

สารบัญ

	หน้า
กิตติกรรมประกาศ	ข
บทคัดย่อภาษาไทย	ค
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ (Abstract)	ง
สารบัญตาราง	ช
สารบัญรูป	ซ
อักษรย่อและสัญลักษณ์	ญ
1. บทนำ	1
2. ทฤษฎี	4
2.1 แหล่งกำเนิดรังสีเอกซ์	4
2.2 หลอดรังสีเอกซ์	6
2.3 การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์	7
2.4 การถ่ายภาพเอกซเรย์	8
2.5 ระบบเอกซ์ทอล	8
3. การทดลอง	10
3.1 เครื่องมือและอุปกรณ์	10
3.2 สารเคมี	11
3.3 การสังเคราะห์สารประกอบเชิงซ้อน	11
3.4 การถ่ายภาพผลึกด้วยรังสีเอกซ์	14
3.5 การคำนวณหาโครงสร้างผลึกด้วยโปรแกรมเอกซ์ทอล	20

สารบัญ(ต่อ)

	หน้า
4. ผลการทดลอง	23
4.1 ผลการศึกษาสมบัติทางกายภาพของสารประกอบเชิงซ้อน	23
4.2 ผลการศึกษาโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อน $Cu(tu)_nF$ โดยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว	24
4.3 ผลการคำนวณหาโครงสร้างผลึก $Cu(tu)_nF$ โดยใช้โปรแกรม Xtal 3.2	28
5. สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง	47
เอกสารอ้างอิง	50
ภาคผนวก	52
ผนวก ก แผนภาพแสดงขั้นตอนต่างๆ ในการหาโครงสร้างผลึก โดยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว	53
ผนวก ข การคำนวณหาความหนาแน่น	54
ผนวก ค ระบบผลึก	55
ผนวก ง การคำนวณหาปริมาตรของผลึก	56
ผนวก จ ข้อมูล (Input File) การคำนวณหาโครงสร้างโมเลกุลของผลึก สารประกอบเชิงซ้อน	57

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	สมบัติทางกายภาพของสารประกอบเชิงซ้อนที่สังเคราะห์ได้	23
2	พิกัดของอะตอมในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{tu})_4]_2 \text{SiF}_6 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ (ไม่รวมอะตอมไฮโดรเจน)	29
3	พิกัดของอะตอมและพารามิเตอร์ของอะตอมไฮโดรเจน ในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{tu})_4]_2 \text{SiF}_6 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$	32
4	เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{tu})_4]_2 \text{SiF}_6 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ (ไม่รวมอะตอมไฮโดรเจน) (1000 U_D)	34
5	ความยาวพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{tu})_4]_2 \text{SiF}_6 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$	36
6	มุมพันธะในโมเลกุล $[\text{Cu}(\text{tu})_4]_2 \text{SiF}_6 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$	38

สารบัญรูป

รูปที่	หน้า	
1	การใช้เทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว ในการทำโครงสร้างผลึกของสาร	3
2	โครงสร้างผลึกของเอธิสไนไฮโอยูเรีย	3
3	รังสีเอกซ์	4
4	การเกิดรังสีเอกซ์	5
5	Filament X-ray Tube	6
6	การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ในผลึก	7
7	การเผ้าท์ผลึก	14
8	หัวโกนิโอมิเตอร์	15
9	การปรับผลึกให้อยู่ในแนวแกน	16
10	ส่วนประกอบของกล้องวไนน์เซนเบอร์ก	18
11	การถ่ายภาพเอกซเรย์หลังจากการจัดผลึกอยู่ในแนวแกน	18
12	ลักษณะการกระจายของรังสีเอกซ์จากภาพถ่ายแบบ Oscillation	19
13	ภาพถ่ายเอกซเรย์แบบ Oscillation	19
14	ภาพถ่ายเอกซเรย์โดยวิธีหมุนแบบกวัดแกว่งของผลึก $Cu(tu)_nF$ รอบแกน b	24
15	ภาพถ่ายเอกซเรย์แบบวไนน์เซนเบอร์กชั้นที่ศูนย์ (h0l) ของผลึก $Cu(tu)_nF$	25
16	ภาพถ่ายเอกซเรย์แบบวไนน์เซนเบอร์กชั้นที่ศูนย์ (h1l) ของผลึก $Cu(tu)_nF$	26
17	โครงสร้างโมเลกุลเดี่ยวของแคทไอออน $[Cu(tu)_4]^+$ (โมเลกุลที่ 1)	42
18	โครงสร้างโมเลกุลเดี่ยวของแคทไอออน $[Cu(tu)_4]^+$ (ไม่รวมอะตอมไฮโดรเจน), (โมเลกุลที่ 1)	43

