

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก

พิกัดของอะตอม ความยาวและมุมพันธะและเทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล
ของ $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)] \text{X}$ เมื่อ $\text{X} = \text{I}^-$ (I) และ $[\text{NO}_3]^-$ (II)

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

อะตอม	x	y	z	U(eq)
I	5551 (1)	7597 (1)	1060 (1)	54 (1)
Cu	1830 (1)	9296 (1)	1268 (1)	36 (1)
O(1)	1200 (3)	11301 (4)	940 (2)	49 (1)
O(2)	765 (3)	11379 (5)	1902 (2)	63 (1)
N(1)	503 (3)	8279 (5)	1195 (2)	38 (1)
N(2)	2200 (3)	7760 (5)	1956 (2)	39 (1)
N(3)	529 (3)	7411 (5)	2219 (2)	45 (1)
N(4)	3061 (3)	10620 (5)	1353 (2)	41 (1)
N(5)	2525 (3)	8178 (5)	512 (2)	43 (1)
N(6)	3348 (4)	10523 (5)	285 (2)	45 (1)
C(1)	-34 (4)	8506 (6)	658 (2)	46 (1)
C(2)	-1017 (4)	8274 (7)	595 (3)	56 (1)
C(3)	-1534 (4)	7760 (7)	1108 (3)	58 (2)
C(4)	-1002 (4)	7480 (7)	1643 (3)	50 (1)
C(5)	18 (4)	7741 (5)	1674 (2)	39 (1)
C(6)	1525 (4)	7175 (5)	2333 (2)	39 (1)
C(7)	1818 (5)	6277 (7)	2851 (3)	57 (2)
C(8)	2799 (5)	5974 (8)	2961 (3)	64 (2)
C(9)	3491 (5)	6541 (7)	2564 (3)	60 (2)
C(10)	3171 (4)	7419 (6)	2074 (3)	49 (1)
C(11)	3261 (4)	11342 (6)	1905 (2)	49 (1)
C(12)	3828 (5)	12644 (7)	1975 (3)	61 (2)
C(13)	4218 (5)	13334 (8)	1455 (3)	64 (2)
C(14)	4043 (4)	12613 (6)	891 (3)	50 (1)
C(15)	3481 (3)	11237 (5)	855 (2)	38 (1)
C(16)	3121 (3)	8954 (6)	149 (2)	42 (1)
C(17)	3511 (5)	8271 (8)	-370 (2)	53 (1)
C(18)	3329 (5)	6733 (9)	-497 (3)	65 (2)
C(19)	2753 (5)	5866 (8)	-99 (3)	68 (2)
C(20)	2364 (5)	6617 (7)	394 (3)	59 (1)
C(21)	813 (3)	12082 (6)	1369 (2)	42 (1)
C(22)	382 (7)	13630 (9)	1299 (4)	91 (2)
C(23)	56 (13)	14031 (19)	708 (8)	79 (4)
C(23')	-493 (17)	13604 (26)	849 (12)	96 (7)

ตารางที่ ๒ 2 ความยาวพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)] \text{I}$ (I)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
Cu-N(1)	1.984 (4)
Cu-O(1)	2.018 (3)
Cu-N(2)	2.030 (4)
O(1)-C(21)	1.269 (5)
N(1)-C(5)	1.327 (6)
N(2)-C(6)	1.337 (6)
N(3)-C(6)	1.369 (6)
N(4)-C(15)	1.342 (6)
N(5)-C(16)	1.318 (6)
N(6)-C(15)	1.382 (6)
C(1)-C(2)	1.339 (8)
C(3)-C(4)	1.366 (9)
C(6)-C(7)	1.404 (7)
C(8)-C(9)	1.376 (9)
C(11)-C(12)	1.347 (8)
C(13)-C(14)	1.381 (8)
C(16)-C(17)	1.386 (7)
C(18)-C(19)	1.389 (9)
C(21)-C(22)	1.440 (9)
C(22)-C(23')	1.51 (2)
Cu-N(4)	2.002 (4)
Cu-O(2)	2.680 (3)
Cu-N(5)	2.136 (4)
O(2)-C(21)	1.304 (6)
N(1)-C(1)	1.366 (6)
N(2)-C(10)	1.354 (7)
N(3)-C(5)	1.377 (7)
N(4)-C(11)	1.365 (6)
N(5)-C(20)	1.363 (8)
N(6)-C(16)	1.393 (7)
C(2)-C(3)	1.401 (9)
C(4)-C(5)	1.388 (7)
C(7)-C(8)	1.358 (9)
C(9)-C(10)	1.356 (8)
C(12)-C(13)	1.389 (9)
C(14)-C(15)	1.390 (7)
C(17)-C(18)	1.352 (10)
C(19)-C(20)	1.365 (8)
C(22)-C(23)	1.39 (2)
C(23)-C(23')	0.88 (2)

ตารางที่ ผ 3 มุมพันธะไนโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)] \text{I}$ (I)

มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)	มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)
N(1) - Cu - N(4)	171.6 (2)	N(1) - Cu - O(1)	88.3 (2)
N(1) - Cu - O(2)	80.4 (2)	N(4) - Cu - O(1)	84.1 (2)
N(4) - Cu - O(2)	92.2 (2)	N(1) - Cu - N(2)	88.8 (2)
N(4) - Cu - N(2)	96.3 (2)	O(1) - Cu - N(2)	152.8 (2)
O(2) - Cu - N(2)	99.6 (2)	N(1) - Cu - N(5)	99.2 (2)
N(4) - Cu - N(5)	86.5 (2)	O(1) - Cu - N(5)	106.9 (2)
O(2) - Cu - N(5)	160.1 (2)	N(2) - Cu - N(5)	100.2 (2)
C(21) - O(1) - Cu	110.8 (3)	C(21) - O(2) - Cu	78.6 (2)
C(5) - N(1) - C(1)	117.3 (4)	C(5) - N(1) - Cu	123.3 (3)
C(1) - N(1) - Cu	117.2 (3)	C(6) - N(2) - C(10)	118.3 (4)
C(6) - N(2) - Cu	122.2 (3)	C(10) - N(2) - Cu	119.3 (3)
C(6) - N(3) - C(5)	130.1 (4)	C(15) - N(4) - C(11)	117.2 (4)
C(15) - N(4) - Cu	120.8 (3)	C(11) - N(4) - Cu	118.1 (3)
C(16) - N(5) - C(20)	117.9 (4)	C(16) - N(5) - Cu	121.8 (3)
C(20) - N(5) - Cu	120.3 (3)	C(15) - N(6) - C(16)	128.9 (4)
C(2) - C(1) - N(1)	124.0 (5)	C(1) - C(2) - C(3)	118.6 (5)
C(4) - C(3) - C(2)	118.1 (5)	C(3) - C(4) - C(5)	120.2 (5)
N(1) - C(5) - N(3)	119.9 (4)	N(1) - C(5) - C(4)	121.7 (5)
N(3) - C(5) - C(4)	118.3 (5)	N(2) - C(6) - N(3)	120.9 (4)
N(2) - C(6) - C(7)	120.9 (5)	N(3) - C(6) - C(7)	118.2 (5)
C(8) - C(7) - C(6)	119.3 (5)	C(7) - C(8) - C(9)	119.7 (5)
C(10) - C(9) - C(8)	118.6 (6)	N(2) - C(10) - C(9)	123.1 (5)
C(12) - C(11) - N(4)	124.2 (5)	C(11) - C(12) - C(13)	118.6 (6)
C(14) - C(13) - C(12)	118.5 (6)	C(13) - C(14) - C(15)	119.9 (5)
N(4) - C(15) - N(6)	120.3 (4)	N(4) - C(15) - C(14)	121.5 (5)
N(6) - C(15) - C(14)	118.2 (4)	N(5) - C(16) - C(17)	122.1 (5)
N(5) - C(16) - N(6)	118.8 (4)	C(17) - C(16) - N(6)	119.0 (5)
C(18) - C(17) - C(16)	119.8 (6)	C(17) - C(18) - C(19)	118.9 (5)
C(20) - C(19) - C(18)	118.5 (6)	N(5) - C(20) - C(19)	122.5 (6)
O(1) - C(21) - O(2)	116.6 (4)	O(1) - C(21) - C(22)	124.7 (5)
O(2) - C(21) - C(22)	118.6 (5)	C(23) - C(22) - C(21)	115.8 (9)
C(23) - C(22) - C(23')	35.3 (10)	C(21) - C(22) - C(23')	111.1 (10)
C(23') - C(23) - C(22)	80 (2)	C(23) - C(23') - C(22)	65 (2)

