(7)	6947(5)	8699(7)	2816(3)	56(1)
C(8)	7952(6)	8958(8)	2904(3)	69(2)
C(9)	8636(5)	8349(7)	2491(3)	59(2)
C(10)	8274(4)	7483(6)	2005(3)	52(1)
C(11)	8252(4)	3557(7)	1837(3)	59(2)
C(12)	8777(5)	2195(8)	1888(4)	72(2)
C(13)	9139(5)	1501(9)	1358(4)	78(2)

ตารางที่ ข 1 พิกัดของอะตอมในโมเลกุลของ  $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$  (ต่อ)

อะตอม	x	y	z	U(eq)
C(14)	9007(4)	2269(7)	807(4)	63(2)
C(15)	8483(4)	3692(6)	782(2)	48(1)
C(16)	8165(4)	5998(6)	93(2)	45(1)
C(17)	8559(4)	6679(9)	-440(2)	62(2)
C(18)	8363(5)	8216(10)	-554(3)	76(2)
C(19)	7790(5)	9070(9)	-150(3)	71(2)
C(20)	7405(5)	8331(7)	348(3)	62(2)
C(21)	5730(5)	3048(7)	1343(3)	64(2)
C(22)	5329(13)	1404(16)	1278(6)	141(5)
C(23A)	4992(19)	975(19)	690(7)	101(5)
C(23B)	4420(25)	1567(41)	936(17)	138(11)

ตารางที่ ข 2 พิกัดของอะตอมไฮโดรเจนในโมเลกุลของ  $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$

อะตอม	x	y	z	U(eq)
H(22A)	4577(90)	934(122)	1468(52)	169
H(22B)	5515(102)	1039(169)	887(77)	169
H(23A)	4729(19)	-74(19)	702(7)	151
H(23B)	4483(19)	1666(19)	521(7)	151
H(23C)	5588(19)	1003(19)	438(7)	151
H(23D)	4157(25)	523(41)	888(17)	207
H(23E)	3913(25)	2220(41)	1121(17)	207
H(23F)	4590(25)	1981(41)	539(17)	207
H(1)	5251(37)	5988(57)	355(24)	48(14)
H(2)	3385(48)	6585(76)	288(30)	84(19)
H(3)	2849(46)	7419(66)	1195(28)	61(19)
H(4)	3677(46)	7925(69)	2045(29)	74(19)
H(7)	6473(47)	8975(71)	3043(29)	69(20)

ตารางที่ ข 2 พิกัดของอะตอมไฮโดรเจนใน โมเลกุลของ  $[\text{Cu(II)(bipyam)}_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$   
( ต่อ )

อะตอม	x	y	z	U(eq)
H(8)	8194(41)	9455(60)	3225(27)	57(16)
H(9)	9353(43)	8520(66)	2508(25)	61(16)
H(10)	8822(42)	6948(66)	1682(27)	69(17)
H(11)	7955(42)	4102(63)	2181(28)	62(16)
H(12)	8842(46)	1623(76)	2271(30)	78(19)
H(13)	9509(61)	664(92)	1345(39)	114(30)
H(14)	9222(47)	1923(74)	446(30)	75(20)
H(17)	9089(45)	5935(67)	-672(28)	73(18)
H(18)	8749(56)	8691(89)	-876(37)	108(25)
H(19)	7753(52)	10043(84)	-199(33)	90(24)
H(20)	6941(35)	8830(53)	630(21)	36(12)
H(3A)	5335(35)	7911(55)	2414(22)	19(14)
H(6A)	8583(29)	4062(46)	6(19)	7(11)

ตารางที่ ข 3 ความยาวพันธะใน โมเลกุล  $[\text{Cu(II)(bipyam)}_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$

พันธะ	ความยาวพันธะ ( Å )
Cu-N(1)	1.987(4)
Cu-N(4)	2.005(4)
Cu-O(1)	2.015(3)
Cu-N(2)	2.023(4)
Cu-N(5)	2.142(4)
Cu-O(2)	2.687(3)
O(1)-C(21)	1.283(6)
O(2)-C(21)	1.242(7)

ตารางที่ ข 3 ความยาวพันธะในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$  ( ต่อ )

