ชื่อวิทยานิพนธ์	โครงสร้างผลึกบางตัวของสารประกอบเชิงซ้อนของคอปเปอร์(I) กับลิแกนด์ที่มีอะตอมซัลเฟอร์เป็นตัวให้อิเล็กตรอน
ผู้เขียน	นางสาวศิรินทร์ทิพย์ ตันชัชวาล
สาขาวิชา	เคมีเชิงฟิสิกส์
ปีการศึกษา	2546

บทคัดย่อ

ได้เตรียมอนุกรมของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างคอปเปอร์เฮไลด์ (CuX; X= Cl, Br, I) กับเอ็น-ฟีนิลไธโอยูเรีย (ptu) คือ $[Cu(ptu)_4]Cl$ (1), $[Cu_4(ptu)_6Br_4]$ (2) และ $[Cu_4(ptu)_6I_4]$ (3) และศึกษาโครงสร้างโดยวิธีการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว ผลึกของ (1) อยู่ในระบบเตตระโกนอล (tetragonal) และหมู่ปริภูมิเป็น $I\bar{4}$ (หมายเลข 82) พารามิเตอร์หน่วยเซลล์ของผลึก (1) มีดังนี้ a = 11.5084(2), c = 12.8895(3) Å, V = 1707.1(1) Å^3, R = 0.0452 สำหรับรีเฟลกชันที่ใช้คำนวณ 1059 รีเฟลกชัน สารประกอบเชิงซ้อน (1) เป็นโครงสร้างแบบไอออนิกมี $[Cu(ptu)_4]^+$ เป็นแคตไอออนและมีอะตอมของคลอไรด์เป็นแอนไอออน อะตอมคอปเปอร์ของแคตไอออนอยู่ในตำแหน่งที่มีสมมาตร $\bar{4}$ โดยเกิดพันธะกับ ptu สี่ลิแกนด์ สารประกอบเชิงซ้อน (2) และ (3) มีโครงสร้างคล้ายกันเป็นแบบอะดาแมนเทน ซึ่งมีวงแหวนลักษณะคล้ายรูปเก้าอี้ของ Cu-S-Cu-S-Cu-S 6 วงแหวนมายึดเกาะกันเป็นกลุ่ม โดยอะตอมคอปเปอร์แต่ละอะตอมมีการจัดเรียงตัวแบบเตตระฮีดรอล เกิดพันธะกับอะตอม ซัลเฟอร์ของลิแกนด์ 3 โมเลกุล และอะตอมของโบรมีนหนึ่งอะตอมหรือไอโอดีนหนึ่งอะตอมตามลำดับ โครงสร้างทั้งสองอยู่ในระบบไตรคลินิก (triclinic) มีหมู่ปริภูมิเป็น $P\bar{1}$ (หมายเลข 2) จำนวนโมเลกุลในหน่วยเซลล์เป็น 2 โมเลกุล พารามิเตอร์หน่วยเซลล์ของผลึก (2) และ (3) มีดังนี้ ผลึก (2) a = 11.987(1), b = 19.891(2), c = 25.213(2) Å, α = 111.58(1), β = 95.91

(1), γ = 97.45(1)°, V = 5468.7(1) Å^3, R = 0.049 สำหรับรีเฟลกชันที่ใช้คำนวณ 18904 รีเฟลกชัน และผลึก (3) a = 12.1943(1), b = 20.8855(4), c = 23.5722(4) Å, α = 82.121(1), β = 89.217(1), γ = 84.367(1)°, V = 5918.0(2) Å^3, R = 0.044 สำหรับรีเฟลกชันที่ใช้คำนวณ 14959 รีเฟลกชัน

นอกจากนี้ได้ศึกษาสารประกอบเหล่านี้โดยวิธีเอกซ์เรย์ฟลูออเรสเซนซ์ และอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี เพื่อศึกษาโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อนในเบื้องต้นว่าอะตอมคอปเปอร์เกิดพันธะกับอะตอมซัลเฟอร์จากลิแกนด์ ptu และจากการศึกษาพบว่าผลที่ได้จากทั้งสองวิธีสอดคล้องกับโครงสร้างที่ศึกษาโดยวิธีทางเอกซเรย์

Thesis Title	Crystal Structures of Some Copper(I) Complexes Containing Sulfur Donor-Atom Ligands
Author	Miss Sirintip Tanchatchawal
Major Program	Physical Chemistry
Academic Year	2003

Abstract

The systematic complexes of copper(I) halides (CuX; X= Cl, Br,I) with *N*-phenylthiourea (ptu), $[Cu(ptu)_4]Cl$ (1), $[Cu_4(ptu)_6Br_4]$ (2) and $[Cu_4(ptu)_6I_4]$ (3) have been prepared and structurally characterized by single crystal X-ray diffraction methods. Crystals of (1) are tetragonal, space group $I\bar{4}$ (No.82) with a = 11.5084(2), c = 12.8895(3) Å, V = 1707.1(1) Å^3, R = 0.0452 for 1059 observed reflections. The structure consists of discrete $Cu(ptu)_4$ cations and Cl anions. The copper atom of cation lies on a site of $\bar{4}$ symmetry bonded to four ptu ligands. The structures of complexes (2) and complex (3) are similar, crystallizing in triclinic system, space group $P\bar{1}$ (No. 2), Z = 2. The two structures are adamantane-type cluster. This cage structure results in the formation of four six-membered Cu-S-Cu-S-Cu-S rings all in the chair conformation. Each copper atom is coordinated tetrahedrally by three sulfur atoms and a Br or an I atom, respectively. Unit cell parameters of (2) are a = 11.987(1), b = 19.891(2), c =25.213(2) Å, α = 111.58(1), β = 95.91, γ = 97.45°, V = 5468.7(1) Å^3, R = 0.049 for 18904 observed reflections and of (3) are a = 12.1943(1), b = 20.8855(4), c = 23.5722(4) Å, α = 82.121(1), β = 89.217(1), γ = 84.367(1)°, V = 5918.0(2) Å^3, R = 0.044 for 14959 observed reflections.

Furthermore, the compounds have been investigated by X-ray fluorescence spectrometry and infrared spectroscopy to support the fundamental structures of the studied complexes that the bonding between copper atom and sulfur atom from ligand ptu. These results show consistence with the x-ray structures.