ตารางที่ ๔ เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)_2]\text{I}$ (I)

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
I	46(1)	68(1)	49(1)	5(1)	14(1)	-9(1)
Cu	36(1)	43(1)	29(1)	5(1)	10(1)	1(1)
O(1)	56(2)	52(2)	40(2)	11(2)	9(2)	7(2)
O(2)	76(3)	65(2)	49(2)	-7(2)	24(2)	14(2)
N(1)	38(2)	46(2)	29(2)	4(2)	6(2)	0(2)
N(2)	35(2)	48(2)	34(2)	7(2)	5(2)	1(2)
N(3)	41(2)	62(3)	33(2)	14(2)	12(2)	-6(2)
N(4)	46(2)	45(2)	33(2)	1(2)	9(2)	-2(2)
N(5)	45(2)	46(2)	40(2)	-3(2)	14(2)	-5(2)
N(6)	54(3)	51(3)	32(2)	7(2)	17(2)	-2(2)
C(1)	52(3)	51(3)	36(3)	6(2)	-3(2)	2(2)
C(2)	52(3)	68(4)	47(3)	-3(3)	-6(3)	8(3)
C(3)	36(3)	70(4)	68(4)	-11(3)	-1(3)	-1(3)
C(4)	39(3)	67(4)	44(3)	-1(3)	15(2)	-5(2)
C(5)	42(3)	41(3)	35(2)	0(2)	7(2)	-3(2)
C(6)	46(3)	41(3)	30(2)	5(2)	7(2)	0(2)
C(7)	72(4)	61(4)	40(3)	21(3)	2(3)	-4(3)
C(8)	75(4)	71(4)	44(3)	17(3)	-12(3)	12(3)
C(9)	48(3)	60(4)	70(4)	2(3)	-12(3)	10(3)
C(10)	41(3)	50(3)	56(3)	9(2)	5(2)	0(2)
C(11)	57(3)	51(3)	40(3)	-3(2)	8(2)	-1(3)
C(12)	72(4)	64(4)	47(3)	-11(3)	0(3)	-8(3)
C(13)	71(4)	52(4)	69(4)	-8(3)	11(3)	-17(3)
C(14)	50(3)	52(3)	49(3)	5(2)	15(3)	-4(2)
C(15)	33(2)	41(2)	40(2)	4(2)	8(2)	2(2)
C(16)	39(3)	57(3)	30(2)	3(2)	6(2)	5(2)
C(17)	55(3)	70(4)	35(3)	-4(3)	16(2)	-1(3)
C(18)	63(4)	83(5)	50(3)	-23(3)	14(3)	3(3)
C(19)	71(4)	60(4)	74(4)	-21(3)	14(3)	-2(3)
C(20)	64(4)	56(3)	58(3)	-9(3)	15(3)	-4(3)
C(21)	35(2)	51(3)	40(3)	-18(2)	10(2)	17(2)
C(22)	119(7)	62(4)	92(6)	-3(4)	5(5)	25(4)
C(23)	101(13)	55(9)	82(10)	-1(7)	4(9)	7(8)
C(23')	112(19)	72(14)	101(17)	12(11)	-25(15)	28(13)

ตารางที่ ๕ พิกัดของอะตอมไฮโดรเจนในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)] \text{I}$

อะตอม	x	y	z	U(eq)
H(22A)	943(61)	14393(95)	1378(41)	109
H(22B)	-586(53)	14391(92)	1452(36)	109
H(23A)	589(13)	14534(19)	499(8)	119
H(23B)	-142(13)	13092(19)	489(8)	119
H(23C)	-499(13)	14740(19)	725(8)	119
H(23D)	-768(17)	14647(26)	808(12)	143
H(23E)	-248(17)	13270(26)	459(12)	143
H(23F)	-1000(17)	12887(26)	976(12)	143
H(1)	397(33)	8927(53)	314(22)	37(12)
H(2)	-1429(41)	8495(69)	192(26)	61(16)
H(3)	-2264(41)	7817(57)	1096(25)	48(14)
H(4)	-1249(40)	7308(53)	1984(26)	40(14)
H(3A)	190(37)	7059(56)	2454(24)	29(13)
H(7)	1344(46)	5905(69)	3107(30)	68(18)
H(8)	2958(38)	5272(66)	3268(26)	53(15)
H(9)	4179(39)	6358(58)	2586(23)	42(13)
H(10)	3578(42)	7783(59)	1792(27)	47(15)
H(11)	2924(39)	10833(60)	2241(26)	51(15)
H(12)	3937(43)	13144(73)	2352(30)	61(17)
H(13)	4482(51)	14238(87)	1543(34)	90(25)
H(14)	4287(40)	13029(65)	543(28)	52(15)
H(6A)	3641(48)	10830(75)	66(30)	63(22)
H(17)	3876(46)	8754(77)	-533(30)	64(21)
H(18)	3612(52)	6300(87)	-853(34)	90(22)
H(19)	2584(55)	4671(94)	-218(36)	107(25)
H(20)	1846(34)	5891(52)	725(21)	37(12)

