

บทคัดย่อภาษาไทย

รหัสโครงการ : PDF/21/2544

ชื่อโครงการ : การศึกษาผลึกศาสตร์โดยใช้รังสีเอกซ์ของการจำได้เชิงโมเลกุลของ C_{60}
กับสารอะโรมาติกไฮโดรคาร์บอน

ชื่อผู้วิจัยและสถาบัน : ดร. ชรรมรัตน์ อารีย์ และ รศ. ดร. สุพจน์ หารหนองบัว
ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

E-mail Address : mam@atc.atccu.chula.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : 1 กรกฎาคม 2544 – 30 มิถุนายน 2546

บทคัดย่อ

โครงการวิจัยมีวัตถุประสงค์ในการศึกษาการจำได้เชิงโมเลกุลของ C_{60} ที่มีพื้นผิวโค้งกับสารโพลีไซคลิกอะโรมาติกไฮโดรคาร์บอนขนาดต่าง ๆ กัน (แนพทาลีน แอนทราซีนและโคโรนีน) ที่มีพื้นผิวแบนราบด้วยวิธีทางผลึกศาสตร์โดยใช้รังสีเอกซ์ วิธีการนี้ประกอบด้วย 3 ขั้นตอนคือ การตกผลึก การเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์และการประมวลผลข้อมูล ถึงแม้ว่าได้ใช้ความพยายามอย่างมากในการตกผลึกสารเชิงซ้อนระหว่าง C_{60} กับโพลีไซคลิกอะโรมาติกไฮโดรคาร์บอนด้วยตัวทำละลายต่าง ๆ กันแล้วก็ตาม แต่ล้มเหลวที่จะได้ผลึกที่ต้องการ ทั้งนี้อาจจะเนื่องมาจากการที่โมเลกุล C_{60} และโพลีไซคลิกอะโรมาติกไฮโดรคาร์บอนมีพื้นผิวสัมผัสกันน้อยเป็นผลให้เกิดอันตรกิริยา π - π น้อยและโมเลกุลไม่ตกผลึกรวมตัวกันเป็นสารเชิงซ้อนที่เสถียรในสถานะผลึกของแข็งตรงกันข้ามโมเลกุล C_{60} และโพลีไซคลิกอะโรมาติกไฮโดรคาร์บอนชอบที่จะตกผลึกแยกจากกัน อย่างไรก็ตาม ในระหว่างดำเนินโครงการนี้ ได้ทำการตกผลึกสารเชิงซ้อนอินคลูชันระหว่างเบตาไซโคลเดกซ์ทรินกับกรดคาร์บอกซิลิก (กรดเบนโซอิก กรดฟอร์มิกและกรดอะซีติก) ซึ่งให้ผลึกที่มีคุณภาพสูงพร้อมไปกับข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ที่ดีและโครงสร้างผลึกใหม่ ทำให้สามารถทำงานวิจัยทางผลึกศาสตร์ที่สมบูรณ์ได้ นอกจากนี้โครงสร้างผลึกเหล่านี้ยังได้รับการตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติด้วย โดยรายละเอียดเชิงโครงสร้างของผลึกได้อธิบายไว้เป็นเอกสารแนบในภาคผนวก

คำหลัก: โครงสร้างผลึก, การวิเคราะห์ด้วยรังสีเอกซ์, C_{60} , โพลีไซคลิกอะโรมาติกไฮโดรคาร์บอน

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ

Project Code : PDF/21/2544

Project Title : X-Ray Crystallographic Study on Molecular Recognition of C₆₀
with Aromatic Hydrocarbons

Investigators and Institute : Dr. Thammarat Aree and

Assoc. Prof. Dr. Supot Hannongbua

Department of Chemistry, Faculty of Science,

Chulalongkorn University

E-mail Address : mam@atc.atccu.chula.ac.th

Project Period : 1 July 2001 – 30 June 2002

Abstract

The research project is aimed at studying the molecular recognition of convex C₆₀ with planar polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) that have different sizes (naphthalene, anthracene, and coronene) by means of X-ray crystallography. This method comprises three steps, i.e., crystallization, X-ray diffraction, and data processing. Although several efforts were put into crystallization of the C₆₀-PAHs complexes using different solvents, but it failed to obtain the desired crystals. This is probably due to the low surface contacts between C₆₀ and PAHs, resulting in a few numbers of π - π interactions and the molecules do not cocrystallize to be a stable complex in crystalline state. By contrast, C₆₀ and PAHs tend to crystallize separately. However, during this project we did crystallization of the inclusion complexes between β -cyclodextrin and carboxylic acids (benzoic acid, formic acid, and acetic acid), providing high quality crystals, along with good X-ray diffraction data sets and new crystal structures. This enabled us to conduct a complete crystallographic research. In addition, these crystal structures have been accepted for publication in the international journals. The structural details are described as attachments to the appendix.

Keywords: Crystal structure, X-ray analysis, C₆₀, Polycyclic Aromatic Hydrocarbons