โครงสร้างผลึกของสารประกอบอินทรีย์บางตัว

Crystal Structures of Some Organic Compounds

ศิริพร วิเศษสินธุ์

Siriporn Wisassinthu

เลขหมู่ QD305 A164 2532
เลขทะเบียน 028160
29 ส.ค. 2533

วิทยานิพนธ์วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาเคมีศึกษา

มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

Master of Science Thesis in Chemical Studies

Prince of Songkhla University

2532

หัวข้อวิทยานิพนธ์ โครงสร้างผลึกของสารประกอบอินทรีย์บางตัว

ผู้เขียน น.ส. ศิริพร วิเศษสินธุ์

สาขาวิชา เคมีศึกษา

ปีการศึกษา 2532

บทคัดย่อ

ได้ศึกษาหาโครงสร้างผลึกของสารประกอบอินทรีย์สี่ตัวคือ 2-ethoxy-3,4,5-tri-acetoxy-6-acetoxymethyltetrahydropyran (I), 2-methyl-*N*-[1'-(1"-oxo-3"-phenylprop-2"-enyl)pyrrolidin-2'-yl]butanamide(odorine, II),5-hydroxy-7-methoxy-2-phenyl-4H-1-benzopyran-4-one (tectochrysin, III) และ 2,5-dihydroxy-7-methoxy-2-phenyl-2,3-dihydro-4H-1-benzopyran-4-one(IV) โดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยวที่ 295 K และขัดเกลาโครงสร้างโดยหลักผลต่างยกกำลังสองน้อยที่สุด ผลึก (I) เป็นแบบออโธรอมบิก อยู่ในกลุ่มปริภูมิ $P2_12_12_1$ โดยมี a = 17.131(8) b = 15.740(7) c = 7.282(3) $^{\circ}$A มีสี่โมเลกุลต่อหนึ่งหน่วยเซล ดัชนีความเชื่อถือเท่ากับ 0.046 จากจำนวนการเลี้ยวเบนที่ใช้คำนวณเท่ากับ 1012 ผลึก (II) เป็นแบบโมโนคลีนิก อยู่ในกลุ่มปริภูมิ C2 โดยมี a = 19.122(21) b = 7.010(4) c = 13.528(18) $^{\circ}$A, β = 107.31(4)$^{\circ}$ มีสี่โมเลกุลต่อหนึ่งหน่วยเซล ดัชนีความเชื่อถือเท่ากับ 0.243 จากจำนวนการเลี้ยวเบนที่ใช้คำนวณเท่ากับ 903 ผลึก (III) เป็นแบบโมโนคลีนิกอยู่ใน กลุ่มปริภูมิ $P2_1/c$ โดยมี a = 10.128(3) b = 15.289(5) c = 8.215(4) $^{\circ}$A, β= 92.39(3)$^{\circ}$ มีสี่โมเลกุลต่อหนึ่งหน่วยเซล ดัชนีความเชื่อถือเท่ากับ 0.072 จากจำนวนการเลี้ยวเบนที่ใช้คำนวณเท่ากับ 874 ผลึก (IV) เป็นแบบโมโนคลีนิกอยู่ในกลุ่มปริภูมิ $P2_1/c$ โดยมี a = 12.299(4) b = 6.489(3) c = 16.579(6) $^{\circ}$A, β= 90.24(3) มีสี่โมเลกุลต่อหนึ่งหน่วยเซลดัชนีความเชื่อถือเท่ากับ 0.052 จากจำนวนการเลี้ยวเบนที่ใช้คำนวณเท่ากับ 982

Thesis title Crystal Structures of Some Organic Compounds

Author Miss Siriporn Wisassinthu

Major program Chemical Studies

Academic year 1989

Abstract

The crystal structures of organic compounds, 2-ethoxy-3,4,5-triacetoxy-6-acetoxymethyltetrahydropyran(I), 2-methyl-*N*-[1'-(1"-oxo-3"-phenylprop-2"-enyl)pyrrolidin-2'-yl]butanamide(odorine, II),5-hydroxy-7-methoxy-2-phenyl-4H-1-benzopyran-4-one (tectochrysin, III) and 2,5-dihydroxy-7-methoxy-2-phenyl-2,3-dihydro-4H-1-benzopyran-4-one (IV) have been determined by single crystal x-ray diffraction methods at 295 K and refined by full - matrix least squares. Crystals of the compound (I) are orthorhombic, space group $P2_12_12_1$, a = 17.131(8) b = 15.740(7) c = 7.282(3) $^{\circ}$A, z = 4, R = 0.046 for 1012 "observed" reflections. Crystals of the compound (II) are monoclinic, space group C2, a = 19.122(21) b = 7.010(4) c = 13.528(18) $^{\circ}$A, β = 107.31(4) $^{\circ}$, z = 4, R = 0.243 for 903 "observed" reflections. Crystals of the compound (III) are monoclinic, space group $P2_1/c$, a = 10.128(3) b = 15.289(5) c = 8.215(4) $^{\circ}$A, β= 92.39(3) $^{\circ}$, z = 4, R = 0.072 for 874 "observed" reflections. Crystals of the compound (IV) are monoclinic, space group $P2_1/c$, a = 12.199(4) b = 6.489(3) c = 16.579(6) $^{\circ}$A, β = 90.24(3) $^{\circ}$, z = 4, R = 0.052 for 982 "observed" reflections.