ตารางที่ ผ 6 พิกัดของอะตอมในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)][\text{NO}_3]$ (II)

อะตอม	x/Å	y/Å	z/Å	U
Cu	0.15056	0.57010	0.12839	* 0.0449
N(1)	0.04522	0.67502	0.12219	* 0.0499
C(1)	0.01349	0.65625	0.06980	* 0.0629
C(2)	0.11508	0.68420	0.06490	* 0.0777
C(3)	-0.16285	0.73476	0.11634	* 0.0849
C(4)	-0.10694	0.75745	0.16935	* 0.0733
C(5)	-0.00062	0.72755	0.17136	* 0.0525
N(3)	0.05548	0.75596	0.22503	* 0.0579
C(6)	0.16913	0.77856	0.23470	* 0.0490
C(7)	0.19363	0.86652	0.28485	* 0.0668
C(8)	0.29575	0.89443	0.29440	* 0.0754
C(9)	0.36347	0.83659	0.25398	* 0.0685
C(10)	0.32610	0.74859	0.20631	* 0.0562
N(2)	0.22467	0.71713	0.19607	* 0.0484
N(4)	0.30398	0.43286	0.13748	* 0.0478
C(11)	0.32195	0.26036	0.19264	* 0.0593
C(12)	0.37563	0.22867	0.20005	* 0.0678
C(13)	0.41406	0.16058	0.14746	* 0.0718
C(14)	0.40003	0.23288	0.09252	* 0.0624
C(15)	0.34605	0.37155	0.08847	* 0.0467
N(6)	0.33750	0.44455	0.03208	* 0.0535
C(16)	0.31580	0.59677	0.01835	* 0.0507
C(17)	0.35694	0.66266	0.03370	* 0.0681
C(18)	0.33838	0.81170	-0.04649	* 0.0811
C(19)	0.28063	0.89906	-0.00798	* 0.0819
C(20)	0.24114	0.82714	0.04085	* 0.0709
N(5)	0.25531	0.67724	0.05405	* 0.0540
O(1)	0.11225	0.38296	0.08958	* 0.0636
O(2)	0.06859	0.36196	0.18490	* 0.0817
C(21)	0.07003	0.30923	0.13189	* 0.0776
C(22)	0.05042	0.13796	0.11821	* 0.1312
C(22')	0.00611	0.16136	0.12748	* 0.1776
C(23)	-0.05478	0.14728	0.08484	* 0.1705
C(23')	0.01382	0.09127	0.06401	* 0.1170
N(7)	0.56164	0.74544	0.10821	* 0.0620
O(3)	0.52705	0.61855	0.12193	* 0.1115
O(3')	0.56215	0.61501	0.08566	* 0.1061
O(4)	0.56946	0.84622	0.14696	* 0.1105
O(4')	0.56881	0.77153	0.16277	* 0.1258
O(5)	0.59591	0.76903	0.05782	* 0.0903
O(5')	0.56245	0.85404	0.07093	* 0.1792

ตารางที่ ๗ ความยาวพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{[NO}_3\text{]} (\text{II})$

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)	พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
N(7)-O(3)	1.2326(1)	C(7)-C(8)	1.3613(3)
N(7)-O(3')	1.2344(1)	C(8)-H(8)	.9600(0)
N(7)-O(4)	1.2178(1)	C(8)-C(9)	1.3745(2)
N(7)-O(4')	1.2121(2)	C(9)-H(9)	.9601(2)
N(7)-O(5)	1.2253(1)	C(9)-C(10)	1.3623(1)
N(7)-O(5')	1.2458(1)	C(10)-H(10)	.9599(1)
O(3)-O(3')	.9349(1)	C(10)-N(2)	1.3601(3)
O(3)-O(4)	2.1163(2)	N(4)-C(11)	1.3692(1)
O(3)-O(4')	1.6756(1)	N(4)-C(15)	1.3371(1)
O(3)-O(5)	2.1440(2)	C(11)-H(11)	.9599(0)
O(3)-O(5')	2.3833(2)	C(11)-C(12)	1.3462(1)
O(3')-O(4')	2.1620(2)	C(12)-H(12)	.9601(1)
O(3')-O(5)	1.5415(1)	C(12)-C(13)	1.4059(1)
O(3')-O(5')	2.0989(2)	C(13)-H(13)	.9600(1)
O(4)-O(4')	.7346(0)	C(13)-C(14)	1.3586(1)
O(4)-O(5)	2.1034(3)	C(14)-H(14)	.9600(0)
O(4)-O(5')	1.6601(2)	C(14)-C(15)	1.3951(1)
C(4')-O(5)	2.3365(3)	C(15)-N(6)	1.3847(2)
O(4')-O(5')	2.1277(3)	N(6)-H(6B)	.9000(0)
O(5)-O(5')	.9106(0)	N(6)-C(16)	1.3808(1)
Cu-N(1)	1.9867(4)	C(16)-C(17)	1.4026(1)
Cu-N(2)	2.0154(2)	C(16)-N(5)	1.3340(1)
Cu-N(4)	2.0059(3)	C(17)-H(17)	.9601(0)
Cu-N(5)	2.1466(2)	C(17)-C(18)	1.3426(1)
Cu-O(1)	2.0193(2)	C(18)-H(18)	.9600(0)
Cu-O(2)	2.6643(3)	C(18)-C(19)	1.3829(1)
N(1)-C(1)	1.3558(2)	C(19)-H(19)	.9601(1)
N(1)-C(5)	1.3349(1)	C(19)-C(20)	1.3594(1)
C(1)-H(1)	.9600(1)	C(20)-H(20)	.9600(0)
C(1)-C(2)	1.3477(3)	C(20)-N(5)	1.3430(1)
C(2)-H(2)	.9599(1)	O(1)-O(2)	2.1928(3)
C(2)-C(3)	1.3828(1)	O(1)-C(21)	1.2716(1)
C(3)-H(3)	.9600(2)	O(2)-C(21)	1.2460(1)
C(3)-C(4)	1.3528(2)	C(21)-C(22)	1.5349(2)
C(4)-H(4)	.9600(1)	C(21)-C(22')	1.5311(2)
C(4)-C(5)	1.4109(3)	C(22)-C(22')	.6545(1)
C(5)-N(3)	1.3740(2)	C(22)-C(23)	1.5256(3)
N(3)-H(3A)	.8999(1)	C(22)-C(23')	1.3187(1)
N(3)-C(6)	1.3737(3)	C(22')-C(23)	1.2010(1)
C(6)-C(7)	1.3919(1)	C(22')-C(23')	1.5217(2)
C(6)-N(2)	1.3412(2)	C(23)-C(23')	1.1337(2)
C(7)-H(7)	.9600(1)		

