นงนภัส โฆษวิฑิตกุล : การสังเคราะห์ และศึกษาโครงสร้างของแอซิโดไนโตรซิลบิส (ไตรฟีนิลฟอสฟีน)นิเกิล (SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDY OF AZIDONITROSYLBIS(TRIPHENYLPHOSPHINE)NICKEL) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.เด็นเนท เจ. แฮลเลอร์, 97 หน้า. ISBN 974-533-402-2

วิทยานิพนธ์นี้รายงานการสังเคราะห์ผลึกเชิงเดี่ยว $Ni(N_3)(NO)(PPh_3)_2$ และสามารถตรวจหาเอกลักษณ์อีกครั้งหนึ่งของโครงสร้างผลึกโดยเทคนิคเอกซ์เรย์คริสทัลโลกราฟี ได้พบว่าผลึกอยู่ในระบบมอโนคลินิกกลุ่ม $P2_1/c$ ประกอบด้วย a = 13.597(5) Å, b = 19.098(8) Å, c = 12.562(4) Å, β = 98.59(5)°, V = 3221.89 Å^3, ที่อุณหภูมิ 298 เคลวิน นอกจากนี้ยังได้ศึกษาอันตรกิริยาของโครงสร้างซุปราโมเลคิวลาร์ของการเกาะกันของฟีนิลจำนวนมาก ทำให้เพิ่มความเข้าใจโครงสร้างทางเคมีของผลึกนี้ ซึ่งพบว่า อันตรกิริยาของพันธะไฮโดรเจนชนิดอ่อนของ C–H···O, C–H···N และ C–H···π กับอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว และ ความหนาแน่นของ π อิเล็กตรอน ของกลุ่ม แอซิโด ไนโตรซิล และฟีนิล มีการเชื่อมต่อกันเกิดเป็นโครงสร้างซุปราโมเลคิวลาร์แบบสามมิติ

สารประกอบเชิงซ้อนแอซิโดมีระยะของ P···P ที่สั้นที่สุดเป็น 7.350 Å และ 7.783 Å, colinearity 86.9° และ 117.8° แต่ไม่เกิดอันตรกิริยาของ ซิคซ์โฟลดฟีนิลเอ็มบเรซ ซึ่งอันตรกิริยาของโซ่ที่แข็งแรงที่สุด เป็นอันตรกิริยาของ เอทโฟลดฟีนิลเอ็มบเรซ และ แพแร็ลเล็ลโฟโฟลดฟีนิลเอ็มบเรซ ซึ่งเกี่ยวข้องกับ C–H···N ทั้ง 4 ขณะที่อันตรกิริยาของ nonbonded ที่แข็งแรงที่สุด 2.466 Å เป็นอันตรกิริยาภายในโมเลกุลของ C–H···N ที่อิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวของไนโตรเจนที่เกาะกับนิเกิล รวมทั้งยังมีอันตรกิริยาของวงฟีนิลและอันตรกิริยาซึ่งเกี่ยวข้องกับ C–H···N ที่เชื่อมต่อกันเกิดเป็นโครงสร้างแบบสามมิติ ดังนั้นลิแกนด์แอซิโดกลายเป็นส่วนที่สำคัญที่กำหนดโครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนแอซิโดที่แผ่ขยายออกไป

สาขาวิชาเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา K. Nagnaphat

ปีการศึกษา 2547 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา Kenneth J. Haller

NONGNAPHAT KHOSAVITHITKUL : SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDY OF AZIDONITROSYLBIS(TRIPHENYLPHOSPHINE)NICKEL. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. KENNETH J. HALLER, Ph.D. 97 PP. ISBN 974-533-402-2

SUPRAMOLECULAR STRUCTURE/AZIDO/NITROSYL

This thesis reports syntheses of $Ni(N_3)(NO)(PPh_3)_2$, and redetermination of the single crystal X-ray structure based on a data set collected on a KappaCCD diffractometer to improve the model for the azide region. The deep blue-black crystals are monoclinic, $P2_1/c$, with unit cell parameters at 298 K of a = 13.597(5) Å, b = 19.098(8) Å, c = 12.562(4) Å, β = 98.59(5)°, V = 3221.89 Å^3, and Z = 4. The discrete pseudo tetrahedral molecules are interconnected into a three-dimensional supramolecular structure by concerted C–H···O, C–H···N, and C–H···π hydrogen bonds to the lone pair and π electron density of the azido, nitrosyl, and phenyl groups.

The shortest intermolecular P···P distances in the azido complex are 7.350 Å and 7.783 Å with colinearities of 86.9° and 117.8°, thus not sixfold phenyl embraces. A stronger chain of alternating eightfold phenyl embraces and parallel fourfold phenyl embraces supplemented by four C–H···N interactions occurs. Also, the strongest nonbonded interaction is the 2.466 Å *intra*molecular C–H···N interaction to the lone pair on the azido N bonded to Ni. There are several phenyl-phenyl interactions as well as other C–H···N interactions linking the chains into a three-dimensional network. The azido ligand, thus becomes a dominant influence in determining the extended crystal structure.

School of Chemistry Student's Signature K. Nongnaphat

Academic Year 2004 Advisor's Signature Kenneth J. Haller