สารบัญรูป (ต่อ)

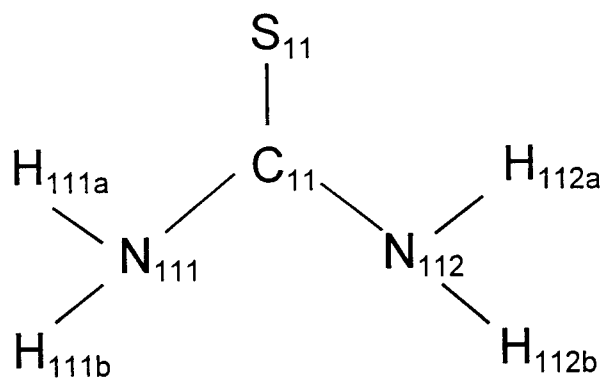
รูปที่		หน้า
19	โครงสร้างโมเลกุลเดี่ยวของแคทไอออน $[\text{Cu}(\text{tu})_4]^+$ (โมเลกุลที่ 2)	44
20	โครงสร้างโมเลกุลเดี่ยวของแคทไอออน $[\text{Cu}(\text{tu})_4]^+$ (ไม่รวมอะตอมไฮโดรเจน), (โมเลกุลที่ 2)	45
21	โครงสร้างโมเลกุลของผลึก $[\text{Cu}(\text{tu})_4]_2 \text{SiF}_6 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ ในหนึ่งเซลล์หน่วย (ไม่รวมอะตอมไฮโดรเจน)	46

อักษรย่อและสัญลักษณ์

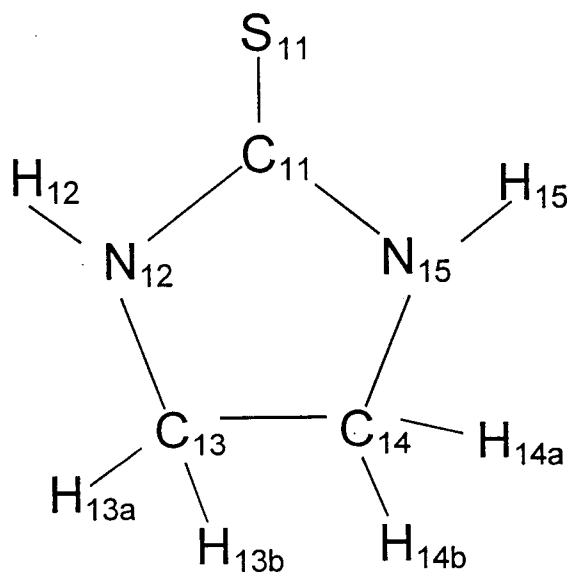
อักษรย่อและสัญลักษณ์ที่ใช้

°ซ	=	องศาเซลเซียส
ชม.	=	ชั่วโมง
ชม.	=	เซนติเมตร
มล.	=	มิลลิลิตร
มม.	=	มิลลิเมตร
Å	=	อังสตรอม (Angstrom)
A.R.	=	Analytical Reagent
bdf	=	Binary Data File
etu	=	Ethylenethiourea
G.R.	=	Guarantee Reagent
X	=	Halide
λ	=	Wavelength
α	=	Alpha
β	=	Beta
γ	=	Gamma

การกำหนดตัวเลขบนอะตอม (Atomic Numbering)



เอทิลเอมีน



เอทิลเอมีน