ตารางที่ ๘ มุมพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]\text{NO}_3$ (II)

มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)	มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)
O(3)-N(7)-O(3')	44.537(6)	O(3')-O(4')-O(4)	100.891(9)
O(3)-N(7)-O(4)	119.457(8)	O(3')-O(4')-O(5)	39.841(5)
O(3)-N(7)-O(4')	86.531(5)	O(3')-O(4')-O(5')	58.580(8)
O(3)-N(7)-O(5)	121.451(2)	O(4)-O(4')-O(5)	62.692(4)
O(3)-N(7)-O(5')	148.154(4)	O(4)-O(4')-O(5')	42.333(1)
O(3')-N(7)-O(4)	159.026(1)	O(5)-O(4')-O(5')	22.928(4)
O(3')-N(7)-O(4')	124.183(2)	N(7)-O(5)-O(3)	29.359(3)
O(3')-N(7)-O(5)	77.612(5)	N(7)-O(5)-O(3')	51.457(3)
O(3')-N(7)-O(5')	115.615(9)	N(7)-O(5)-O(4)	30.475(4)
O(4)-N(7)-O(4')	35.591(3)	N(7)-O(5)-O(4')	16.456(3)
O(4)-N(7)-O(5)	118.841(7)	N(7)-O(5)-O(5')	69.578(6)
O(4)-N(7)-O(5')	84.72(1)	O(3)-O(5)-O(3')	22.6757(9)
O(4')-N(7)-O(5)	146.904(6)	O(3)-O(5)-O(4)	59.760(7)
O(4')-N(7)-O(5')	119.909(8)	O(3)-O(5)-O(4')	43.659(4)
O(5)-N(7)-O(5')	43.236(4)	O(3)-O(5)-O(5')	93.729(9)
N(7)-O(3)-O(3')	67.836(5)	O(3')-O(5)-O(4)	81.253(7)
N(7)-O(3)-O(4)	30.070(5)	O(3')-O(5)-O(4')	63.970(4)
N(7)-O(3)-O(4')	46.226(7)	O(3')-O(5)-O(5')	115.305(9)
N(7)-O(3)-O(5)	29.180(2)	O(4)-O(5)-O(4')	18.079(3)
N(7)-O(3)-O(5')	16.010(2)	O(4)-O(5)-O(5')	49.311(2)
O(3')-O(3)-O(4)	96.699(5)	O(4')-O(5)-O(5')	65.548(3)
O(3')-O(3)-O(4')	108.475(8)	N(7)-O(5')-O(3)	15.836(2)
O(3')-O(3)-O(5)	39.471(5)	N(7)-O(5')-O(3')	32.028(4)
O(3')-O(3)-O(5')	61.174(5)	N(7)-O(5')-O(4)	46.926(5)
O(4)-O(3)-O(4')	17.956(2)	N(7)-O(5')-O(4')	29.592(2)
O(4)-O(3)-O(5)	59.166(7)	N(7)-O(5')-O(5)	67.187(8)
O(4)-O(3)-O(5')	42.789(7)	O(3)-O(5')-O(3')	22.968(3)
O(4')-O(3)-O(5)	74.293(9)	O(3)-O(5')-O(4)	59.994(4)
O(4')-O(3)-O(5')	60.273(9)	O(3)-O(5')-O(4')	43.148(2)
O(5)-O(3)-O(5')	22.412(2)	O(3)-O(5')-O(5)	63.858(9)
N(7)-O(3')-O(3)	67.627(4)	O(3')-O(5')-O(4)	78.854(1)
N(7)-O(3')-O(4')	27.632(1)	O(3')-O(5')-O(4')	61.527(2)
N(7)-O(3')-O(5)	50.931(7)	O(3')-O(5')-O(5)	41.603(6)
N(7)-O(3')-O(5')	32.358(5)	O(4)-O(5')-O(4')	17.337(3)
O(3)-O(3')-O(4')	47.314(6)	O(4)-O(5')-O(5)	106.112(4)
O(3)-O(3')-O(5)	117.853(4)	O(4')-O(5')-O(5)	91.524(6)
O(3)-O(3')-O(5')	55.859(2)	N(1)-Cu-N(2)	88.937(8)
O(4')-O(3')-O(5)	76.188(9)	N(1)-Cu-N(4)	170.5814
O(4')-O(3')-O(5')	59.892(7)	N(1)-Cu-N(5)	100.70(1)
O(5)-O(3')-O(5')	23.092(3)	N(1)-Cu-O(1)	88.08(1)
N(7)-O(4)-O(3)	30.473(3)	N(1)-Cu-O(2)	80.75(1)
N(7)-O(4)-O(4')	71.983(9)	N(2)-Cu-N(4)	95.949(9)
N(7)-O(4)-O(5)	30.684(3)	N(2)-Cu-N(5)	99.000(9)
N(7)-O(4)-O(5')	48.352(6)	N(2)-Cu-O(1)	157.163(4)
O(3)-O(4)-O(4')	44.686(7)	N(2)-Cu-O(2)	103.473(9)
O(3)-O(4)-O(5)	61.074(3)	N(4)-Cu-N(5)	86.52(1)
O(3)-O(4)-O(5')	77.217(3)	N(4)-Cu-O(1)	84.29(1)
O(4')-O(4)-O(5)	99.229(8)	N(4)-Cu-O(2)	90.46(1)
O(4')-O(4)-O(5')	120.329(4)	N(5)-Cu-O(1)	103.802(9)
O(5)-O(4)-O(5')	24.577(5)	N(5)-Cu-O(2)	157.517(2)
N(7)-O(4')-O(3)	47.243(7)	C(1)-Cu-O(2)	53.716(7)
N(7)-O(4')-O(3')	28.185(3)	Cu-N(1)-C(1)	117.842(8)
N(7)-O(4')-O(4)	72.825(6)	Cu-N(1)-C(5)	122.265(7)
N(7)-O(4')-O(5)	16.640(3)	C(1)-N(1)-C(5)	117.56(1)
N(7)-O(4')-O(5')	30.499(5)	N(1)-C(1)-H(1)	127.59(1)
O(3)-O(4')-O(3')	24.212(7)	N(1)-C(1)-C(2)	124.012(8)
O(3)-O(4')-O(4)	117.358(8)	H(1)-C(1)-C(2)	118.792(8)
O(3)-O(4')-O(5)	62.048(5)	C(1)-C(2)-H(2)	120.812(7)
O(3)-O(4')-O(5')	76.580(7)	C(1)-C(2)-C(3)	118.280(8)

ตารางที่ ๘ มุมพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)][\text{NO}_3]$ (II) (ต่อ)

มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)	มุมพันธะ	ขนาดมุมพันธะ (°)
H(2)-C(2)-C(3)	120.90(1)	C'(15)-N(6)-C(16)	129.613(2)
C(2)-C(3)-H(3)	120.167(7)	H(6B)-N(6)-C(16)	115.315(7)
C(2)-C(3)-C(4)	119.71(1)	N(6)-C(16)-C(17)	118.901(5)
H(3)-C(3)-C(4)	120.124(7)	N(6)-C(16)-N(5)	119.660(5)
C(3)-C(4)-H(4)	120.80(1)	C(17)-C(16)-N(5)	121.431(7)
C(3)-C(4)-C(5)	119.280(8)	C(16)-C(17)-H(17)	119.786(8)
H(4)-C(4)-C(5)	119.921(6)	C(16)-C(17)-C(18)	119.267(5)
N(1)-C(5)-C(4)	121.119(7)	H(17)-C(17)-C(18)	120.947(6)
N(1)-C(5)-N(3)	120.42(1)	C(17)-C(18)-H(18)	119.389(4)
C(4)-C(5)-N(3)	118.456(8)	C(17)-C(18)-C(19)	119.977(5)
C(5)-N(3)-H(3A)	115.33(1)	H(18)-C(18)-C(19)	120.634(8)
C(5)-N(3)-C(6)	129.580(7)	C(18)-C(19)-H(19)	121.048(5)
H(3A)-N(3)-C(6)	115.09(3)	C(18)-C(19)-C(20)	117.697(7)
N(3)-C(6)-C(7)	118.556(3)	H(19)-C(19)-C(20)	121.255(5)
N(3)-C(6)-N(2)	120.04(1)	C(19)-C(20)-H(20)	119.060(7)
C(7)-C(6)-N(2)	121.40(1)	C(19)-C(20)-N(5)	124.001(4)
C(6)-C(7)-H(7)	120.14(1)	H(20)-C(20)-N(5)	116.939(6)
C(6)-C(7)-C(8)	119.686(4)	Cu-N(5)-C(16)	121.297(8)
H(7)-C(7)-C(8)	120.18(1)	Cu-N(5)-C(20)	121.231(5)
C(7)-C(8)-H(8)	120.603(3)	C(16)-N(5)-C(20)	117.456(5)
C(7)-C(8)-C(9)	119.51(1)	Cu-O(1)-O(2)	78.357(7)
H(8)-C(8)-C(9)	119.86(1)	Cu-O(1)-C(21)	107.325(8)
C(8)-C(9)-H(9)	120.98(1)	O(1)-O(1)-C(21)	29.096(3)
C(8)-C(9)-C(10)	118.55(1)	Cu-O(2)-O(1)	47.927(3)
H(9)-C(9)-C(10)	120.431(4)	Cu-O(2)-C(21)	77.583(7)
C(9)-C(10)-H(10)	118.76(1)	O(1)-O(2)-C(21)	29.753(5)
C(9)-C(10)-N(2)	123.223(3)	O(1)-C(21)-O(3)	121.152(7)
H(10)-C(10)-N(2)	118.01(1)	O(1)-C(21)-C(22)	114.821(6)
Cu-N(2)-C(6)	123.00(1)	O(1)-C(21)-C(22')	129.065(5)
Cu-N(2)-C(10)	119.269(3)	O(2)-C(21)-C(22)	121.771(2)
C(6)-N(2)-C(10)	117.57(1)	O(2)-C(21)-C(22')	109.472(4)
Cu-N(4)-C(11)	117.535(5)	C(22)-C(21)-C(22')	24.652(4)
Cu-N(4)-C(15)	121.088(7)	C(21)-C(22)-C(22')	77.352(7)
C(11)-N(4)-C(15)	117.526(8)	C(21)-C(22)-C(23)	100.340(3)
N(4)-C(11)-H(11)	117.812(8)	C(21)-C(22)-C(23')	121.464(1)
N(4)-C(11)-C(12)	124.174(4)	C(22')-C(22)-C(23)	48.88(1)
H(11)-C(11)-C(12)	118.010(6)	C(22')-C(22)-C(23')	94.92(1)
C(11)-C(12)-H(12)	121.106(4)	C(23)-C(22)-C(23')	46.275(4)
C(11)-C(12)-C(13)	117.579(6)	C(21)-C(22')-C(22)	78.00(1)
H(12)-C(12)-C(13)	121.304(8)	C(21)-C(22')-C(23)	118.185(7)
C(12)-C(13)-H(13)	120.479(6)	C(21)-C(22')-C(23')	109.402(5)
C(12)-C(13)-C(14)	119.306(8)	C(22)-C(22')-C(23)	106.88(1)
H(13)-C(13)-C(14)	120.202(5)	C(22)-C(22')-C(23')	59.702(6)
C(13)-C(14)-H(14)	120.350(8)	C(23)-C(22')-C(23')	47.430(8)
C(13)-C(14)-C(15)	120.017(4)	C(22)-C(23)-C(22')	24.239(3)
H(14)-C(14)-C(15)	119.632(6)	C(22)-C(23)-C(23')	57.20(1)
N(4)-C(15)-C(14)	121.222(6)	C(22')-C(23)-C(23')	81.29(1)
N(4)-C(15)-N(6)	120.772(8)	C(22)-C(23')-C(22')	25.376(7)
C(14)-C(15)-N(6)	118.005(5)	C(22)-C(23')-C(23)	76.52(1)
C(15)-N(6)-H(6B)	115.07(1)	C(22')-C(23')-C(23)	51.277(6)

ตารางที่ ๗ 9 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]$
 $[\text{NO}_3] (\text{II})$