พันธะ	ความยาวพันธะ ( Å )
N(1)-C(5)	1.338(6)
N(1)-C(1)	1.363(6)
N(2)-C(6)	1.344(6)
N(2)-C(10)	1.352(6)
N(3)-C(6)	1.368(7)
N(3)-C(5)	1.370(7)
N(4)-C(15)	1.347(6)
N(4)-C(11)	1.362(7)
N(5)-C(16)	1.331(6)
N(5)-C(20)	1.347(7)
N(6)-C(16)	1.367(7)
N(6)-C(15)	1.377(7)
C(1)-C(2)	1.338(8)
C(2)-C(3)	1.374(9)
C(3)-C(4)	1.389(9)
C(4)-C(5)	1.388(7)
C(6)-C(7)	1.396(7)
C(7)-C(8)	1.349(9)
C(8)-C(9)	1.379(9)
C(9)-C(10)	1.367(8)
C(11)-C(12)	1.354(9)
C(12)-C(13)	1.384(10)
C(13)-C(14)	1.371(10)
C(14)-C(15)	1.395(8)
C(16)-C(17)	1.399(7)
C(17)-C(18)	1.358(10)
C(18)-C(19)	1.371(10)

ตารางที่ ข 3 ความยาวพันธะในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$  (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(19)-C(20)	1.355(8)
C(21)-C(22)	1.504(12)
C(22)-C(23A)	1.39(2)
C(22)-C(23B)	1.40(3)

ตารางที่ ข 4 มุมพันธะในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$

มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)	มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)
N(1)-Cu-N(4)	170.7(2)	N(1)-Cu-O(1)	88.1(2)
N(4)-Cu-O(1)	83.7(2)	N(1)-Cu-N(2)	89.3(2)
N(4)-Cu-N(2)	96.1(2)	O(1)-Cu-N(2)	154.1(2)
N(1)-Cu-N(5)	99.9(2)	N(4)-Cu-N(5)	86.7(2)
O(1)-Cu-N(5)	106.1(2)	N(2)-Cu-N(5)	99.7(2)
C(21)-O(1)-Cu	107.8(3)	C(5)-N(1)-C(1)	117.5(4)
C(5)-N(1)-Cu	122.3(3)	C(1)-N(1)-Cu	117.6(3)
C(6)-N(2)-C(10)	118.1(4)	C(6)-N(2)-Cu	122.8(3)
C(10)-N(2)-Cu	119.0(3)	C(6)-N(3)-C(5)	131.4(5)
C(15)-N(4)-C(11)	117.4(5)	C(15)-N(4)-Cu	120.7(3)
C(11)-N(4)-Cu	117.6(4)	C(16)-N(5)-C(20)	118.1(4)
C(16)-N(5)-Cu	121.4(3)	C(20)-N(5)-Cu	120.5(3)
C(16)-N(6)-C(15)	131.5(5)	C(2)-C(1)-N(1)	124.4(5)
C(1)-C(2)-C(3)	118.2(6)	C(2)-C(3)-C(4)	119.4(6)
C(5)-C(4)-C(3)	119.1(6)	N(1)-C(5)-N(3)	119.7(4)
N(1)-C(5)-C(4)	121.3(5)	N(3)-C(5)-C(4)	119.0(5)
N(2)-C(6)-N(3)	119.8(4)	N(2)-C(6)-C(7)	120.9(5)
N(3)-C(6)-C(7)	119.3(5)	C(8)-C(7)-C(6)	120.1(6)
C(7)-C(8)-C(9)	119.3(6)	C(10)-C(9)-C(8)	118.9(6)
N(2)-C(10)-C(9)	122.6(5)	C(12)-C(11)-N(4)	123.9(6)

ตารางที่ ข 4 มุมพันธะในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$  (ต่อ)

มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)	มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)
C(11)-C(12)-C(13)	118.6(7)	C(14)-C(13)-C(12)	118.6(7)
C(13)-C(14)-C(15)	120.4(6)	N(4)-C(15)-N(6)	119.8(5)
N(4)-C(15)-C(14)	120.8(5)	N(6)-C(15)-C(14)	119.4(5)
N(5)-C(16)-N(6)	119.1(4)	N(5)-C(16)-C(17)	121.4(5)
N(6)-C(16)-C(17)	119.4(5)	C(18)-C(17)-C(16)	118.7(6)
C(17)-C(18)-C(19)	120.0(6)	C(20)-C(19)-C(18)	118.4(7)
N(5)-C(20)-C(19)	123.2(6)	O(2)-C(21)-O(1)	121.2(5)
O(2)-C(21)-C(22)	116.9(7)	O(1)-C(21)-C(22)	121.6(7)
C(23A)-C(22)-C(23B)	44.4(13)	C(23A)-C(22)-C(21)	115.9(11)
C(23B)-C(22)-C(21)	105(2)	C(23B)-C(23A)-C(22)	68(2)

ตารางที่ ข 5 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล  $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Br	53(1)	93(1)	71(1)	-17(1)	20(1)	11(1)
Cu	42(1)	47(1)	33(1)	-6(1)	11(1)	-3(1)
O(1)	62(2)	59(2)	45(2)	-17(2)	15(2)	-10(2)
O(2)	90(3)	74(3)	52(2)	3(2)	30(2)	-20(2)
N(1)	41(2)	51(2)	38(2)	-6(2)	8(2)	1(2)
N(2)	42(2)	51(2)	37(2)	-4(2)	7(2)	-5(2)
N(3)	47(3)	70(3)	38(3)	-17(2)	17(2)	4(2)
N(4)	52(2)	45(2)	46(2)	1(2)	10(2)	2(2)
N(5)	47(2)	49(3)	44(2)	-1(2)	16(2)	-1(2)
N(6)	58(3)	61(3)	40(3)	-19(2)	23(2)	3(2)
C(1)	57(3)	60(3)	38(3)	-5(3)	-1(2)	-1(3)
C(2)	57(4)	74(4)	53(3)	2(3)	-7(3)	-7(3)
C(3)	39(3)	77(4)	81(5)	15(3)	-3(3)	2(3)

ตารางที่ ข 5 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล  $[\text{Cu(II)(bipyam)}_2$

$(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{Br}$  (ต่อ)



พจนานุกรมสารานุกรมวิทยาศาสตร์

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(4)	51(3)	69(4)	58(3)	-5(3)	15(3)	6(3)
C(5)	48(3)	50(3)	36(3)	-1(2)	8(2)	-2(2)
C(6)	54(3)	47(3)	33(2)	-3(2)	8(2)	-1(2)
C(7)	70(4)	57(3)	41(3)	-14(3)	1(3)	-4(3)
C(8)	91(5)	67(4)	49(3)	-8(3)	-19(3)	-8(4)
C(9)	54(3)	53(3)	69(4)	-3(3)	-13(3)	-7(3)
C(10)	46(3)	53(3)	58(3)	0(3)	4(3)	-4(2)
C(11)	65(4)	56(4)	58(3)	6(3)	16(3)	1(3)
C(12)	71(4)	64(4)	80(5)	19(4)	7(4)	2(3)
C(13)	68(4)	61(4)	106(6)	8(4)	25(4)	7(3)
C(14)	49(3)	54(4)	87(5)	-11(4)	24(3)	1(3)
C(15)	39(3)	47(3)	58(3)	-4(3)	13(2)	-3(2)
C(16)	39(3)	57(3)	39(3)	-3(2)	7(2)	-4(2)
C(17)	59(3)	89(5)	38(3)	5(3)	20(3)	-2(3)
C(18)	67(4)	108(6)	53(4)	29(4)	18(3)	-8(4)
C(19)	76(4)	66(5)	70(4)	20(4)	14(3)	-10(4)
C(20)	66(4)	62(4)	58(3)	3(3)	19(3)	-2(3)
C(21)	70(4)	54(3)	70(4)	-1(3)	21(3)	-25(3)
C(22)	175(12)	130(9)	119(9)	-21(8)	38(9)	-84(9)
C(23A)	144(16)	69(9)	89(11)	-7(7)	-5(10)	-31(10)
C(23B)	151(28)	144(26)	119(24)	-17(20)	-16(22)	42(22)