

## บทคัดย่อ

ได้ทำการสังเคราะห์สารประกอบเชิงซ้อนคอปเปอร์(I) แฮไลด์ ( $\text{CuX}$ ;  $\text{X} = \text{F}, \text{Br}, \text{I}$ ) กับลิแกนด์ไธโอยูเรีย เอธิลีนไธโอยูเรีย คือ  $\text{Cu}(\text{tu})_n\text{F}$ ,  $\text{Cu}(\text{tu})_n\text{Br}$ ,  $\text{Cu}(\text{tu})_n\text{I}$ ,  $\text{Cu}(\text{etu})_n\text{F}$  และ  $\text{Cu}(\text{etu})_n\text{Br}$  และทำการบันทึกข้อมูล การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว พร้อมทั้ง หาโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อนไธโอยูเรียคอปเปอร์(I) ฟลูออไรด์ ( $\text{Cu}(\text{tu})_n\text{F}$ ) พบว่า โครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนเป็นออร์โธรมบิก มีค่า ความยาวด้านของเซลล์หน่วย  $a = 21.148$  (2),  $b = 13.122$ (2) และ  $c = 12.274$ (7) อังสตรอม ค่ามุม  $\alpha = \beta = \gamma = 90$  องศา ในหนึ่งเซลล์หน่วยมี 4 โมเลกุล และไม่พบพันธะไฮโดรเจนทั้งในและระหว่างโมเลกุล ค่าเรซิดิว ( $R$ ) = 0.050 จากข้อมูลการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์จำนวน 3228 ข้อมูล โครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนประกอบด้วย แคทไอออน  $[\text{Cu}(\text{tu})_4]^+$  สองตัวซึ่งเป็นอิสระกัน แอนไอออน  $\text{SF}_6^{2-}$  และโมเลกุลของน้ำ รูปทรงเรขาคณิตของอะตอมคอปเปอร์(I) ทั้งสองเป็นแบบทรงสี่หน้า แต่ละอะตอมของคอปเปอร์(I) จะเกิดพันธะกับไธโอยูเรียสี่โมเลกุล โดยพันธะผ่านอะตอมซัลเฟอร์ความยาวพันธะ Cu-S มีค่า 2.320(2)-2.349(2) อังสตรอม และมุมพันธะ S-Cu-S มีค่า 97.24(9)-116.87(9) องศา

## ABSTRACT

The complexes of copper(I) halides ( $\text{CuX}$  ;  $\text{X} = \text{F}, \text{Br}, \text{I}$ ) with thiourea and ethylenethiourea,  $\text{Cu}(\text{tu})_n\text{F}$ ,  $\text{Cu}(\text{tu})_n\text{Br}$ ,  $\text{Cu}(\text{tu})_n\text{I}$ ,  $\text{Cu}(\text{etu})_n\text{F}$  and  $\text{Cu}(\text{etu})_n\text{Br}$  were synthesized. Crystal structure of thioureacopper(I) fluoride,  $\text{Cu}(\text{etu})_n\text{F}$ , was determined by single crystal X-ray diffraction method. It was found that the former complex is orthorhombic  $a = 21.148(2)$ ,  $b = 13.122(2)$  and  $c = 12.274(7)$  Å ;  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . There are 4 molecules in unit cell,  $Z = 4$ . No intramolecular and intermolecular by hydrogen bond are found. The structure was refined to a residual (R) of 0.050 for 3228 "observed" independent reflections. The complex has two independent cations of  $[\text{Cu}(\text{tu})_4]^+$ , anion  $\text{SF}_6^{2-}$  and  $\text{H}_2\text{O}$  in crystal lattice. The geometry of copper(I) atoms are tetrahedral. Each of copper(I) atom bonded with four molecules of thiourea by sulfur atom. Cu-S bond ranging between  $2.320(2)$ - $2.349(2)$  Å and S-Cu-S angle ranging between  $97.24(9)$ - $116.87(9)^\circ$ .