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu	.0405	.0573	.0382	.0042	.0134	-.0052
N(1)	.0422	.0657	.0420	-.0029	.0053	.0064
C(1)	.0617	.0741	.0524	.0078	.0014	.0039
H(1)	.080					
C(2)	.0650	.0941	.0721	.0094	-.0157	.0028
H(2)	.080					
C(3)	.0412	.1094	.1025	.0004	-.0115	.0118
H(3)	.080					
C(4)	.0465	.0989	.0765	.0057	.0168	.0001
H(4)	.080					
C(5)	.0415	.0656	.0511	-.0023	.0094	.0034
N(3)	.0440	.0871	.0441	.0013	.0149	-.0162
H(3A)	.080					
C(6)	.0531	.0554	.0390	.0029	.0073	.0055
C(7)	.0748	.0778	.0479	-.0034	.0045	-.0150
H(7)	.080					
C(8)	.0922	.0752	.0566	.0104	-.0201	.0134
H(8)	.080					
C(9)	.0577	.0661	.0799	-.0109	-.0142	.0024
H(9)	.080					
C(10)	.0410	.0605	.0673	.0044	.0036	-.0016
H(10)	.080					
N(2)	.0415	.0593	.0449	-.0016	.0067	-.0054
N(4)	.0451	.0555	.0439	-.0001	.0116	.0029
C(11)	.0582	.0680	.0528	-.0045	.0141	.0032
H(11)	.080					
C(12)	.0726	.0641	.0671	.0011	.0082	.0130
H(12)	.080					
C(13)	.0658	.0599	.0900	.0105	.0060	.0021
H(13)	.080					
C(14)	.0159	.0590	.0740	.0013	.0188	-.0134
H(14)	.080					
C(15)	.0355	.0543	.0509	-.0063	.0107	-.0052
N(6)	.0495	.0678	.0443	.0018	.0130	-.0122
H(6B)	.080					
C(16)	.0384	.0742	.0402	-.0065	.0082	-.0013
C(17)	.0567	.0995	.0501	.0003	.0218	.0078
H(17)	.080					
C(18)	.0674	.1140	.0635	-.0038	.0196	.0340
H(18)	.080					
C(19)	.0821	.0760	.0897	-.0026	.0242	.0298
H(19)	.080					
C(20)	.0764	.0646	.0737	.0039	.0233	.0083
H(20)	.080					
N(5)	.0503	.0630	.0507	-.0028	.0212	.0014
O(1)	.0613	.0788	.0520	-.0145	.0170	-.0189
O(2)	.0889	.0935	.0658	-.0270	.0352	.0026
C(21)	.0733	.0740	.0875	.0352	.0233	.0100
C(22)	.0955	.1037	.2025	-.0540	.0891	-.0237
C(22')	.1493	.2126	.1810	-.1409	.1103	-.1389
C(23)	.1670	.1644	.1808	-.0050	.0139	-.1034
C(23')	.1658	.0668	.1196	-.0114	.0182	-.0333
N(7)	.0480	.0795	.0598	.0142	.0155	.0047
O(3)	.1128	.0860	.1406	.0004	.0582	.0124
O(3')	.1728	.0628	.0871	.0049	.0513	.0249
O(4)	.1457	.1148	.0734	.0216	.0303	.0300
O(4')	.1535	.1816	.0431	-.0064	.0130	.0099
O(5)	.1063	.1080	.0592	.0047	.0310	-.0063
O(5')	.3397	.1356	.0660	.0754	.0487	.0401

ตารางที่ ผ 10 พิกัดของอะตอมไฮโดรเจนในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{bipyam})_2(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)]$
 $[\text{NO}_3] (\text{H})$

อะตอม	x	y	z	U(eq)
H(22A)	5249(7)	9061(7)	1630(7)	150
H(22B)	6081(7)	9183(7)	1133(7)	150
H(23A)	4467(13)	9829(23)	690(9)	258
H(23B)	4044(13)	8212(23)	874(9)	258
H(23C)	4872(13)	8333(23)	380(9)	258
H(22C)	4271(9)	7751(15)	1043(9)	150
H(22D)	4840(9)	8816(15)	1535(9)	150
H(23D)	4885(17)	9959(28)	565(10)	258
H(23E)	5437(17)	8499(28)	317(10)	258
H(23F)	6003(17)	9559(28)	807(10)	258
H(14)	9209(23)	8032(37)	567(14)	60(9)
H(13)	9455(32)	9361(46)	1546(18)	89(13)
H(12)	8882(26)	8147(40)	2425(16)	76(10)
H(11)	7961(26)	5816(38)	2265(16)	69(10)
H(17)	8956(28)	3957(40)	-546(16)	68(10)
H(18)	8695(35)	1382(57)	-821(20)	117(15)
H(19)	7642(35)	-172(52)	-182(21)	117(15)
H(20)	7050(30)	1114(46)	715(17)	89(12)
H(1)	5213(29)	3882(43)	389(17)	79(11)
H(2)	3508(30)	3266(45)	266(17)	85(12)
H(3)	2738(36)	2449(50)	1119(19)	103(14)
H(4)	3688(28)	2032(41)	2045(17)	77(11)
H(7)	6467(25)	993(36)	3082(14)	54(9)
H(8)	8123(30)	632(41)	3197(18)	71(12)
H(9)	9238(28)	1487(42)	2615(15)	68(10)
H(10)	8762(27)	3038(40)	1786(15)	77(10)
H(6A)	8617(23)	6094(36)	17(15)	55(9)
H(3A)	5225(25)	2120(36)	2512(14)	55(9)

ภาคผนวก ข

การหาความหนาแน่นของผลึก

(ก) ความหนาแน่นของผลึกจากการคำนวณ (Calculated density)

$$D_x = \text{Mass/volume}$$

$$= \text{Formula Weight/Molar Volume}$$

$$= \text{Formula Weight/Volume of Formula Unit} \times N$$

โดยที่

$$N = \text{Avogadro Number} = 6.023 \times 10^{23}$$

ดังนั้น

$$D_x = F.W. \times Z / U \times N$$

ในหนึ่งหน่วยเซลล์นั้น

U = ปริมาตรของหน่วยเซลล์

Z = จำนวนของ formula unit ในเซลล์หน่วยโดยที่ formula unit นั้นอาจเป็นโมเลกุลอะตอมหรือไอออนก็ได้

เนื่องจาก U มีหน่วยเป็น $\text{\AA}^3$ จึงจำเป็นต้องคูณด้วย 10^{-24} เพื่อให้ความหนาแน่นอยู่ในหน่วย g.cm^{-3} เมื่อแทนค่า Avogadro Number จะได้

$$D_x = F.W. \times Z \times 1.66 / U \text{ gcm}^{-3}$$

(ข) ความหนาแน่นของผลึกโดยวิธี Floatation (Measured density by floatation method)

เลือกของเหลวที่เหมาะสม 2 ชนิด ที่มีความหนาแน่นน้อยกว่าและมากกว่าความหนาแน่นของผลึกและผลึกต้องไม่ละลายในของเหลวทั้งสอง สำหรับสารประกอบเชิงซ้อนอนูกรมที่ศึกษาได้ acetone และ dibromomethane เป็นตัวของเหลวที่เหมาะสมการหาความหนาแน่นของผลึกทำได้ดังนี้

1. ชั่ง pycnometer เปล่า ขนาด 25.0 cm^3
2. เท dibromomethane (ของเหลวหนัก) ลงในบีกเกอร์ขนาด 100 cm^3 ประมาณ 20-30 ml
3. เลือกผลึกที่มีขนาดใกล้เคียงกันใส่ลงไปประมาณ 15.20 ผลึก เต็ม acetone (ของเหลวเบา) แล้วคน และปรับอัตราส่วนของของเหลวผสมให้ผลึกลอยอยู่ตรงกลาง ของของเหลวนั้นซึ่งมีหลักการดังนี้
ถ้าผลึกลอย แสดงว่าความหนาแน่นของผลึก < ความหนาแน่นของของเหลว

