ภาคผนวก ก

1. ข้อมูลผลึก (Crystallographic data)

ตารางที่ 1 ความยาวพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]Cl_4 \cdot 10H_2O$

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
Cu(1)-Cu(2)	2.687(5)
Cu(1)-S(1a)	2.31(1)
Cu(1)-S(1b)	2.413(8)
Cu(1)-S(1c)	2.293(9)
Cu(1)-S(1d)	2.422(9)
Cu(2)-S(1a)	2.494(8)
Cu(2)-S(1b)	2.384(9)
Cu(2)-S(1e)	2.26(1)
Cu(2)-S(1d)	2.352(8)
S(1a)-C(1a)	1.54(5)
C(1a)-N(1a)	1.42(6)
C(1a)-N(2a)	1.31(7)
C(1a)-C(7a)	1.91(7)
N(1a)-C(2a)	1.52(6)
N(2a)-C(7a)	0.9(1)
C(2a)-C(3a)	1.29(9)
C(2a)-C(7a)	1.8(1)
C(3a)-C(4a)	1.4(1)
C(4a)-C(5a)	1.4(1)
C(5a)-C(6a)	1.5(1)
C(6a)-C(7a)	1.4(1)
S(1b)-C(1b)	1.70(4)
C(1b)-N(1b)	1.39(4)
C(1b)-N(2b)	1.28(5)

ตารางที่ 1 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
N(1b)-C(2b)	1.38(6)
N(2b)-C(7b)	1.39(6)
C(2b)-C(3b)	1.50(6)
C(2b)-C(7b)	1.41(7)
C(3b)-C(4b)	1.37(8)
C(4b)-C(5b)	1.31(8)
C(5b)-C(6b)	1.40(7)
C(6b)-C(7b)	1.38(7)
S(1c)-C(1c)	1.58(5)
C(1c)-N(1c)	1.35(6)
C(1c)-N(2c)	1.32(5)
N(1c)-N(2c)	1.97(4)
N(1c)-C(2c)	1.34(5)
N(1c)-C(7c)	2.00(5)
N(2c)-C(7c)	1.44(6)
C(2c)-C(3c)	1.28(7)
C(2c)-C(7c)	1.23(7)
C(3c)-C(4c)	1.34(7)
C(4c)-C(5c)	1.34(8)
C(5c)-C(6c)	1.33(6)
C(6c)-C(7c)	1.54(6)
S(1d)-C(1d)	1.73(3)
C(1d)-N(1d)	1.30(4)
C(1d)-N(2d)	1.33(4)
N(1d)-C(2d)	1.39(5)
N(2d)-C(7d)	1.40(4)
C(2d)-C(3d)	1.36(5)
C(2d)-C(7d)	1.31(6)

ตารางที่ 1 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(3d)-C(4d)	1.33(7)
C(4d)-C(5d)	1.32(8)
C(5d)-C(6d)	1.34(6)
C(6d)-C(7d)	1.42(6)
S(1e)-C(1e)	1.60(4)
C(1e)-N(1e)	1.29(5)
C(1e)-N(2e)	1.40(6)
N(1e)-C(2e)	1.44(6)
N(2e)-C(7e)	1.44(7)
C(2e)-C(3e)	1.43(8)
C(2e)-C(7e)	1.21(9)
C(3e)-C(4e)	1.38(9)
C(4e)-C(5e)	1.5(1)
C(5e)-C(6e)	1.3(1)
C(6e)-C(7e)	1.5(1)
Cu(3)-Cu(4)	2.671(5)
Cu(3)-S(1f)	2.229(9)
Cu(3)-S(1g)	2.382(8)
Cu(3)-S(1h)	2.33(1)
Cu(3)-S(1i)	2.435(9)
Cu(4)-S(1g)	2.315(9)
Cu(4)-S(1h)	2.559(8)
Cu(4)-S(1j)	2.26(1)
Cu(4)-S(1i)	2.330(9)
S(1f)-C(1f)	1.74(4)
C(1f)-N(1f)	1.35(5)
C(1f)-N(2f)	1.35(5)
N(1f)-C(2f)	1.48(5)

ตารางที่ 1 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
N(2f)-C(7f)	1.44(6)
C(2f)-C(3f)	1.38(7)
C(2f)-C(7f)	1.36(8)
C(3f)-C(4f)	1.34(7)
C(4f)-C(5f)	1.18(7)
C(5f)-C(6f)	1.42(7)
C(6f)-C(7f)	1.27(6)
S(1g)-C(1g)	1.77(4)
C(1g)-N(1g)	1.35(4)
C(1g)-N(2g)	1.28(5)
N(1g)-C(2g)	1.31(6)
N(2g)-C(7g)	1.48(5)
C(2g)-C(3g)	1.42(6)
C(2g)-C(7g)	1.38(7)
C(3g)-C(4g)	1.42(9)
C(4g)-C(5g)	1.40(8)
C(5g)-C(6g)	1.39(6)
C(6g)-C(7g)	1.39(7)
S(1h)-C(1h)	1.59(5)
C(1h)-N(1h)	1.32(6)
C(1h)-N(2h)	1.32(6)
N(1h)-C(2h)	1.34(6)
N(2h)-C(7h)	1.11(8)
C(2h)-C(3h)	1.67(6)
C(2h)-C(7h)	1.51(7)
C(3h)-C(4h)	1.39(7)
C(4h)-C(5h)	1.35(8)
C(5h)-C(6h)	1.49(8)

ตารางที่ 1 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(6h)-C(7h)	1.43(9)
S(1i)-C(1i)	1.69(3)
C(1i)-N(1i)	1.34(5)
C(1i)-N(2i)	1.36(5)
N(1i)-C(2i)	1.44(5)
N(2i)-C(7i)	1.41(5)
C(2i)-C(3i)	1.34(5)
C(2i)-C(7i)	1.30(7)
C(3i)-C(4i)	1.45(7)
C(4i)-C(5i)	1.23(9)
C(5i)-C(6i)	1.36(6)
C(6i)-C(7i)	1.44(6)
S(1j)-C(1j)	1.70(4)
C(1j)-N(1j)	1.36(7)
C(1j)-N(2j)	1.49(6)
N(1j)-C(2j)	1.44(7)
N(2j)-C(7j)	1.44(6)
C(2j)-C(3j)	1.43(7)
C(2j)-C(7j)	1.41(7)
C(3j)-C(4j)	1.39(7)
C(4j)-C(5j)	1.2(1)
C(5j)-C(6j)	1.58(9)
C(6j)-C(7j)	1.35(7)
Cl(1)-O(15)	0.83(4)
Cl(2)-O(16)	0.99(4)
Cl(4)-O(10)	1.38(3)
Cl(7)-O(13)	1.37(4)
O(3)-O(14)	1.02(5)
O(9)-O(12)	1.29(5)

ตารางที่ 2 มุมพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]Cl_4 \cdot 10H_2O$

พันธะ	มุมพันธะ ($^{\circ}$)
Cu(2)-Cu(1)-S(1a)	59.3(2)
Cu(2)-Cu(1)-S(1b)	55.4(2)
Cu(2)-Cu(1)-S(1c)	128.4(3)
Cu(2)-Cu(1)-S(1d)	122.5(2)
S(1a)-Cu(1)-S(1b)	113.2(3)
S(1a)-Cu(1)-S(1c)	114.1(3)
S(1a)-Cu(1)-S(1d)	107.1(3)
S(1b)-Cu(1)-S(1c)	115.9(3)
S(1b)-Cu(1)-S(1d)	95.9(3)
S(1c)-Cu(1)-S(1d)	108.6(3)
Cu(1)-Cu(2)-S(1a)	52.8(2)
Cu(1)-Cu(2)-S(1b)	56.5(2)
Cu(1)-Cu(2)-S(1e)	118.9(3)
Cu(1)-Cu(2)-S(1d)	112.2(3)
S(1a)-Cu(2)-S(1b)	107.8(3)
S(1a)-Cu(2)-S(1e)	112.2(3)
S(1a)-Cu(2)-S(1d)′	89.5(3)
S(1b)-Cu(2)-S(1e)	111.9(4)
S(1b)-Cu(2)-S(1d)′	104.7(3)
S(1e)-Cu(2)-S(1d)′	127.7(3)
Cu(1)-S(1a)-Cu(2)	67.9(3)
Cu(1)-S(1a)-C(1a)	107(2)
Cu(2)-S(1a)-C(1a)	105(1)
S(1a)-C(1a)-N(1a)	137(3)
S(1a)-C(1a)-N(2a)	122(4)
S(1a)-C(1a)-C(7a)	147(4)
N(1a)-C(1a)-N(2a)	101(4)
N(1a)-C(1a)-C(7a)	76(4)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (^{o})
N(2a)-C(1a)-C(7a)	25(4)
C(1a)-N(1a)-C(2a)	121(3)
C(1a)-N(2a)-C(7a)	117(6)
N(1a)-C(2a)-C(3a)	136(5)
N(1a)-C(2a)-C(7a)	76(4)
C(3a)-C(2a)-C(7a)	147(5)
C(2a)-C(3a)-C(4a)	116(6)
C(3a)-C(4a)-C(5a)	113(5)
C(4a)-C(5a)-C(6a)	119(6)
C(5a)-C(6a)-C(7a)	148(9)
C(1a)-C(7a)-N(2a)	38(4)
C(1a)-C(7a)-C(2a)	86(3)
C(1a)-C(7a)-C(6a)	163(7)
N(2a)-C(7a)-C(2a)	123(6)
N(2a)-C(7a)-C(6a)	157(8)
C(2a)-C(7a)-C(6a)	77(6)
Cu(1)-S(1b)-Cu(2)	68.1(2)
Cu(1)-S(1b)-C(1b)	107(1)
Cu(2)-S(1b)-C(1b)	111(1)
S(1b)-C(1b)-N(1b)	116(3)
S(1b)-C(1b)-N(2b)	131(2)
N(1b)-C(1b)-N(2b)	113(3)
C(1b)-N(1b)-C(2b)	103(3)
C(1b)-N(2b)-C(7b)	110(3)
N(1b)-C(2b)-C(3b)	135(4)
N(1b)-C(2b)-C(7b)	110(4)
C(3b)-C(2b)-C(7b)	114(4)
C(2b)-C(3b)-C(4b)	119(4)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (^{o})
C(3b)-C(4b)-C(5b)	121(5)
C(4b)-C(5b)-C(6b)	126(4)
C(5b)-C(6b)-C(7b)	115(4)
N(2b)-C(7b)-C(2b)	104(4)
N(2b)-C(7b)-C(6b)	131(4)
C(2b)-C(7b)-C(6b)	125(4)
Cu(1)-S(1c)-C(1c)	102(1)
S(1c)-C(1c)-N(1c)	135(3)
S(1c)-C(1c)-N(2c)	130(4)
N(1c)-C(1c)-N(2c)	95(4)
C(1c)-N(1c)-N(2c)	42(2)
C(1c)-N(1c)-C(2c)	121(3)
C(1c)-N(1c)-C(7c)	84(3)
N(2c)-N(1c)-C(2c)	80(3)
N(2c)-N(1c)-C(7c)	42(2)
C(2c)-N(1c)-C(7c)	37(3)
C(1c)-N(2c)-N(1c)	43(2)
C(1c)-N(2c)-C(7c)	113(4)
N(1c)-N(2c)-C(7c)	70(3)
N(1c)-C(2c)-C(3c)	134(4)
N(1c)-C(2c)-C(7c)	102(4)
C(3c)-C(2c)-C(7c)	124(5)
C(2c)-C(3c)-C(4c)	120(4)
C(3c)-C(4c)-C(5c)	121(4)
C(4c)-C(5c)-C(6c)	122(4)
C(5c)-C(6c)-C(7c)	112(4)
N(1c)-C(7c)-N(2c)	68(2)
N(1c)-C(7c)-C(2c)	41(3)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (^{o})
N(1c)-C(7c)-C(6c)	161(4)
N(2c)-C(7c)-C(2c)	109(4)
N(2c)-C(7c)-C(6c)	131(4)
C(2c)-C(7c)-C(6c)	120(4)
Cu(1)-S(1d)-C(1d)	99(1)
Cu(1)-S(1d)-Cu(2)	122.0(4)
C(1d)-S(1d)-Cu(2)	114(1)
S(1d)-C(1d)-N(1d)	130(3)
S(1d)-C(1d)-N(2d)	123(2)
N(1d)-C(1d)-N(2d)	107(3)
C(1d)-N(1d)-C(2d)	112(3)
C(1d)-N(2d)-C(7d)	108(3)
N(1d)-C(2d)-C(3d)	130(4)
N(1d)-C(2d)-C(7d)	105(3)
C(3d)-C(2d)-C(7d)	124(4)
C(2d)-C(3d)-C(4d)	111(4)
C(3d)-C(4d)-C(5d)	127(4)
C(4d)-C(5d)-C(6d)	122(4)
C(5d)-C(6d)-C(7d)	113(4)
N(2d)-C(7d)-C(2d)	108(3)
N(2d)-C(7d)-C(6d)	130(4)
C(2d)-C(7d)-C(6d)	122(3)
Cu(2)-S(1e)-C(1e)	112(2)
S(1e)-C(1e)-N(1e)	129(3)
S(1e)-C(1e)-N(2e)	127(3)
N(1e)-C(1e)-N(2e)	103(3)
C(1e)-N(1e)-C(2e)	111(4)
C(1e)-N(2e)-C(7e)	109(4)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
N(1e)-C(2e)-C(3e)	124(5)
N(1e)-C(2e)-C(7e)	109(5)
C(3e)-C(2e)-C(7e)	127(5)
C(2e)-C(3e)-C(4e)	110(6)
C(3e)-C(4e)-C(5e)	131(7)
C(4e)-C(5e)-C(6e)	109(8)
C(5e)-C(6e)-C(7e)	123(7)
N(2e)-C(7e)-C(2e)	107(5)
N(2e)-C(7e)-C(6e)	132(5)
C(2e)-C(7e)-C(6e)	120(6)
Cu(4)-Cu(3)-S(1f)	127.5(3)
Cu(4)-Cu(3)-S(1g)	54.2(2)
Cu(4)-Cu(3)-S(1h)	61.1(2)
Cu(4)-Cu(3)-S(1i)	119.8(2)
S(1f)-Cu(3)-S(1g)	116.0(3)
S(1f)-Cu(3)-S(1h)	112.7(3)
S(1f)-Cu(3)-S(1i)′	112.7(3)
S(1g)-Cu(3)-S(1h)	113.7(3)
S(1g)-Cu(3)-S(1i)′	100.3(3)
S(1h)-Cu(3)-S(1i)′	99.6(3)
Cu(3)-Cu(4)-S(1g)	56.5(2)
Cu(3)-Cu(4)-S(1h)	53.0(2)
Cu(3)-Cu(4)-S(1j)	119.6(3)
Cu(3)-Cu(4)-S(1i)	117.2(3)
S(1g)-Cu(4)-S(1h)	108.1(3)
S(1g)-Cu(4)-S(1j)	112.8(4)
S(1g)-Cu(4)-S(1i)	116.1(3)
S(1h)-Cu(4)-S(1j)	111.5(3)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
S(1h)-Cu(4)-S(1i)	85.8(3)
S(1j)-Cu(4)-S(1i)	118.8(4)
Cu(3)-S(1f)-C(1f)	111(1)
S(1f)-C(1f)-N(1f)	121(3)
S(1f)-C(1f)-N(2f)	130(3)
N(1f)-C(1f)-N(2f)	109(3)
C(1f)-N(1f)-C(2f)	108(3)
C(1f)-N(2f)-C(7f)	109(3)
N(1f)-C(2f)-C(3f)	133(5)
N(1f)-C(2f)-C(7f)	105(4)
C(3f)-C(2f)-C(7f)	121(5)
C(2f)-C(3f)-C(4f)	113(5)
C(3f)-C(4f)-C(5f)	126(5)
C(4f)-C(5f)-C(6f)	122(5)
C(5f)-C(6f)-C(7f)	116(4)
N(2f)-C(7f)-C(2f)	108(4)
N(2f)-C(7f)-C(6f)	131(5)
C(2f)-C(7f)-C(6f)	121(4)
Cu(3)-S(1g)-Cu(4)	69.3(2)
Cu(3)-S(1g)-C(1g)	106(1)
Cu(4)-S(1g)-C(1g)	107(1)
S(1g)-C(1g)-N(1g)	121(3)
S(1g)-C(1g)-N(2g)	127(3)
N(1g)-C(1g)-N(2g)	111(3)
C(1g)-N(1g)-C(2g)	110(3)
C(1g)-N(2g)-C(7g)	106(3)
N(1g)-C(2g)-C(3g)	137(4)
N(1g)-C(2g)-C(7g)	109(4)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(3g)-C(2g)-C(7g)	114(4)
C(2g)-C(3g)-C(4g)	119(4)
C(3g)-C(4g)-C(5g)	125(4)
C(4g)-C(5g)-C(6g)	115(5)
C(5g)-C(6g)-C(7g)	119(4)
N(2g)-C(7g)-C(2g)	104(4)
N(2g)-C(7g)-C(6g)	129(4)
C(2g)-C(7g)-C(6g)	127(4)
Cu(3)-S(1h)-Cu(4)	66.0(2)
Cu(3)-S(1h)-C(1h)	114(2)
Cu(4)-S(1h)-C(1h)	108(1)
S(1h)-C(1h)-N(1h)	125(3)
S(1h)-C(1h)-N(2h)	128(4)
N(1h)-C(1h)-N(2h)	107(4)
C(1h)-N(1h)-C(2h)	108(3)
C(1h)-N(2h)-C(7h)	115(4)
N(1h)-C(2h)-C(3h)	135(4)
N(1h)-C(2h)-C(7h)	102(4)
C(3h)-C(2h)-C(7h)	123(4)
C(2h)-C(3h)-C(4h)	116(4)
C(3h)-C(4h)-C(5h)	121(5)
C(4h)-C(5h)-C(6h)	123(5)
C(5h)-C(6h)-C(7h)	128(6)
N(2h)-C(7h)-C(2h)	107(4)
N(2h)-C(7h)-C(6h)	144(6)
C(2h)-C(7h)-C(6h)	109(5)
Cu(3)-S(1i)-C(1i)	99(1)
Cu(3)-S(1i)-Cu(4)	118.6(4)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (^{o})
C(1i)-S(1i)-Cu(4)	112(1)
S(1i)-C(1i)-N(1i)	132(3)
S(1i)-C(1i)-N(2i)	125(3)
N(1i)-C(1i)-N(2i)	103(3)
C(1i)-N(1i)-C(2i)	114(3)
C(1i)-N(2i)-C(7i)	109(3)
N(1i)-C(2i)-C(3i)	129(4)
N(1i)-C(2i)-C(7i)	102(3)
C(3i)-C(2i)-C(7i)	129(4)
C(2i)-C(3i)-C(4i)	109(4)
C(3i)-C(4i)-C(5i)	128(4)
C(4i)-C(5i)-C(6i)	121(5)
C(5i)-C(6i)-C(7i)	116(4)
N(2i)-C(7i)-C(2i)	111(4)
N(2i)-C(7i)-C(6i)	131(4)
C(2i)-C(7i)-C(6i)	118(4)
Cu(4)-S(1j)-C(1j)	106(2)
S(1j)-C(1j)-N(1j)	127(4)
S(1j)-C(1j)-N(2j)	120(4)
N(1j)-C(1j)-N(2j)	113(4)
C(1j)-N(1j)-C(2j)	103(4)
C(1j)-N(2j)-C(7j)	105(3)
N(1j)-C(2j)-C(3j)	130(4)
N(1j)-C(2j)-C(7j)	113(4)
C(3j)-C(2j)-C(7j)	116(5)
C(2j)-C(3j)-C(4j)	114(5)
C(3j)-C(4j)-C(5j)	138(7)
C(4j)-C(5j)-C(6j)	106(6)

ตารางที่ 2 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(5j)-C(6j)-C(7j)	122(4)
N(2j)-C(7j)-C(2j)	106(4)
N(2j)-C(7j)-C(6j)	131(4)
C(2j)-C(7j)-C(6j)	122(5)

หมายเหตุ : Superscript จะสัมพันธ์กับสมมาตรดังนี้

′ = 1 - x, -y, -z

ตารางที่ 3 พิกัดของอะตอม (ยกเว้นไฮโดรเจน) ในโมเลกุล $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]Cl_4 \cdot 10H_2O$

อะตอม	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
Cu(1)	0.4169(2)	0.5030(2)	0.0995(2)	* 0.050(3)
Cu(2)	0.5944(3)	0.5405(2)	0.0887(2)	* 0.058(3)
S(1a)	0.4361(6)	0.6318(5)	0.0669(5)	* 0.042(6)
C(1a)	0.411(2)	0.688(3)	0.124(2)	* 0.07(3)
N(1a)	0.403(2)	0.678(1)	0.189(2)	* 0.05(2)
N(2a)	0.388(4)	0.767(4)	0.118(2)	* 0.13(5)
C(2a)	0.377(2)	0.752(2)	0.231(3)	* 0.06(4)
C(3a)	0.359(3)	0.764(4)	0.290(2)	* 0.08(4)
C(4a)	0.339(3)	0.843(4)	0.307(3)	* 0.10(5)
C(5a)	0.337(2)	0.899(2)	0.256(5)	* 0.17(8)
C(6a)	0.359(4)	0.865(7)	0.191(3)	* 0.21(9)
C(7a)	0.385(3)	0.797(2)	0.153(5)	* 0.11(9)
S(1b)	0.5685(5)	0.4042(5)	0.0977(4)	* 0.049(6)
C(1b)	0.583(2)	0.367(2)	0.171(2)	* 0.03(2)
N(1b)	0.624(2)	0.284(2)	0.177(1)	* 0.04(2)
N(2b)	0.562(2)	0.402(2)	0.224(2)	* 0.05(2)
C(2b)	0.622(2)	0.271(3)	0.240(2)	* 0.06(4)
C(3b)	0.654(3)	0.199(2)	0.282(2)	* 0.08(3)
C(4b)	0.646(3)	0.210(3)	0.345(3)	* 0.09(4)
C(5b)	0.611(2)	0.282(4)	0.369(2)	* 0.06(3)
C(6b)	0.577(2)	0.353(2)	0.335(2)	* 0.06(3)
C(7b)	0.587(2)	0.345(3)	0.272(2)	* 0.03(3)
S(1c)	0.3150(6)	0.5013(5)	0.1871(4)	* 0.049(6)
C(3h)	0.106(2)	0.847(3)	0.172(2)	* 0.06(3)
C(4h)	0.133(3)	0.772(4)	0.145(2)	* 0.09(4)
C(5h)	0.149(2)	0.702(3)	0.179(3)	* 0.08(4)
C(6h)	0.137(2)	0.702(4)	0.248(3)	* 0.11(5)
C(7h)	0.116(3)	0.770(3)	0.289(3)	* 0.06(4)

ตารางที่ 3 (ต่อ)

อะตอม	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
S(1i)	0.1517(5)	1.0568(5)	0.5027(4)	* 0.045(6)
C(1i)	0.269(2)	1.019(2)	0.478(2)	* 0.05(3)
N(1i)	0.319(2)	0.942(2)	0.469(1)	* 0.07(3)
N(2i)	0.334(2)	1.064(2)	0.456(1)	* 0.05(2)
C(2i)	0.419(3)	0.936(3)	0.447(2)	* 0.06(3)
C(3i)	0.489(3)	0.870(2)	0.438(2)	* 0.08(3)
C(4i)	0.577(4)	0.895(3)	0.414(2)	* 0.10(5)
C(5i)	0.590(3)	0.965(4)	0.404(2)	* 0.10(5)
C(6i)	0.515(3)	1.030(3)	0.413(2)	* 0.07(3)
C(7i)	0.424(3)	1.012(3)	0.439(2)	* 0.07(4)
S(1j)	-0.1748(6)	1.0071(6)	0.3206(4)	* 0.061(7)
C(1j)	-0.159(2)	0.906(2)	0.305(3)	* 0.08(4)
N(1j)	-0.148(2)	0.873(3)	0.248(1)	* 0.07(3)
N(2j)	-0.157(2)	0.846(2)	0.357(1)	* 0.06(2)
C(2j)	-0.141(2)	0.787(3)	0.262(2)	* 0.07(4)
C(3j)	-0.124(2)	0.719(3)	0.222(2)	* 0.07(3)
C(4j)	-0.125(3)	0.644(3)	0.252(3)	* 0.12(5)
C(5j)	-0.123(5)	0.616(5)	0.306(3)	* 0.19(8)
C(6j)	-0.140(2)	0.693(3)	0.350(2)	* 0.10(4)
C(7j)	-0.141(2)	0.768(3)	0.327(2)	* 0.06(3)
Cl(1)	0.275(1)	0.8572(8)	-0.0995(7)	0.0350(-) 0.5000(-)
Cl(2)	0.470(1)	0.5526(8)	0.2816(7)	0.0350(-) 0.5000(-)
Cl(3)	0.0061(9)	1.0499(8)	0.2122(6)	0.0350(-) 0.5000(-)
Cl(4)	0.1467(9)	1.1333(8)	0.1305(7)	0.0350(-) 0.5000(-)
Cl(5)	0.2747(9)	0.7851(8)	0.4808(6)	0.0350(-) 0.5000(-)
Cl(6)	0.2348(9)	0.7162(8)	-0.0131(6)	0.0350(-) 0.5000(-)
Cl(7)	0.4240(9)	0.5844(8)	0.4504(6)	0.0350(-) 0.5000(-)
Cl(8)	-0.0693(9)	0.7381(8)	0.5092(6)	0.0350(-) 0.5000(-)

ตารางที่ 4 พิกัดของไฮโดรเจนในโมเลกุล $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]Cl_4 \cdot 10H_2O$

อะตอม	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(1a)	0.4143(-)	0.6244(-)	0.2065(-)	0.058(-)
H(2a)	0.3831(-)	0.7996(-)	0.0776(-)	0.101(-)
H(3a)	0.3577(-)	0.7183(-)	0.3221(-)	0.099(-)
H(4a)	0.3285(-)	0.8538(-)	0.3557(-)	0.132(-)
H(5a)	0.3238(-)	0.9533(-)	0.2842(-)	0.154(-)
H(6a)	0.3428(-)	0.9356(-)	0.1706(-)	0.161(-)
H(1b)	0.6479(-)	0.2471(-)	0.1448(-)	0.061(-)
H(2b)	0.5324(-)	0.4590(-)	0.2315(-)	0.063(-)
H(3b)	0.6826(-)	0.1448(-)	0.2658(-)	0.091(-)
H(4b)	0.6615(-)	0.1645(-)	0.3754(-)	0.089(-)
H(5b)	0.6105(-)	0.2897(-)	0.4151(-)	0.077(-)
H(6b)	0.5489(-)	0.4044(-)	0.3580(-)	0.074(-)
H(1c)	0.3607(-)	0.3434(-)	0.1253(-)	0.065(-)
H(2c)	0.3282(-)	0.3975(-)	0.2985(-)	0.061(-)
H(3c)	0.3986(-)	0.1769(-)	0.1323(-)	0.085(-)
H(4c)	0.4191(-)	0.0703(-)	0.2042(-)	0.096(-)
H(5c)	0.4113(-)	0.0928(-)	0.3090(-)	0.077(-)
H(6c)	0.3579(-)	0.2275(-)	0.3503(-)	0.080(-)
H(1d)	0.2151(-)	0.6069(-)	0.0101(-)	0.062(-)
H(2d)	0.1767(-)	0.3917(-)	0.0678(-)	0.050(-)
H(3d)	0.0254(-)	0.6979(-)	0.0317(-)	0.090(-)
H(4d)	-0.1292(-)	0.6733(-)	0.0626(-)	0.131(-)
H(5d)	-0.1552(-)	0.5543(-)	0.1036(-)	0.158(-)
H(6d)	-0.0307(-)	0.4315(-)	0.0967(-)	0.110(-)
H(1e)	0.6188(-)	0.7013(-)	0.2653(-)	0.060(-)
H(2e)	0.6472(-)	0.7133(-)	0.0835(-)	0.100(-)
H(3e)	0.6019(-)	0.8697(-)	0.2979(-)	0.159(-)
H(4e)	0.5917(-)	0.9960(-)	0.2429(-)	0.163(-)

ตารางที่ 4 (ต่อ)

อะตอม	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(5e)	0.6150(-)	1.0170(-)	0.1262(-)	0.253(-)
H(6e)	0.6226(-)	0.8967(-)	0.0719(-)	0.180(-)
H(1f)	0.1270(-)	1.2263(-)	0.3943(-)	0.061(-)
H(2f)	0.1525(-)	1.1912(-)	0.2117(-)	0.087(-)
H(3f)	0.0888(-)	1.4065(-)	0.3908(-)	0.112(-)
H(4f)	0.0645(-)	1.5105(-)	0.3167(-)	0.083(-)
H(5f)	0.0677(-)	1.4927(-)	0.2194(-)	0.115(-)
H(6f)	0.1090(-)	1.3556(-)	0.1754(-)	0.084(-)
H(1g)	-0.1441(-)	1.3144(-)	0.3937(-)	0.072(-)
H(2g)	-0.0576(-)	1.1183(-)	0.2901(-)	0.039(-)
H(3g)	-0.2034(-)	1.4358(-)	0.2952(-)	0.132(-)
H(4g)	-0.1983(-)	1.4438(-)	0.1864(-)	0.130(-)
H(5g)	-0.1392(-)	1.3320(-)	0.1207(-)	0.149(-)
H(6g)	-0.0838(-)	1.2001(-)	0.1687(-)	0.099(-)
H(1h)	0.0636(-)	0.9621(-)	0.2851(-)	0.053(-)
H(2h)	0.1154(-)	0.7477(-)	0.3716(-)	0.048(-)
H(3h)	0.0940(-)	0.9031(-)	0.1481(-)	0.081(-)
H(4h)	0.1346(-)	0.7760(-)	0.0979(-)	0.112(-)
H(5h)	0.1677(-)	0.6531(-)	0.1534(-)	0.101(-)
H(6h)	0.1455(-)	0.6417(-)	0.2669(-)	0.103(-)
H(1i)	0.2895(-)	0.8956(-)	0.4771(-)	0.085(-)
H(2i)	0.3196(-)	1.1226(-)	0.4536(-)	0.063(-)
H(3i)	0.4792(-)	0.8126(-)	0.4497(-)	0.097(-)
H(4j)	-0.1215(-)	0.6008(-)	0.2262(-)	0.135(-)
H(4i)	0.6349(-)	0.8546(-)	0.4035(-)	0.125(-)
H(5i)	0.6520(-)	0.9795(-)	0.3925(-)	0.113(-)
H(6i)	0.5191(-)	1.0905(-)	0.4007(-)	0.083(-)

ตารางที่ 4 (ต่อ)

อะตอม	x/a	y/b	z/c	U(eq) A**2
H(1j)	-0.1478(-)	0.9027(-)	0.2095(-)	0.084(-)
H(2j)	-0.1657(-)	0.8538(-)	0.4021(-)	0.079(-)
H(3j)	-0.1117(-)	0.7214(-)	0.1761(-)	0.091(-)
H(5j)	-0.1234(-)	0.5589(-)	0.3248(-)	0.226(-)
H(6j)	-0.1468(-)	0.6852(-)	0.3965(-)	0.124(-)

ตารางที่ 5 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]Cl_4 \cdot 10H_2O$

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	0.037(2)	0.055(3)	0.058(3)	-0.006(2)	-0.001(2)	-0.004(3)
Cu(2)	0.049(3)	0.068(3)	0.055(3)	-0.011(2)	0.009(2)	-0.022(3)
S(1a)	0.048(5)	0.041(5)	0.031(7)	0.004(4)	0.009(5)	-0.013(6)
C(1a)	0.03(2)	0.06(3)	0.11(5)	0.00(2)	0.00(2)	0.08(3)
N(1a)	0.03(2)	0.02(2)	0.09(3)	-0.01(1)	-0.00(2)	-0.00(2)
N(2a)	0.17(4)	0.19(6)	0.05(3)	-0.10(4)	-0.02(3)	-0.01(3)
C(2a)	0.02(2)	0.04(3)	0.13(6)	-0.00(2)	0.02(3)	-0.07(5)
C(3a)	0.08(3)	0.13(6)	0.03(4)	-0.01(3)	0.03(3)	-0.05(5)
C(4a)	0.08(3)	0.07(3)	0.16(6)	-0.02(3)	0.06(3)	-0.10(5)
C(5a)	0.01(2)	0.02(2)	0.5(1)	0.01(2)	-0.02(5)	-0.07(5)
C(6a)	0.07(4)	0.6(1)	0.03(4)	-0.10(6)	-0.02(3)	0.08(7)
C(7a)	0.02(2)	0.01(2)	0.3(1)	-0.01(2)	-0.04(5)	0.05(5)
S(1b)	0.042(5)	0.051(6)	0.049(7)	0.001(4)	0.003(5)	-0.009(6)
C(1b)	0.04(2)	0.02(2)	0.04(3)	-0.01(2)	0.00(2)	-0.02(2)
N(1b)	0.06(2)	0.03(2)	0.03(2)	0.00(1)	0.00(2)	0.01(2)
N(2b)	0.04(2)	0.04(2)	0.07(3)	-0.01(2)	-0.01(2)	0.01(2)
C(2b)	0.03(2)	0.11(4)	0.05(4)	-0.03(2)	0.03(2)	-0.04(4)
C(3b)	0.08(3)	0.09(3)	0.10(4)	-0.04(2)	-0.02(3)	0.06(4)
C(4b)	0.04(3)	0.12(4)	0.09(5)	-0.01(3)	-0.03(3)	0.03(5)
C(5b)	0.04(2)	0.12(4)	0.02(3)	-0.01(2)	0.02(2)	0.01(4)
C(6b)	0.03(2)	0.08(3)	0.06(4)	-0.00(2)	0.03(2)	-0.05(4)
C(7b)	0.02(2)	0.05(3)	0.02(3)	0.00(2)	0.01(2)	-0.03(3)
S(1c)	0.053(6)	0.047(6)	0.044(7)	-0.010(5)	0.012(5)	-0.010(6)
C(1c)	0.08(3)	0.14(5)	0.01(3)	-0.08(3)	-0.01(2)	-0.00(3)
N(1c)	0.07(2)	0.04(2)	0.03(3)	-0.01(2)	0.00(2)	-0.00(2)
N(2c)	0.02(1)	0.10(3)	0.04(3)	-0.02(2)	0.02(1)	-0.05(3)
C(2c)	0.04(2)	0.05(3)	0.01(3)	-0.00(2)	0.01(2)	-0.02(3)
C(3c)	0.09(3)	0.07(3)	0.03(3)	-0.03(3)	0.04(2)	-0.02(3)

ตารางที่ 5 (ต่อ)

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(4c)	0.10(3)	0.07(3)	0.04(3)	-0.01(2)	0.02(3)	-0.04(4)
C(5c)	0.02(2)	0.05(3)	0.12(5)	-0.01(2)	-0.01(3)	0.03(4)
C(6c)	0.04(2)	0.08(3)	0.05(3)	-0.01(2)	-0.01(2)	0.00(3)
C(7c)	0.02(2)	0.07(3)	0.02(3)	-0.01(2)	0.01(2)	-0.00(3)
S(1d)	0.035(5)	0.049(5)	0.033(6)	-0.000(4)	0.006(4)	-0.012(5)
C(1d)	0.06(2)	0.05(2)	0.02(2)	-0.03(2)	0.00(2)	-0.02(2)
N(1d)	0.05(2)	0.05(2)	0.05(2)	-0.03(2)	-0.00(2)	0.01(2)
N(2d)	0.07(2)	0.03(2)	0.03(2)	-0.02(2)	0.00(2)	-0.02(2)
C(2d)	0.06(3)	0.09(3)	0.07(3)	-0.00(3)	0.01(2)	0.02(3)
C(3d)	0.03(2)	0.07(3)	0.07(3)	0.01(2)	0.01(2)	-0.02(3)
C(4d)	0.10(4)	0.09(4)	0.10(4)	0.03(3)	-0.02(3)	-0.02(3)
C(5d)	0.02(2)	0.20(6)	0.13(5)	0.00(3)	-0.00(3)	-0.03(5)
C(6d)	0.06(3)	0.10(3)	0.12(4)	-0.02(3)	-0.04(3)	0.04(3)
C(7d)	0.04(2)	0.10(3)	0.01(2)	-0.00(2)	0.01(2)	-0.03(2)
S(1e)	0.054(6)	0.060(6)	0.053(7)	0.006(5)	-0.008(5)	-0.014(6)
C(1e)	0.02(2)	0.09(3)	0.01(3)	0.02(2)	0.01(2)	-0.00(3)
N(1e)	0.03(2)	0.08(3)	0.02(2)	0.01(2)	0.02(2)	-0.02(2)
N(2e)	0.04(2)	0.11(3)	0.08(3)	-0.00(2)	0.01(2)	-0.04(3)
C(2e)	0.05(2)	0.05(3)	0.09(5)	0.01(2)	-0.04(3)	-0.04(4)
C(3e)	0.05(3)	0.08(3)	0.20(7)	0.02(3)	-0.01(3)	0.03(5)
C(4e)	0.05(3)	0.07(4)	0.27(8)	0.02(3)	-0.04(4)	-0.09(5)
C(5e)	0.17(7)	0.4(2)	0.3(1)	-0.2(1)	-0.11(7)	0.1(1)
C(6e)	0.08(4)	0.26(9)	0.16(7)	-0.09(5)	-0.03(4)	0.16(7)
C(7e)	0.04(2)	0.11(5)	0.07(4)	-0.02(3)	-0.01(3)	-0.04(4)
Cu(3)	0.040(2)	0.054(3)	0.051(3)	-0.007(2)	0.001(2)	0.001(3)
Cu(4)	0.053(3)	0.056(3)	0.053(3)	-0.016(2)	-0.000(2)	-0.005(3)
S(1f)	0.055(6)	0.055(6)	0.066(8)	-0.004(5)	0.019(5)	0.000(6)
C(1f)	0.03(2)	0.06(3)	0.07(4)	-0.02(2)	0.04(2)	-0.06(3)

ตารางที่ 5 (ต่อ)

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
N(1f)	0.05(2)	0.08(2)	0.02(2)	-0.04(2)	-0.00(2)	0.01(2)
N(2f)	0.04(2)	0.13(3)	0.05(3)	-0.03(2)	0.02(2)	0.03(3)
C(2f)	0.02(2)	0.05(3)	0.12(5)	-0.00(2)	-0.01(3)	0.04(4)
C(3f)	0.06(3)	0.05(3)	0.14(5)	-0.01(2)	-0.00(3)	-0.01(3)
C(4f)	0.06(2)	0.04(3)	0.10(4)	-0.02(2)	-0.02(3)	0.01(3)
C(5f)	0.10(3)	0.10(4)	0.06(4)	-0.03(3)	-0.04(3)	0.03(4)
C(6f)	0.05(2)	0.06(3)	0.06(3)	-0.01(2)	0.01(2)	0.04(3)
C(7f)	0.03(2)	0.07(4)	0.07(4)	-0.02(2)	-0.02(2)	0.01(3)
S(1g)	0.054(6)	0.037(5)	0.072(8)	-0.003(4)	-0.013(5)	-0.002(6)
C(1g)	0.04(2)	0.03(2)	0.04(3)	0.00(2)	0.02(2)	-0.02(3)
N(1g)	0.05(2)	0.02(2)	0.08(3)	-0.01(1)	0.01(2)	-0.02(2)
N(2g)	0.03(2)	0.04(2)	0.01(2)	0.00(1)	0.02(2)	-0.01(2)
C(2g)	0.01(2)	0.10(4)	0.04(3)	0.01(2)	0.01(2)	0.01(3)
C(3g)	0.05(2)	0.01(2)	0.24(6)	0.01(2)	0.00(3)	0.04(3)
C(4g)	0.04(2)	0.10(4)	0.22(7)	-0.03(2)	-0.02(3)	0.14(5)
C(5g)	0.12(4)	0.09(3)	0.20(7)	-0.03(3)	-0.05(4)	0.06(4)
C(6g)	0.14(4)	0.05(3)	0.05(3)	-0.01(3)	-0.03(3)	-0.02(3)
C(7g)	0.02(2)	0.08(3)	0.09(5)	-0.01(2)	0.00(3)	-0.06(4)
S(1h)	0.049(6)	0.053(6)	0.036(8)	0.003(5)	0.012(6)	-0.021(7)
C(1h)	0.04(2)	0.03(3)	0.11(4)	-0.00(2)	-0.00(2)	0.06(3)
N(1h)	0.05(2)	0.05(2)	0.02(3)	-0.00(2)	0.01(2)	-0.03(2)
N(2h)	0.06(2)	0.04(3)	0.02(2)	-0.01(2)	-0.00(2)	-0.03(3)
C(2h)	0.01(2)	0.09(4)	0.06(4)	-0.02(2)	0.02(2)	-0.01(3)
C(3h)	0.06(2)	0.08(3)	0.05(4)	0.00(2)	0.02(2)	-0.06(3)
C(4h)	0.09(3)	0.11(4)	0.06(4)	0.01(3)	0.00(3)	-0.08(4)
C(5h)	0.04(2)	0.09(4)	0.10(5)	-0.00(3)	0.01(3)	-0.10(4)
C(6h)	0.02(2)	0.25(7)	0.06(4)	-0.05(3)	0.02(2)	-0.03(5)
C(7h)	0.04(2)	0.03(3)	0.11(6)	0.00(2)	-0.01(4)	-0.05(5)

ตารางที่ 5 (ต่อ)

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
S(1i)	0.037(5)	0.049(6)	0.047(7)	-0.007(4)	0.007(5)	-0.016(5)
C(1i)	0.07(3)	0.06(3)	0.04(3)	-0.02(2)	-0.01(2)	-0.04(3)
N(1i)	0.07(2)	0.06(2)	0.08(3)	-0.04(2)	-0.01(2)	-0.02(2)
N(2i)	0.07(2)	0.06(2)	0.03(2)	-0.02(2)	0.00(2)	-0.02(2)
C(2i)	0.06(3)	0.08(3)	0.05(3)	-0.01(3)	-0.00(3)	-0.07(3)
C(3i)	0.05(2)	0.09(3)	0.08(4)	0.03(3)	-0.02(3)	-0.04(3)
C(4i)	0.05(4)	0.16(5)	0.09(4)	-0.01(3)	-0.04(3)	0.00(4)
C(5i)	0.05(3)	0.23(7)	0.03(3)	-0.06(4)	0.04(3)	-0.03(4)
C(6i)	0.05(2)	0.15(4)	0.03(3)	-0.05(3)	0.03(2)	-0.03(3)
C(7i)	0.04(3)	0.12(4)	0.04(3)	0.01(3)	0.01(2)	-0.06(3)
S(1j)	0.051(6)	0.073(7)	0.058(7)	-0.009(5)	-0.009(5)	-0.010(6)
C(1j)	0.01(2)	0.10(4)	0.12(5)	-0.02(2)	-0.02(3)	-0.03(4)
N(1j)	0.08(2)	0.12(3)	0.02(2)	-0.03(2)	-0.02(2)	-0.01(3)
N(2j)	0.08(2)	0.05(2)	0.06(3)	0.00(2)	-0.01(2)	-0.05(2)
C(2j)	0.02(2)	0.12(4)	0.07(5)	0.03(3)	-0.03(2)	-0.06(4)
C(3j)	0.06(3)	0.08(3)	0.07(4)	0.01(2)	-0.00(2)	-0.07(4)
C(4j)	0.07(3)	0.05(3)	0.25(8)	0.01(3)	-0.07(5)	-0.09(5)
C(5j)	0.18(6)	0.24(9)	0.15(7)	0.03(5)	-0.09(6)	-0.11(6)
C(6j)	0.04(2)	0.15(4)	0.11(4)	-0.04(3)	-0.01(2)	0.07(4)
C(7j)	0.06(2)	0.08(4)	0.04(3)	-0.02(3)	-0.00(2)	-0.00(3)

ตารางที่ 6 ความยาวพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2Br]$

พันธะ	มุมพันธะ (^{o})
Cu(1)-S(2)	2.2189(15)
Cu(1)-S(1)	2.2463(13)
Cu(1)-Br(1)	2.4345(8)
S(1)-C(1)	1.688(5)
S(2)-C(8)	1.691(5)
N(1)-C(1)	1.357(5)
N(1)-C(2)	1.389(5)
N(2)-C(1)	1.343(5)
N(2)-C(7)	1.378(5)
N(3)-C(8)	1.356(5)
N(3)-C(9)	1.383(5)
N(4)-C(8)	1.333(5)
N(4)-C(14)	1.385(5)
C(2)-C(3)	1.372(6)
C(2)-C(7)	1.388(6)
C(3)-C(4)	1.379(7)
C(3)-H(3A)	0.9300
C(4)-C(5)	1.386(7)
C(4)-H(4A)	0.9300
C(5)-C(6)	1.368(6)
C(5)-H(5)	0.9300
C(6)-C(7)	1.386(6)
C(6)-H(6)	0.9300
C(9)-C(10)	1.383(6)
C(9)-C(14)	1.386(6)
C(10)-C(11)	1.368(7)
C(10)-H(10)	0.9300
C(11)-C(12)	1.378(7)

ตารางที่ 6 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(11)-H(11)	0.9300
C(12)-C(13)	1.372(6)
C(12)-H(12)	0.9300
C(13)-C(14)	1.372(6)
C(13)-H(13)	0.9300

ตารางที่ 7 มุมพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2Br]$

พันธะ	มุมพันธะ ($^{\circ}$)
S(2)-Cu(1)-S(1)	119.58(5)
S(2)-Cu(1)-Br(1)	121.08(4)
S(1)-Cu(1)-Br(1)	118.74(4)
C(1)-S(1)-Cu(1)	108.46(15)
C(8)-S(2)-Cu(1)	108.61(16)
C(1)-N(1)-C(2)	111.0(3)
C(1)-N(1)-H(1)	124.5
C(2)-N(1)-H(1)	124.5
C(1)-N(2)-C(7)	110.8(3)
C(1)-N(2)-H(2)	124.6
C(7)-N(2)-H(2)	124.6
C(8)-N(3)-C(9)	110.7(4)
C(8)-N(3)-H(3)	124.6
C(9)-N(3)-H(3)	124.6
C(8)-N(4)-C(14)	111.2(3)
C(8)-N(4)-H(4)	124.4
C(14)-N(4)-H(4)	124.4
N(2)-C(1)-N(1)	106.0(4)
N(2)-C(1)-S(1)	127.9(3)
N(1)-C(1)-S(1)	126.1(3)
C(3)-C(2)-C(7)	122.0(4)
C(3)-C(2)-N(1)	132.8(4)
C(7)-C(2)-N(1)	105.2(4)
C(2)-C(3)-C(4)	116.6(4)

ตารางที่ 7 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(2)-C(3)-H(3A)	121.7
C(4)-C(3)-H(3A)	121.7
C(3)-C(4)-C(5)	121.6(5)
C(3)-C(4)-H(4A)	119.2
C(5)-C(4)-H(4A)	119.2
C(6)-C(5)-C(4)	121.9(5)
C(6)-C(5)-H(5)	119.0
C(4)-C(5)-H(5)	119.0
C(5)-C(6)-C(7)	116.7(4)
C(5)-C(6)-H(6)	121.6
C(7)-C(6)-H(6)	121.6
N(2)-C(7)-C(6)	131.8(4)
N(2)-C(7)-C(2)	107.0(4)
C(6)-C(7)-C(2)	121.2(4)
N(4)-C(8)-N(3)	106.1(4)
N(4)-C(8)-S(2)	128.4(3)
N(3)-C(8)-S(2)	125.5(3)
N(3)-C(9)-C(10)	133.0(4)
N(3)-C(9)-C(14)	105.8(4)
C(10)-C(9)-C(14)	121.2(4)
C(11)-C(10)-C(9)	117.0(4)
C(11)-C(10)-H(10)	121.5
C(9)-C(10)-H(10)	121.5
C(10)-C(11)-C(12)	121.7(5)
C(10)-C(11)-H(11)	119.1
C(12)-C(11)-H(11)	119.1
C(13)-C(12)-C(11)	121.5(5)
C(13)-C(12)-H(12)	119.3

ตารางที่ 7 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (^{o})
C(11)-C(12)-H(12)	119.3
C(14)-C(13)-C(12)	117.4(4)
C(14)-C(13)-H(13)	121.3
C(12)-C(13)-H(13)	121.3
C(13)-C(14)-N(4)	132.6(4)
C(13)-C(14)-C(9)	121.2(4)
N(4)-C(14)-C(9)	106.2(4)

ตารางที่ 8 พิกัดของอะตอม (ยกในเว้นไฮโดรเจน) ในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2Br]$

อะตอม	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	3589(2)	3473(1)	4656(1)	57(1)
S(1)	5237(3)	4205(1)	5011(1)	49(1)
S(2)	1421(4)	3056(1)	5826(1)	69(1)
Br(1)	3508(1)	3195(1)	2921(1)	47(1)
N(1)	7886(8)	4864(1)	3873(3)	42(1)
N(2)	7888(8)	4178(1)	3211(3)	41(1)
N(3)	-1803(10)	2233(1)	5753(3)	51(1)
N(4)	-683(9)	2468(1)	4289(3)	44(1)
C(1)	7004(10)	4415(1)	4012(3)	39(1)
C(2)	9318(10)	4914(1)	2976(3)	40(1)
C(3)	10528(12)	5292(2)	2505(4)	54(1)
C(4)	11756(12)	5209(2)	1593(4)	60(1)
C(5)	11745(11)	4767(2)	1173(4)	57(1)
C(6)	10515(11)	4390(2)	1638(4)	52(1)
C(7)	9299(10)	4471(1)	2558(3)	40(1)
C(8)	-347(11)	2579(2)	5269(3)	45(1)
C(9)	-3154(10)	1908(1)	5068(3)	40(1)
C(10)	-4927(12)	1507(2)	5174(4)	52(1)
C(11)	-5956(12)	1270(2)	4307(4)	57(1)
C(12)	-5244(13)	1422(2)	3370(4)	62(1)
C(13)	-3464(13)	1818(2)	3261(4)	61(1)
C(14)	-2427(10)	2059(2)	4124(3)	41(1)

ตารางที่ 9 พิกัดของไฮโดรเจนในโมเลกุล [$Cu(bimztH_2)_2Br$]

	x	y	z	U(eq)
H(1)	7597	5088	4285	51
H(2)	7611	3884	3118	49
H(3)	-1877	2218	6397	62
H(4)	84	2629	3821	53
H(3A)	10522	5588	2785	65
H(4A)	12612	5455	1251	72
H(5)	12597	4725	556	68
H(6)	10496	4094	1350	63
H(10)	-5399	1402	5806	63
H(11)	-7167	1000	4352	68
H(12)	-5987	1252	2797	74
H(13)	-2980	1919	2627	73

ตารางที่ 10 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2Br]$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	74(1)	40(1)	58(1)	-4(1)	19(1)	-4(1)
S(1)	63(1)	38(1)	47(1)	-7(1)	12(1)	2(1)
S(2)	101(1)	58(1)	50(1)	-12(1)	24(1)	-21(1)
Br(1)	58(1)	42(1)	43(1)	-1(1)	11(1)	-7(1)
N(1)	49(2)	30(2)	47(2)	-7(2)	1(2)	5(2)
N(2)	49(2)	29(2)	46(2)	-7(2)	10(2)	1(2)
N(3)	74(3)	45(2)	38(2)	4(2)	19(2)	-2(2)
N(4)	55(2)	44(2)	35(2)	9(2)	6(2)	-4(2)
C(1)	35(2)	34(2)	48(3)	-6(2)	-5(2)	9(2)
C(2)	40(2)	36(2)	44(3)	-2(2)	-3(2)	4(2)
C(3)	61(3)	35(2)	63(3)	4(2)	-6(3)	-2(2)
C(4)	58(3)	60(3)	62(3)	16(3)	3(3)	-9(3)
C(5)	49(3)	67(3)	55(3)	0(3)	10(2)	1(2)
C(6)	52(3)	49(3)	57(3)	-6(2)	9(2)	4(2)
C(7)	35(2)	39(2)	46(3)	-3(2)	1(2)	2(2)
C(8)	53(3)	41(2)	44(3)	6(2)	11(2)	8(2)
C(9)	42(2)	38(2)	40(2)	6(2)	13(2)	7(2)
C(10)	61(3)	47(3)	53(3)	11(2)	26(2)	0(2)
C(11)	60(3)	39(3)	71(4)	5(2)	12(3)	-3(2)
C(12)	73(3)	54(3)	57(3)	1(3)	-3(3)	-11(3)
C(13)	79(4)	61(3)	41(3)	8(2)	1(2)	-11(3)
C(14)	43(2)	41(2)	39(2)	5(2)	6(2)	4(2)

ตารางที่ 11 ความยาวพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2I]\cdot CH_3COOH$

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
Cu(1)-S(2)	2.2426(12)
Cu(1)-S(1)	2.2601(16)
Cu(1)-I(1)	2.5480(7)
S(1)-C(1)	1.695(4)
S(2)-C(8)	1.689(4)
N(1)-C(1)	1.343(6)
N(1)-C(2)	1.383(5)
N(2)-C(1)	1.338(5)
N(2)-C(3)	1.390(6)
N(3)-C(8)	1.346(5)
N(3)-C(10)	1.386(5)
N(4)-C(8)	1.341(5)
N(4)-C(9)	1.374(6)
C(2)-C(3)	1.385(6)
C(2)-C(7)	1.388(6)
C(3)-C(4)	1.380(6)
C(4)-C(5)	1.374(7)
C(4)-H(4)	0.80(5)
C(5)-C(6)	1.378(7)
C(5)-H(5)	0.93(5)
C(6)-C(7)	1.368(7)
C(6)-H(6)	0.95(5)
C(7)-H(7)	0.96(5)
C(9)-C(14)	1.385(6)
C(9)-C(10)	1.388(6)
C(10)-C(11)	1.380(6)
C(11)-C(12)	1.383(7)

ตารางที่ 11 (ต่อ)

พันธะ	ความยาวพันธะ (Å)
C(11)-H(11)	0.89(5)
C(12)-C(13)	1.387(7)
C(12)-H(12)	0.94(5)
C(13)-C(14)	1.370(7)
C(13)-H(13)	0.97(5)
C(14)-H(14)	0.85(4)
C(15)-C(16)	1.477(7)
C(15)-H(15A)	0.9600
C(15)-H(15B)	0.9600
C(15)-H(15C)	0.9600
C(16)-O(1)	1.210(6)
C(16)-C(17)	1.484(7)
C(17)-H(17A)	0.9600
C(17)-H(17B)	0.9600
C(17)-H(17C)	0.9600

ตารางที่ 12 มุมพันธะระหว่างอะตอมในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2I]\cdot CH_3COOH$

พันธะ	มุมพันธะ ($^{\circ}$)
S(2)-Cu(1)-S(1)	107.10(5)
S(2)-Cu(1)-I(1)	127.29(4)
S(1)-Cu(1)-I(1)	119.97(5)
C(1)-S(1)-Cu(1)	109.93(17)
C(8)-S(2)-Cu(1)	106.63(14)
C(1)-N(1)-C(2)	110.5(4)
C(1)-N(1)-H(1A)	124(3)
C(2)-N(1)-H(1A)	126(3)
C(1)-N(2)-C(3)	110.4(4)
C(1)-N(2)-H(2A)	122(4)
C(3)-N(2)-H(2A)	128(4)
C(8)-N(3)-C(10)	110.6(4)
C(8)-N(3)-H(3A)	122(4)
C(10)-N(3)-H(3A)	128(4)
C(8)-N(4)-C(9)	111.1(4)
C(8)-N(4)-H(4A)	122(4)
C(9)-N(4)-H(4A)	126(4)
N(2)-C(1)-N(1)	106.9(4)
N(2)-C(1)-S(1)	127.3(4)
N(1)-C(1)-S(1)	125.8(3)
N(1)-C(2)-C(3)	106.2(4)
N(1)-C(2)-C(7)	132.0(4)
C(3)-C(2)-C(7)	121.8(4)
C(4)-C(3)-C(2)	121.0(4)

ตารางที่ 12 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (°)
C(4)-C(3)-N(2)	133.0(4)
C(2)-C(3)-N(2)	106.0(4)
C(5)-C(4)-C(3)	117.1(5)
C(5)-C(4)-H(4)	122(3)
C(3)-C(4)-H(4)	121(3)
C(4)-C(5)-C(6)	121.6(5)
C(4)-C(5)-H(5)	118(3)
C(6)-C(5)-H(5)	121(3)
C(7)-C(6)-C(5)	122.2(5)
C(7)-C(6)-H(6)	121(3)
C(5)-C(6)-H(6)	117(3)
C(6)-C(7)-C(2)	116.3(5)
C(6)-C(7)-H(7)	123(3)
C(2)-C(7)-H(7)	121(3)
N(4)-C(8)-N(3)	106.3(4)
N(4)-C(8)-S(2)	125.3(3)
N(3)-C(8)-S(2)	128.4(3)
N(4)-C(9)-C(14)	132.7(4)
N(4)-C(9)-C(10)	106.2(4)
C(14)-C(9)-C(10)	121.1(4)
C(11)-C(10)-N(3)	132.7(4)
C(11)-C(10)-C(9)	121.5(4)
N(3)-C(10)-C(9)	105.8(4)
C(10)-C(11)-C(12)	116.9(4)
C(10)-C(11)-H(11)	119(3)
C(12)-C(11)-H(11)	124(3)
C(11)-C(12)-C(13)	121.8(5)
C(11)-C(12)-H(12)	119(3)

ตารางที่ 12 (ต่อ)

พันธะ	มุมพันธะ (^{o})
C(13)-C(12)-H(12)	119(3)
C(14)-C(13)-C(12)	121.1(5)
C(14)-C(13)-H(13)	120(3)
C(12)-C(13)-H(13)	119(3)
C(13)-C(14)-C(9)	117.6(5)
C(13)-C(14)-H(14)	125(3)
C(9)-C(14)-H(14)	117(3)
C(16)-C(15)-H(15A)	109.5
C(16)-C(15)-H(15B)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
C(16)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5
H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5
O(1)-C(16)-C(15)	122.0(5)
O(1)-C(16)-C(17)	120.2(5)
C(15)-C(16)-C(17)	117.8(5)
C(16)-C(17)-H(17A)	109.5
C(16)-C(17)-H(17B)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(16)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5

ตารางที่ 13 พิกัดของอะตอม(ยกเว้นไฮโดรเจน)ในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2I]\cdot CH_3COOH$

อะตอม	x	y	z	U(eq)
Cu(1)	2324(2)	5721(1)	6356(1)	79(1)
I(1)	3497(1)	6837(1)	6508(1)	61(1)
S(1)	-1757(4)	5430(1)	5717(1)	83(1)
S(2)	3443(3)	4975(1)	7075(1)	51(1)
N(1)	-4359(10)	5836(2)	4556(2)	56(1)
N(2)	-1239(10)	6467(2)	5025(2)	55(1)
N(3)	7526(8)	5774(2)	7633(2)	45(1)
N(4)	6957(9)	4979(2)	8211(2)	49(1)
C(1)	-2440(11)	5922(2)	5087(2)	54(1)
C(2)	-4427(10)	6335(2)	4150(2)	48(1)
C(3)	-2432(10)	6743(2)	4451(2)	47(1)
C(4)	-1909(12)	7290(2)	4160(3)	56(1)
C(5)	-3475(12)	7411(2)	3568(2)	59(1)
C(6)	-5489(12)	7006(2)	3277(2)	60(1)
C(7)	-6022(12)	6460(2)	3554(2)	57(1)
C(8)	6018(9)	5252(2)	7645(2)	44(1)
C(9)	9045(9)	5323(2)	8569(2)	45(1)
C(10)	9437(9)	5836(2)	8197(2)	44(1)
C(11)	11416(10)	6281(2)	8414(2)	54(1)
C(12)	12957(11)	6195(2)	9022(3)	62(1)
C(13)	12558(11)	5685(2)	9395(2)	61(1)
C(14)	10613(11)	5241(2)	9175(2)	55(1)
C(15)	1355(14)	3470(3)	8136(3)	79(2)
C(16)	2888(11)	3586(2)	8792(2)	55(1)
C(17)	1979(14)	3226(3)	9354(3)	79(2)
O(1)	4839(9)	3959(2)	8877(2)	79(1)

ตารางที่ 14 พิกัดของไฮโดรเจนในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2I]\cdot CH_3COOH$

อะตอม	x	y	z	U(eq)
H(15A)	1990	3759	7828	118
H(15B)	-753	3502	8160	118
H(15C)	1832	3071	7995	118
H(17A)	3532	3235	9705	118
H(17B)	1621	2818	9216	118
H(17C)	195	3393	9504	118
H(1A)	-5330(100)	5550(20)	4500(20)	50(13)
H(2A)	-80(120)	6610(20)	5310(30)	67(16)
H(3A)	7340(100)	5990(20)	7340(20)	50(14)
H(4A)	6340(100)	4730(20)	8310(20)	44(14)
H(4)	-680(100)	7510(20)	4320(20)	48(13)
H(5)	-3060(110)	7770(20)	3360(20)	66(14)
H(6)	-6500(110)	7120(20)	2870(20)	64(14)
H(7)	-7410(110)	6180(20)	3360(20)	67(15)
H(11)	11680(100)	6590(20)	8150(20)	59(14)
H(12)	14320(100)	6490(20)	9190(20)	56(13)
H(13)	13700(110)	5650(20)	9820(20)	66(14)
H(14)	10330(90)	4910(20)	9370(20)	42(11)

ตารางที่ 15 เทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอมในโมเลกุล $[Cu(bimztH_2)_2I]\cdot CH_3COOH$

อะตอม	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Cu(1)	137(1)	46(1)	48(1)	5(1)	-21(1)	-17(1)
I(1)	59(1)	39(1)	81(1)	2(1)	-11(1)	-1(1)
S(1)	144(1)	47(1)	53(1)	14(1)	-28(1)	-36(1)
S(2)	62(1)	40(1)	51(1)	1(1)	3(1)	-4(1)
N(1)	78(3)	37(2)	50(2)	0(2)	-4(2)	-12(2)
N(2)	77(3)	40(2)	44(2)	1(2)	-3(2)	-11(2)
N(3)	49(2)	39(2)	49(2)	7(2)	5(2)	-1(2)
N(4)	59(2)	38(2)	51(2)	8(2)	10(2)	-4(2)
C(1)	81(3)	39(2)	41(2)	1(2)	1(2)	-9(2)
C(2)	64(3)	37(2)	43(2)	-3(2)	10(2)	3(2)
C(3)	61(3)	39(2)	43(2)	0(2)	12(2)	3(2)
C(4)	65(3)	41(2)	64(3)	4(2)	13(2)	-6(2)
C(5)	76(3)	45(2)	57(3)	15(2)	18(2)	11(2)
C(6)	78(3)	53(3)	49(3)	7(2)	6(2)	17(2)
C(7)	71(3)	49(3)	51(3)	-5(2)	-2(2)	9(2)
C(8)	45(2)	39(2)	49(2)	3(2)	13(2)	6(2)
C(9)	45(2)	42(2)	50(2)	1(2)	10(2)	2(2)
C(10)	43(2)	42(2)	47(2)	1(2)	10(2)	5(2)
C(11)	55(3)	47(2)	59(3)	5(2)	10(2)	-3(2)
C(12)	57(3)	63(3)	64(3)	-8(2)	5(2)	-10(2)
C(13)	59(3)	75(3)	50(3)	0(2)	3(2)	1(2)
C(14)	63(3)	55(3)	49(3)	9(2)	10(2)	2(2)
C(15)	86(4)	85(4)	65(3)	-2(3)	6(3)	-7(3)
C(16)	63(3)	45(2)	57(3)	5(2)	6(2)	0(2)
C(17)	96(4)	73(4)	66(3)	6(3)	7(3)	-27(3)
O(1)	93(3)	64(2)	77(2)	16(2)	-2(2)	-29(2)

2. การหาความหนาแน่นของผลึก

การหาความหนาแน่นของผลึกสารประกอบเชิงซ้อนที่สังเคราะห์ได้ หาโดยวิธีการลอย (floation) ในสารละลายโพแตสเซียมไอโอไดด์ ที่ความเข้มข้นต่าง ๆ ซึ่งมีขั้นตอนดังนี้

1.2.1 นำขวดวัดความหนาแน่นขนาด 5 มิลลิลิตร ที่แห้ง มาชั่ง บันทึกน้ำหนัก (W_0)

1.2.2 นำผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนขนาดที่เหมาะสมใส่ลงไปในสารละลายโพแตสเซียมไอโอไดด์ ให้ผลึกลอยอยู่ประมาณกึ่งกลางสารละลาย โดยการปรับความเข้มข้นของสารละลายโพแตสเซียมไอโอไดด์ให้เหมาะสมซึ่งเป็นภาวะที่ความหนาแน่นของผลึกเท่ากับความหนาแน่นของสารละลาย

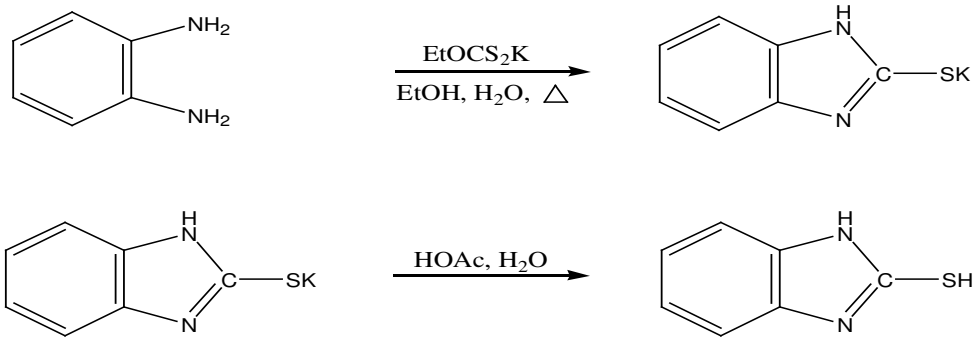
1.2.3 นำสารละลายโพแตสเซียมไอโอไดด์ในข้อ 1.2.2 ไปหาความหนาแน่น โดยใส่สารละลายโพแตสเซียมไอโอไดด์ลงไปในขวดวัดความหนาแน่นขนาด 5 มิลลิลิตร ในข้อ 1.2.1 แล้วนำไปชั่ง บันทึกน้ำหนัก (W_1)

1.2.4 คำนวณความหนาแน่นของสารละลายโพแตสเซียมไอโอไดด์ (D_{sol}) จากความสัมพันธ์

$$D_{sol} = (W_1 - W_0) / 5$$

3. การเตรียมลิแกนด์ bimztH_2

bimztH_2 เตรียมได้จากปฏิกิริยาเริ่มต้นระหว่าง o-phenylenediamine จำนวน 32.4 กรัม (0.3 โมล) กับ potassium ethyl xanthate จำนวน 52.8 กรัม (0.33 โมล) ในตัวทำละลายผสมระหว่างเอทานอล (300 มิลลิลิตร) กับน้ำ (45 มิลลิตร) ในขวดรูปกรวยขนาด 1 ลิตร จากนั้นนำไปรีฟลักซ์ เป็นเวลา 3 ชั่วโมง เติม norit (12 กรัม) โดยให้ความร้อนต่อไปเป็นเวลา 10 นาที แยก norit ออกโดยการกรอง และนำของเหลวที่ผ่านการกรองแล้วไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 60 - 70 ^{o}C เติมน้ำอุ่น (60 - 70 ^{o}C) จำนวน 300 มิลลิตร จากนั้นเติมสารละลายของกรดแอซีติก 25 มิลลิตรในน้ำ 50 มิลลิตร พร้อมทั้งทำการคนตลอดเวลา เมื่อกรองและตั้งทิ้งไว้ที่อุณหภูมิห้องจะได้ผลึกสีขาว แต่เมื่อนำไปตั้งทิ้งไว้ในตู้เย็น เป็นเวลา 3 ชั่วโมง พบว่าได้ผลึกที่สมบูรณ์กว่า โดยมีจุดหลอมเหลวที่อุณหภูมิ 300 - 304 ^{o}C ดังสมการ (Vanallan and Deacon, 1971)



ภาคผนวก ข

การสังเคราะห์และศึกษาลักษณะของสารประกอบเชิงซ้อนของ บิส(2-เมอร์แคปโตเบนซิมิดาโซล)โบรโม-และไอโอโดคอปเปอร์(I)

SYNTHESIS AND CHARACTERISATION OF BIS(2-MERCAPTOBENZIMIDAZOLE)BROMO- AND IODOCOPPER(I) COMPLEXES

ศิริวรรณ วตะภรณ์*, วีณา เอมเอก ทัพไชย, เชวง ภควัตชัย, ยุพา ธัญญะศิริกุล, และเสาวนิต ทรายทอง

Siriwan Vataporn*, Weena Aemaeg Tubchai, Chaveng Pakawatchai, Yupa Thunyasirikul, and Saowanit Saithong

Department of Chemistry, Faculty of Science, Prince of Songkla University, Songkla 90110, Thailand.

E-mail address: tikky24@hotmail.com

บทคัดย่อ: งานวิจัยนี้เป็นการสังเคราะห์และศึกษาลักษณะของสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(C_7H_6N_2S)_2Br]$ และ $[Cu(C_7H_6N_2S)_2I]\cdot CH_3COCH_3$ โดยเตรียมจากปฏิกิริยาระหว่างเกลือคอปเปอร์(I) โบรไมด์และไอโอไดด์ กับ 2-เมอร์แคปโตเบนซิมิดาโซล จากการศึกษาโดยเทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว สารประกอบเชิงซ้อนคอปเปอร์(I) ที่สังเคราะห์ได้อยู่ในระบบมอโนคลินิก หมู่ปริภูมิ $P2_1/c$ (No.14) มีความยาว a = 4.1549(4), b = 28.708(3), c = 13.2735(13) Å ค่าดัชนีความเชื่อถือ (*R*) เท่ากับ 0.0466 สำหรับสารประกอบเชิงซ้อนของเกลือโบรไมด์ และ a = 4.5154(3), b = 22.2157(15), c = 20.4062(14) Å ค่าดัชนีความเชื่อถือ (*R*) เท่ากับ 0.0414 สำหรับสารประกอบเชิงซ้อนของเกลือไอโอไดด์ตามลำดับ

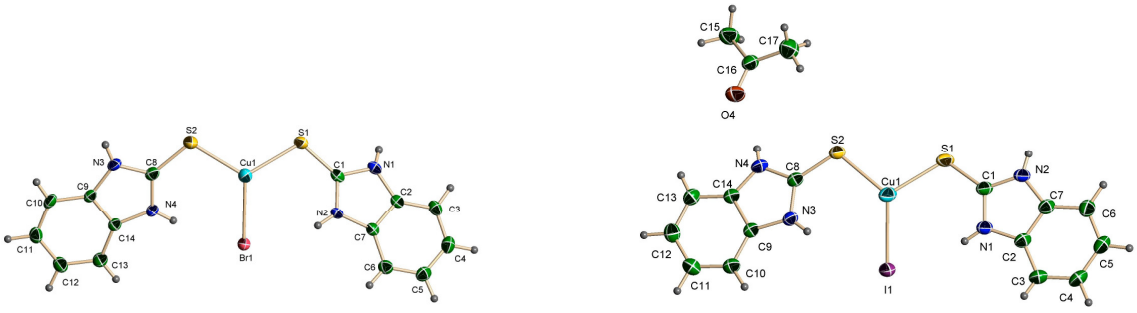
Abstract: The complexes of $[Cu(C_7H_6N_2S)_2Br]$ and $[Cu(C_7H_6N_2S)_2I]\cdot CH_3COCH_3$ were prepared by the reaction of copper(I) bromide/copper(I) iodide with 2-mercaptobenzimidazole in suitable condition. The crystal structures have been determined by single crystal X-ray diffraction method. The complexes crystallize in monoclinic space group $P2_1/c$ (No.14) with cell parameters a = 4.1549(4), b = 28.708 (3), c = 3.2735(13) Å R = 0.0466 for the complex of copper(I) bromide and a = 4.5154(3), b = 22.2157(15), c = 20.4062(14) Å R = 0.0414 for the complex of copper (I) iodide, respectively.

Introduction: The coordination compounds of copper(I) with heterocyclic thione as ligand are interesting because of the variety of their structures. 2-mercaptobenzimidazole contains sulphur and nitrogen atoms and this ligand is a soft donor ligand. Copper(I) is a soft acceptor, therefore, it is well coordinated with soft donor. In this work, we report the preparation, X-ray structural analyses, FT-IR and ^{13}C NMR spectroscopic study of new complexes of copper(I) with 2-mercaptobenzimidazole.

Methodology: The complexes were prepared in suitable condition. Slow evaporation of the solvent in air afforded colorless needle-shaped crystals. Then, the crystals of each complex were selected and characterized by single crystal diffraction technique, IR and ^{13}C NMR spectroscopic. The cell parameters were determined and the diffraction data were collected using Bruker SMART APEX CCD diffractometer. The structures were solved by direct method and refined by using SHELXTL NT

(Version 6.14) crystallographic program. The infrared spectra were recoded in solid phase (KBr pellet) using a Perkin Elmer 783 FT-IR spectrometer, whereas the ^{13}C NMR spectra were measured using a Varian Unity Inova FT-NMR operating at 500 MHz in $CDCl_3$ solution with TMS as an internal standard.

Results, Discussion and Conclusion: All of complexes are monomeric structures with the copper atom is trigonal-planar coordinated by two 2-mercaptobenzimidazole molecules and one halide atom. However, the complex of $[Cu(C_7H_6N_2S)_2I]\cdot CH_3COCH_3$ shows the acetone molecules in crystal. Furthermore, the complexes have been investigated by infrared spectroscopy. The ν(C=S) vibration found in the free ligand at approximately 744 cm^{-1}, while ν(C=S) of both complexes appear at 733 and 735 cm^{-1} for complexes of copper(I) bromide and iodide respectively, exhibit a slight shift around 9-11 cm^{-1} to a lower wave number. This is due to the sulphur bonded with copper and it can be indicated the weaker C=S bond in complexes. In addition, two complexes have been characterized by ^{13}C NMR spectroscopy. An upfield shift is observed in the C=S resonance of 2-mercaptobenzimizole on its complexation with copper(I). The upfield shift is attributed to a lowering of C=S bond order upon coordination. The structures of $[Cu(C_7H_6N_2S)_2Br]$ and $[Cu(C_7H_6N_2S)_2I]\cdot CH_3COCH_3$ are shown in Figure 1a and 1b, respectively.



(1a) (1b)

Figure 1 The structures of $[Cu(C_7H_6N_2S)_2Br]$ (1a) and $[Cu(C_7H_6N_2S)_2I]\cdot CH_3COCH_3$ (1b).

Acknowledgment: The authors would like to thank Department of Chemistry, Faculty of Science and Graduate School, Prince of Songkla University for the scholarship.

References:

(1) Joseph Jolley (2001) *Inorganica Chimica Acta*, **315**, 36 – 43.

(2) Anvarhusein A. Isab (2003) *Polyhedron*, **22**, 1329-1354.

Keywords: mercaptobenzimidazole, copper(I) complex, crystal structure