

รูปแบบรายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์ แบบที่ 1 (สำหรับโครงการเดี่ยวหรือโครงการย่อย)

การสังเคราะห์ ศึกษาโครงสร้าง Supramolecular Assembly ในระบบของแข็งและการต้าน
เชื้อจุลินทรีย์ของสารประกอบเชิงซ้อนคอปเปอร์(I)/ซิลเวอร์(I) ที่มีลิแกนด์ผสม 1H-1,2,4-
ไตรเอซอล-3-ไธออล กับ ไธโอไซยาเนต/เอไซด์

Synthesis, Characterization, Supramolecular Assembly of Solid System and
Antimicrobial of Copper(I)/Silver(I) Complex Based On the Mixed 1H-1,2,4-
triazole-3-thiol and Thiocyanate / Azide ligands.

ผศ.ดร. เสาวนิต ทรายทอง

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้เป็นการสังเคราะห์และศึกษาโครงสร้างประกอบเชิงซ้อน 5 ตัวคือ $[Cu(HtrzSH)(SCN)]_{\infty}$ (1) $[Ag(HtrzSH)(SO_4)(H_2O)]_{\infty}$ (2) $[Ag(HtrzSH)(SCN)]_{\infty}$ (3) $[Ag_2(HtrzSH)_2(SCN)_2]$ (4) และ $[Cu(H_2trzSS)_2]_2 \cdot SO_4$ (5) ตามลำดับ ทำการศึกษาโครงสร้างด้วยเทคนิคหลักคือการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยวและเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี เช่น IR และ NMR เป็นต้น จากการศึกษาและวิเคราะห์โครงสร้างพบว่าสารประกอบเชิงซ้อน (1) เป็นพอลินิวเคลียร์มีโครงสร้างเป็นโครงข่ายร่างแห 2 มิติ สารประกอบเชิงซ้อน (2) และ (3) เป็นพอลินิวเคลียร์มีโครงสร้างเป็นสายโซ่พอลิเมอร์ 1 มิติ สารประกอบเชิงซ้อน (4) มีโครงสร้างเป็นไดนิวเคลียร์ และ สารประกอบเชิงซ้อน (5) เป็นโมโนนิวเคลียร์ตามลำดับ เมื่อศึกษาแรงกระทำของสารระหว่างโมเลกุลของสารในโครงผลึก พบแรงกระทำที่สำคัญที่ทำให้สารประกอบเชิงซ้อนมีความเสถียรจนสามารถตกผลึกออกมาได้ แรงกระทำที่พบในโครงผลึกโครงข่ายสองมิติสารประกอบเชิงซ้อน (1) ซึ่งมีจัดเรียงเป็นชั้นๆของร่างแห 2 มิติซ้อนกัน เป็นแรงกระทำแบบพันธะไฮโดรเจนแบบ N-H...S และ N-H...N ซึ่งเป็นแรงที่สำคัญในการทำให้การจัดตัวในโครงผลึกมีความเสถียร สำหรับในโครงผลึกสารประกอบเชิงซ้อน (2) เนื่องจากสารประกอบนี้เป็นสารประกอบเชิงซ้อนแคตไอออนิก และมีโมเลกุลน้ำจำนวนมากแทรกในโครงผลึก จึงมีแรงกระทำจำนวนมากและมีความซับซ้อนมาก แรงกระทำที่พบเป็นแรงแบบพันธะไฮโดรเจน N-H...S C-H...O N-H...O และ ยังพบแรงระหว่างสายโซ่แคตไอออนกับไอออนคู่ประจักษ์อีกด้วย ในสารประกอบเชิงซ้อนตัวที่ (3) พบชนิดแรงเป็นแบบ N-H...S และ N-H...N และแรงกระทำระยะสั้นระหว่างอะตอมคือ Ag...S ระหว่างสายโซ่ 1 มิติ แรงกระทำที่พบในสารประกอบเชิงซ้อน (4) ซึ่งเป็นโครงสร้างไดนิวเคลียร์คือ N-H...N N-H...S C-H...S C-H...N นอกจากนี้ยังพบแรงกระทำระหว่างโมเลกุลชนิด π ... π แบบ face to face จึงทำให้สารประกอบเชิงซ้อน (4) มีความเสถียร สารประกอบเชิงซ้อน (5) ในโครงผลึกพบแรงกระทำจำนวนมากทั้งแรงแบบพันธะไฮโดรเจนคือ N-H...S C-H...N และแรงกระทำระยะสั้นระหว่างอะตอมที่พบคือ N...S และ N...N ตามลำดับ จากการศึกษาผลการออกฤทธิ์ทางชีวภาพเบื้องต้น พบว่าสารประกอบเชิงซ้อน (5) แสดงผลการทดสอบการต้านเชื้อวัณโรค *Mycobacterium tuberculosis* (H37Ra) โดยเปอร์เซ็นต์การต้านเชื้ออยู่ที่ 97.43 % นอกจากนี้สารประกอบเชิงซ้อน (1) (4) และ (5) แสดงความเป็นพิษต่อเซลล์มะเร็งเต้านมของคน MCF-7 (66.77 53.68 และ 68.23 % ตามลำดับ) และเป็นพิษต่อเซลล์มะเร็งปอด NCI-H187 (101.38 78.42 และ 101.18 % ตามลำดับ) อีกด้วย

Abstract

Five complexes of $[\text{Cu}(\text{HtrzSH})(\text{SCN})]_{\infty}$ (1) $[\text{Ag}(\text{HtrzSH})(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})]_{\infty}$ (2) $[\text{Ag}(\text{HtrzSH})(\text{SCN})]_{\infty}$ (3) $[\text{Ag}_2(\text{HtrzSH})_2(\text{SCN})_2]$ (4) and $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{trzSS})_2]_2 \cdot \text{SO}_4$ (5) have been synthesized and mainly characterized by Single Crystal X-ray diffraction and also studied by spectroscopic techniques such as IR and NMR spectroscopies. The structure of the complex (1) is two dimensional network. The complex (2) and (3) have one dimensional chain structures. The structures of the complex (4) and (5) are dinuclear and mononuclear complex respectively. For interactions between the molecules analysis, The arrangement of two dimensional layers of (1) are stabilized by the important hydrogen bond interactions, N-H---S and N-H---N. For the complex (2), due to this complex is the cationic chain containing with a lot of water molecules in lattice. Thus, There are a lot of hydrogen bond interactions in crystal packing, N-H---S C-H---O and N-H---O, in addition, the electrostatic interactions are found between cationic chains and counter ions. The inter molecular hydrogen bond interactions, N-H---S and N-H---N, are also found in the one dimensional chain of complex (3). Moreover, the short contact between Ag and S, Ag---S, are also observed to stabilized the packing structure. The dinuclear complex (4) shows the inter molecular Hydrogen bonds between the molecules types N-H---S and N-H---N including with the short atom contacts of N---S and N---N, respectively. For biological activity tests, complex (5) exhibits the positive result for *Mycobacterium tuberculosis (H37Ra)* with 97.43 % inhibition. In addition, the complex (1), (4) and (5) show the in vitro cytotoxicity against breast cancer (MCF-7) with 66.77, 53.68 and 68.23 % and small cell lung cancer (NCI-H187) with 101.38, 78.42 and 101.18 %, respectively.