ถ้าผลึกจม แสดงว่าความหนาแน่นของผลึก > ความหนาแน่นของของเหลว

ถ้าผลึกลอยอยู่ตรงกลางแสดงว่าความหนาแน่นของผลึก = ความหนาแน่นของของเหลว

4. กรองผลึกออกด้วยกระดาษกรอง

5. เทของเหลวผสมที่มีความหนาแน่นเท่ากับ ความหนาแน่นของผลึกลงใน pycnometer แล้วนำไปชั่ง

6. หามวลของของเหลวผสมซึ่งบรรจุใน pycnometer ปริมาตร 25.0 cm^3

7. คำนวณหาความหนาแน่นของผลึกซึ่งเท่ากับ ความหนาแน่นของของเหลวผสม

โดยคำนวณตามสูตร $D = M/V$

ภาคผนวก ค
การคำนวณหาปริมาตรของผลึก (U)

สูตรที่ใช้คำนวณสัมพันธ์กับระบบผลึกดังนี้

ระบบผลึก	สูตร
Cubic	$U = a^3$
Tetragonal	$U = a^2c$
orthorhombic	$U = abc$
hexagonal	$U = (3a^2c)/2$ $= 0.866 a^2c$
Monoclinic	$U = abcsin\beta$
Triclinic	$U = abc (1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha \cdot \cos\beta \cdot \cos\gamma)$

ภาคผนวก ง

การสังเคราะห์สารตั้งต้น $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

การสังเคราะห์สารประกอบเชิงซ้อน $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ โดยวิธีเตรียมโดยตรงเพื่อใช้เป็นสารตั้งต้นในการสังเคราะห์ สารประกอบเชิงซ้อนคอปเปอร์ (I) โดยวิธีรีดิวซ์ด้วยโลหะคอปเปอร์ในบรรยากาศปลายใต้บรรยากาศก๊าซไนโตรเจน

1. ละลาย $\text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu}(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 0.19 กรัม (1.5 มิลลิโมล) ในน้ำ 20 มล. และเติมกรดโพธิออนิคเพื่อช่วยในการละลาย อุณหภูมิและคน
2. ละลาย bipyam 0.27 กรัม (1.57 มิลลิโมล) ในเอทานอล 30 มล. อุณหภูมิและคน
3. ผสมสารละลายจากข้อ 1 และข้อ 2 เข้าด้วยกัน แล้วเติมโซเดียมโพธิออนเนต 0.31 กรัม (3.2 มิลลิโมล) อุณหภูมิและคน ตั้งสารละลายที่ได้ให้ระเหยอย่างช้า ๆ ที่อุณหภูมิห้อง ประมาณ 1 สัปดาห์จะได้ผลึกสีเขียวใสของ $[\text{Cu}(\text{II})(\text{bipyam})(\text{O}_2\text{CCH}_2\text{CH}_3)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

ภาคผนวก จ

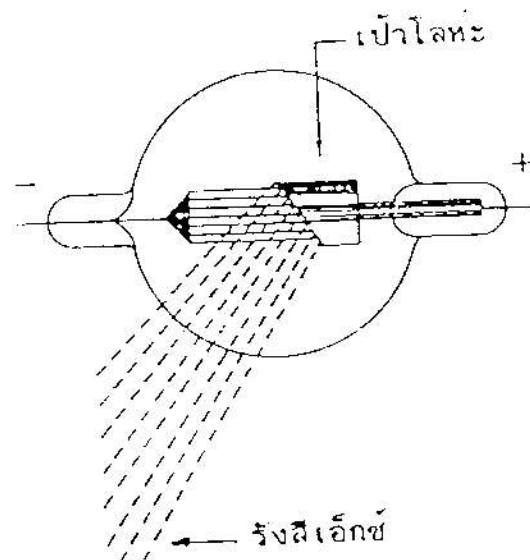
การศึกษาโครงสร้างผลึกโดยวิธีทางรังสีเอกซ์

การวิเคราะห์ทางรังสีเอกซ์ใช้ได้ทั้งทางด้านคุณภาพวิเคราะห์ ปริมาณวิเคราะห์และวิเคราะห์โครงสร้าง โดยใช้หลักการคาย การดูดกลืน และการเลี้ยวเบน ของรังสีเอกซ์

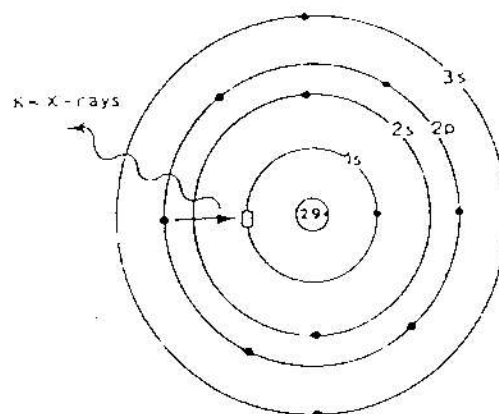
รังสีเอกซ์จัดเป็นรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า(electromagnetic radiation) อยู่ระหว่างแสงเหนือม่วง(ultraviolet light) และรังสีแกมมา(gamma radiation) มีความยาวคลื่นสั้นอยู่ในช่วง 0.1-100 อังสตรอม (Å) แต่ช่วงความยาวคลื่นที่นำมาใช้งานคือประมาณ 1 อังสตรอมหรือ 10^{-8} เซนติเมตร รังสีเอกซ์จัดเป็นรังสีที่มีความถี่สูง และมีพลังงานสูง สามารถเจาะทะลุผ่านตัวกลางต่าง ๆ ได้ดี

1. แหล่งกำเนิดรังสีเอกซ์

รังสีเอกซ์เกิดจากการคายพลังงานของอิเล็กตรอน (electron) เมื่อให้ความร้อนแก่ขดลวด(hcated filament) ขดลวดทำหน้าที่เป็นแคโทด(cathode)จะเกิดอิเล็กตรอนวิ่งมากระทบเป้าโลหะ(metal target) (รูปที่ ผ 1.1) ซึ่งอาจเป็นคอปเปอร์(copper) หรือโมลิบดีนัม(molybdenum) ซึ่งทำหน้าที่เป็นแอโนด(anode) อิเล็กตรอนที่มีความเร็วสูงเมื่อกระทบเป้าจะถ่ายเทพลังงานให้แก่อะตอมโลหะที่ใช้เป็นเป้า อิเล็กตรอนวงในสุดของอะตอมของโลหะเมื่อได้รับพลังงานเพิ่มขึ้นก็จะหลุดออกไป อิเล็กตรอนวงถัดไปจะตกลงมาแทนที่ในตำแหน่งว่าง โดยอิเล็กตรอนตัวที่เข้าไปแทนที่นั้น จะคายพลังงานออกมา ในรูปของรังสีเอกซ์ ดังแสดงในรูปที่ ผ 1.2



รูปที่ ผ 1.1 การเกิดรังสีเอ็กซ์ของคอปเปอร์ (Cu)

