ชื่อวิทยานิพนธ์	โครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนคอปเปอร์ออกซิแอนไอออนที่มีลิแกนด์ไดเอทิลไธโอยูเรียและเอทิลีนไธโอยูเรีย
ผู้เขียน	นางสาวสุนันทา บูก๋ง
สาขาวิชา	เคมีเชิงฟิสิกส์
ปีการศึกษา	2546

บทคัดย่อ

ศึกษาโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อน 4 ชนิด และกำมะถันรอมบิก 1 ชนิด, $[Cu(etu)_3]_2SO_4$, $[Cu_2(detu)_6](NO_3)_2$, $[Cu(detu)_3]_2SO_3$, $[Cu_2(detu)_6](ClO_4)_2$, และ S_8 (etu = เอทิลีนไธโอยูเรีย, detu = ไดเอทิลไธโอยูเรีย) ด้วยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ของผลึกเดี่ยว สารประกอบเหล่านี้เตรียมได้จากปฏิกิริยาระหว่างคอปเปอร์(II) ออกซิแอนไอออน (CH_3COO^-, NO_3^-, ClO_4^-) กับลิแกนด์ซับสติติวเตดไธโอยูเรียบางตัวในสภาวะที่เหมาะสม พบว่าโครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(etu)_3]_2SO_4$ อยู่ในระบบไตรโกนอล หมู่ปริภูมิ *R*3*c* แคตไอออน 2 หมู่มีความแตกต่างกันทางผลึก โดยแต่ละหมู่มีแกนหมุนสามบนอะตอมของคอปเปอร์ที่โคออร์ดิเนตกับอะตอมซัลเฟอร์ของเอทธิลีนไธโอยูเรีย 3 พันธะ และซัลเฟตทำหน้าที่เป็นแอนไอออน สารประกอบเชิงซ้อน $[Cu_2(detu)_6](NO_3)_2$ และ $[Cu_2(detu)_6](ClO_4)_2$ มีโครงสร้างแบบไดเมอร์โดยที่ผลึกจัดอยู่ในระบบไตรคลินิก ที่มีหมู่ปริภูมิ $P\bar{1}$ อะตอมของคอปเปอร์เกิดโคออร์ดิเนตแบบเตตระฮีดรอลที่บิดเบี้ยวกับอะตอมซัลเฟอร์ของไดเอทธิลไธโอยูเรียโดยมีไนเตรตและเปอร์คลอเรตทำหน้าที่เป็นแอนไอออน ตามลำดับ ผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(detu)_3]_2SO_3$ อยู่ในระบบไตรโกนอล หมู่ปริภูมิ *R3* โครงสร้างประกอบด้วยสองแคตไอออนและหนึ่ง SO_3 แอนไอออน อะตอมคอปเปอร์โคออร์ดิเนตกับอะตอมซัลเฟอร์ของไดเอทธิลไธโอยูเรียแบบสามเหลี่ยมแบนราบที่บิดเบี้ยว 3 พันธะ แคตไอออน 2 หมู่ในโครงสร้างผลึกมีความแตกต่างกันเป็นผลเนื่องด้วยอันตรกิริยาที่เกิดจากอะตอมออกซิเจนของหมู่ซัลไฟต์ที่ทำหน้าที่เป็นแอนไอออน ผลึกของสารสุดท้ายคือ S_8 อยู่ในระบบออโธรอมบิก หมู่ปริภูมิ *Fddd* โครงสร้างผลึกที่ได้เป็นโมเลกุลที่มีลักษณะเป็นวงแปดเหลี่ยมของอะตอมซัลเฟอร์ที่เกิดจากการเชื่อมต่อกันระหว่างชั้นของอะตอมซัลเฟอร์ 4 อะตอม

Thesis Title	Crystal Structures of Copper Oxyanion Complexes Containing Ethylenethiourea and Diethylthiourea
Author	Miss Sunanta Bukong
Major Program	Physical Chemistry
Academic Year	2003

Abstract

The crystal structures of four copper(I) complexes with substituted thioureas and one rhombic sulfur, $[Cu(etu)_3]_2SO_4$, $[Cu_2(detu)_6](NO_3)_2$, $[Cu(detu)_3]_2SO_3$, $[Cu_2(detu)_6](ClO_4)_2$, and S_8 (etu = ethylenethiourea, detu = diethylthiourea) have been studied by single crystal X - ray diffraction methods. These complexes were prepared by the direct reaction of copper(II) oxyanions (CH_3COO^-, NO_3^-, ClO_4^-) with some substituted thiourea ligands in suitable condition. Crystals of $[Cu(etu)_3]_2SO_4$ are trigonal, space group $R3c$. The two cations remain crystallogaphically distinct but each is located with the copper atom on a threefold crystallographic axis. The copper atom coordinated by sulfur atoms from three etu ligands and sulfate anion acted as counter anions. Complexes of $[Cu_2(detu)_6](NO_3)_2$ and $[Cu_2(detu)_6](ClO_4)_2$ crystallized in triclinic system, space group $P\bar{1}$. Both structure are dimeric, each copper atom is slightly distorted tetrahedral coordinated by four sulfur atoms of detu ligands with nitrate and perchlorate anion as counter anion, respectively. Crystals of $[Cu(detu)_3]_2SO_3$ are trigonal space group $R3$. The structure consists two independent cations and a SO_3 anoin. The copper(I) atoms is clearly coordinated by three sulfur atoms from three detu molecules in a distorted trigonal configuration. Nevertheless, the geometry of two cations are significantly different in a manner suggestive and a supportive of some purturbation arising from the presence of the sulfite oxygen. Crystals of S_8 are orthorhombic, space group *Fddd.* The molecule adopts a crownlike structure known as cyclo - S_8, and consists of two interconnected layers of four sulfur atoms each.