4. สรุปผลการทดลอง

ในงานวิจัยครั้งนี้เป็นการเตรียมผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนของคอปเปอร์(I)เฮไลด์ กับลิแกนด์ $bimztH_2$ จากการทดลองพบว่าสามารถเตรียมสารประกอบเชิงซ้อนได้ 3 ชนิด ได้แก่ $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]Cl_4 \cdot 10H_2O$, $[Cu(bimztH_2)_2Br]$ และ $[Cu(bimztH_2)_2I] \cdot CH_3COCH_3$ พร้อมทั้งสามารถสรุปสูตรและโครงสร้างทางเคมี โดยวิธีการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว พบว่าสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]Cl_4 \cdot 10H_2O$ ตกผลึกอยู่ในระบบไทรคลินิก หมู่ปริภูมิ $P\bar{1}$ (No.2) มี
แคตไอออน $[Cu_4(bimztH_2)_{10}]^{4+}$ จำนวน 2 โมเลกุลในหนึ่งหน่วยเซลล์ โดยแต่ละโมเลกุลมีศูนย์กลางสมมาตร และมีการจัดตัวในแนวระนาบของคอปเปอร์จำนวน 4 อะตอม ซึ่งลิแกนด์ $bimztH_2$ ใช้ซัลเฟอร์ในการสร้างพันธะกับโลหะในรูป terminal เป็นจำนวน 4 โมเลกุลและ μ_2-S bridging จำนวน 6 โมเลกุล รูปทรงทางเรขาคณิตรอบคอปเปอร์แต่ละอะตอมเป็นแบบทรงสี่หน้าที่บิดเบี้ยว นอกจากนี้ยังพบอะตอมคลอรีนทำหน้าที่เป็นแอนไอออน และโมเลกุลของน้ำแทรกอยู่ในโครงผลึก

สำหรับสารประกอบเชิงซ้อนของ $[Cu(bimztH_2)_2Br]$ และ $[Cu(bimztH_2)_2I] \cdot CH_3COCH_3$ ตกผลึกอยู่ในระบบมอโนคลินิก หมู่ปริภูมิ $P2_1/c$ (No.14) มีจำนวนโมเลกุลในหนึ่งหน่วยเซลล์เท่ากับ 4 โดยคอปเปอร์สร้างพันธะกับเฮไลด์หนึ่งพันธะ และสร้างพันธะกับซัลเฟอร์สองพันธะ สำหรับรูปทรงทางเรขาคณิตรอบอะตอมคอปเปอร์เป็นแบบสามเหลี่ยมแบนราบที่บิดเบี้ยว และพบโมเลกุลของอะซีโตนอยู่ในโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(bimztH_2)_2I] \cdot CH_3COCH_3$ ซึ่งสอดคล้องกับข้อมูล FT-IR และ ^{13}C NMR นอกจากนี้พบว่ามีอันตรกิริยาทั้งภายในและระหว่างโมเลกุลของสารประกอบเชิงซ้อนทั้งสอง

จากการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของแถบดูดกลืน FT-IR พบว่ามีการเปลี่ยนแปลงของแถบการยืดของ C=S และแถบการงอของ C—S ไปยังเลขคลื่นที่ต่ำกว่าของลิแกนด์อิสระ และมีการเปลี่ยนแปลงของแถบการยืดของ C—N และ N—H ไปยังเลขคลื่นที่สูงขึ้น ทั้งนี้เป็นผลมาจากการโคออร์ดิเนชันผ่านอะตอมซัลเฟอร์ แล้วเกิดการถ่ายโอนประจุจากอะตอมไนโตรเจนไปยังอะตอมซัลเฟอร์

จากการศึกษาข้อมูลของ ^1H NMR พบว่าสารประกอบเชิงซ้อนที่เตรียมได้ทุกชนิด อยู่ในรูป thione ในสารละลาย DMSO-d_6 เนื่องจากอัตราส่วนของเส้น integration ของ N—H โปรตอนกับโปรตอนบนวงแหวนอะโรมาติกเบนซีนเป็น 1 : 2 และไม่พบสัญญาณของ S—H โปรตอน และจากการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของค่า chemical shifts จาก ^{13}C NMR ของสารประกอบเชิงซ้อนทั้งสาม พบว่ามีการเปลี่ยนแปลงของค่า chemical shifts ของ C=S แบบสนามสูง ทั้งนี้เพราะผลการกำบัง

ของอิเล็กตรอนมีมากขึ้นเมื่อลิแกนด์โคออร์ดิเนตผ่านอะตอมซัลเฟอร์ไปยังโลหะคอปเปอร์ ทำให้พันธะ C=S อ่อนลง และเกิดการถ่ายโอนความหนาแน่นของอิเล็กตรอนจากไนโตรเจนไปยังคาร์บอน

นอกจากนี้จากการศึกษาชนิดของธาตุในสารประกอบเชิงซ้อน พบคอปเปอร์ ซัลเฟอร์ คลอรีน โบรมีน และไอโอดีน และจากการวิเคราะห์หาปริมาณธาตุคาร์บอน ไฮโดรเจน ไนโตรเจน และซัลเฟอร์ในสารประกอบเชิงซ้อนที่สังเคราะห์ได้ พบว่ามีค่าใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการคำนวณจากสูตรโมเลกุล

ในการทราบโครงสร้างของโมเลกุลและผลของพันธะไฮโดรเจนมีความสำคัญมาก เนื่องจากเป็นพื้นฐานทางเคมีในการเข้าใจสมบัติทางเคมีและกายภาพของสารเพื่อจะได้นำไปประยุกต์ใช้ในด้านต่าง ๆ ต่อไป

ข้อเสนอแนะ (สำหรับผู้สนใจหรือนักศึกษาที่จะทำวิจัยต่อไป)

1. ควรใช้แอนไอออนอื่น ๆ แทนที่เฮไลด์ เช่น ไนเตรต (NO_3^-), ซัลเฟต (SO_4^{2-}), ไธโอไซยาเนต (SCN^-) เป็นต้น

2. อาจจะใช้โลหะหมู่อื่นๆ นอกเหนือจากคอปเปอร์

3. สามารถนำลิแกนด์ $bimztH_2$ และสารประกอบเชิงซ้อนไปทำการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพ เพื่อนำไปประยุกต์ใช้ต่อไป

4. เนื่องจากสารที่จะนำไปประยุกต์ใช้ในทางการแพทย์ ทางการเกษตร หรือ ระบบนิเวศได้ดี มักต้องมีคุณสมบัติละลายในน้ำ สารละลายบัฟเฟอร์ (buffer) ที่เหมาะสม ที่ pH ประมาณ 7.0 (physiological pH) หรือตัวทำละลายที่ไม่เป็นพิษต่อสิ่งมีชีวิต แต่สารประกอบเชิงซ้อนของคอปเปอร์(I) โดยทั่วไปมักไม่ละลายน้ำ ดังนั้นถ้าสามารถทำการศึกษาเพิ่มเติมเพื่อหาแนวทางปรับโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อนเหล่านี้ให้มีคุณสมบัติละลายน้ำหรือตัวทำละลายอื่นที่เหมาะสมได้ก็น่าจะเป็นประโยชน์