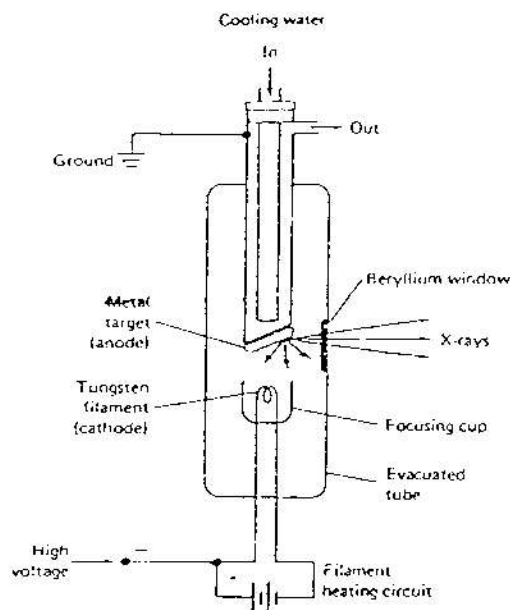


รูปที่ ผ 1.2 การเกิดรังสีเอ็กซ์

รูปที่ ผ 1.2 แสดงให้เห็นถึงการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเมื่ออะตอมของคอปเปอร์ได้รับพลังงานเพียงพอที่จะทำให้อิเล็กตรอนชั้นในสุดคือชั้น 1s หรือ K shell หลุดออกมา อิเล็กตรอนวงในถัดไปที่อยู่สูงกว่าคือชั้น 2s หรือชั้น 2p หรือ L shell เข้าไปแทนที่โดยมีการลดลงของพลังงานศักย์จากชั้นที่สูงกว่าไปยังชั้นที่ต่ำกว่าพลังงานที่ลดลงนี้จะถูกปล่อยออกมาในรูปของรังสีเอ็กซ์

2. หลอดรังสีเอกซ์ (x-ray tube)

หลอดรังสีเอกซ์ประกอบด้วยลวดทังสเตน(tungsten filament) เมื่อให้ความร้อนแก่ลวดนี้ประมาณ 30 กิโลโวลต์ (KV) จะเกิดอิเล็กตรอนวิ่งไปยังขั้วแอโนดซึ่งมักเป็นคอปเปอร์หรือโมลิบดีนัมทำให้เกิดรังสีเอกซ์ออกมาโดยที่รังสีเอกซ์จะออกจากหลอดรังสีเอกซ์ผ่านหน้าต่าง(window) ซึ่งทำด้วยแบริลเลียม(Be) ดังรูปที่ ผ 1.3



รูปที่ ผ 1.3 แสดงภาพตัดขวางหลอดรังสีเอกซ์

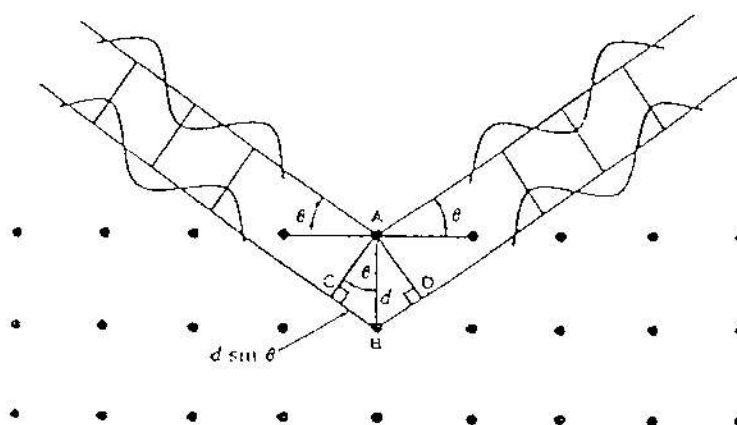
เนื่องจากการเกิดรังสีเอกซ์ต้องให้ความร้อนแก่ลวดทังสเตนอยู่ตลอดเวลาเพื่อให้อิเล็กตรอนวิ่งไปชนเป้า แต่ปริมาณอิเล็กตรอนที่วิ่งชนเป้าหมายนั้นมีเพียงส่วนน้อย ส่วนใหญ่จะกลายเป็นความร้อน ดังนั้นต้องทำให้ขั้วแอโนดเย็นอยู่เสมอเพื่อไม่ให้ขั้วหลอมเหลว

3. การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์(Diffraction of X-ray)

การเลี้ยวเบน (diffraction) เป็นปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นเมื่อรังสีหรือคลื่นปะทะสิ่งกีดขวาง แล้วคลื่นหรือรังสีนั้นแยกเป็นกลุ่มจากเกิดการแทรก (interference) รังสีเหล่านี้อาจจะเกิดการรวมกัน (constructive interference) หรือหักล้างกัน (destructive interference)

ปี 1912 แบริก (Bragg) ศึกษาการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์โดยผลึก พบว่าลักษณะของผลึกประกอบด้วยชั้นหรือระนาบ เมื่อรังสีเอกซ์ที่มีความถี่เดียวกันตกกระทบผลึกจะถูกสะท้อนด้วยอะตอมใน lattice plane หรือ crystal plane ถ้าความแตกต่างของทางเดิน

(path difference) ของรังสีเอ็กซ์เป็นจำนวนเท่าของความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์แล้ว จะเกิดการสอดแทรกของคลื่นสองขบวนแล้วให้รังสีเอ็กซ์ที่เข้ม ทางเรขาคณิตกล่าวได้ว่าเมื่อระยะห่างระหว่าง lattice plane เป็น d มุมที่รังสีเอ็กซ์ที่มีความยาวคลื่น λ ทำกับ lattice plane เป็นมุม θ แล้วจะทำให้ความแตกต่างของทางเดินของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนจาก lattice plane มีค่าเท่ากับ $2 d \sin \theta$ ดังรูปที่ ๗ 1.4



รูปที่ ๗ 1.4 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ในผลึก

จากเงื่อนไขการเลี้ยวเบนของคลื่นจะได้รังสีเอ็กซ์ที่เข้มเมื่อ

$$n\lambda = 2 d \sin \theta$$

โดยที่ n เป็นจำนวนเต็ม

สมการนี้เรียกว่า กฎของแบรกก์ (Bragg's law)

โดยอาศัยกฎการเลี้ยวเบนของแสง นำมาประยุกต์กับรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนออกจากอะตอมใน lattice plane ของผลึกเป็นที่ยอมรับกันมานานแล้ว รังสีเอ็กซ์จึงถูกนำมาหาหลักการเรียงตัวของอะตอมของผลึกด้วยวิธีต่าง ๆ กัน ทำให้ได้โครงสร้างของผลึกและระยะห่างระหว่างอะตอมซึ่งวัดโดยทางอ้อมจากทิศทางและความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน