

วินาวรรณ สมผล : การศึกษาโครงสร้างผลึกที่มีองค์ประกอบซึ่งมีอันตรกิริยาต่อกัน
(STRUCTURAL STUDIES OF CRYSTALS WITH INTERACTING
COMPONENTS) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร. เค็นเนท เจ. แฮลเลอร์,
262 หน้า. ISBN 974-533-422-7

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้รวบรวมการยอมรับและการสืบสาวของโครงสร้างผลึกที่มีปัญหาซึ่งต้องการแบบจำลองนวัตกรรม เพื่อสามารถพอที่จะนำมาอธิบายโครงสร้าง และทำให้สละสลวยขึ้น โครงสร้างที่ศึกษา ได้แก่ ความสมมาตรเทียม ความไม่เป็นระเบียบของผลึก ผลึกเชิงคู่ โครงสร้างสารผลึก โครงสร้างที่มีการกล้ำ การแพร่กระเจิง และสถานภาคเฟส การแยกปัญหาให้ชัดเจนขึ้นอยู่กับความยากของปัญหา ที่ต้องการความพึงพอใจของวิธีข้อมูลทางโครงสร้างคือการกระจายตัวในข้อมูลการกระเจิงเลี้ยวเบน และใช้วิธีการทำให้สละสลวยซึ่งตัวแปรเสริมต้องเป็นที่ยอมรับเป็นความสำคัญ และสิ่งเหล่านั้นเป็นสิ่งเล็กน้อยที่ทำให้เกิดผลสำเร็จบนแบบรูปการเลี้ยวเบนแสง

โครงสร้างผลึกที่มีพฤติกรรมของปรากฏการณ์ชนิดที่น่าสนใจศึกษา ในการหาโครงสร้างที่น่าเชื่อถือในระหว่างผลเฉลยโครงสร้างและการทำให้ชัดเจนและเชื่อถือได้ ได้แก่ (i) โครงสร้างสารผลึก $[\text{SnCl}_2(\text{C}_2\text{H}_4\text{COOH})(\text{C}_2\text{H}_4\text{COO})]^- [\text{C}_{12}\text{H}_9\text{N}_2]^+$, (ii) ความสมมาตรเทียมและระบบการสะท้อนที่ไม่คมชัดใน $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{HMT} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, (iii) การสะท้อนที่พิเศษของ $\text{PS}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$, (iv) โครงสร้างเชิงคู่รวมไปถึงการเหลื่อมล้ำบางส่วนและอย่างสมบูรณ์ของความเข้มในการเลี้ยวเบนแสงใน $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{I}_2 \cdot 2\text{HMT} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, เมื่อ $M = \text{Ni}$ และ Mn , (v) โครงสร้างการกล้ำที่ได้สัดส่วนกันของ $\{[\text{Cu}(\text{bipy})_2]\text{SO}_4 \cdot \text{TPA}\}_n$, และ (vi) โครงสร้างที่อุณหภูมิสูง ต่ำ ซึ่งเหมาะสมในการเปลี่ยนแปลงอันดับที่เป็นระเบียบ-ไม่เป็นระเบียบของผลึกของ $[\text{Ag}(\text{bipy})\text{NO}_3]_n$ และเหตุผลสำหรับการสังเกตการแพร่กระเจิงของรูปแบบที่ไม่เป็นระเบียบ

สาขาวิชาเคมี
ปีการศึกษา 2547

ลายมือชื่อนักศึกษา W. Sampiran
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา Kenneth J. Haller

WEENAWAN SOMPHON : STRUCTURAL STUDIES OF CRYSTALS
WITH INTERACTING COMPONENTS. THESIS ADVISOR : ASSOC.
PROF. KENNETH J. HALLER, Ph.D. 262 PP. ISBN 974-533-422-7

STRUCTURE MODULATION/POLYMORPHISM/POLYTYPISM/ TWINNING
PHASE TRANSITION/SUPRAMOLECULAR STRUCTURE

This thesis is focused on the recognition and investigation of problem crystal structures that require innovative modeling for adequate structure description and refinement. The structures studied were associated with pseudo symmetry, disorder, twinning, polytypes, structure modulation, diffuse scattering, and phase transitions. Resolution of the inherent difficulties required an appreciation of how structural information is distributed in diffraction data and used refinement techniques that recognized which parameters are important and those that had little effect on the diffraction pattern.

Crystal structures that exhibited phenomena which posed particular challenges during structure solution and refinement were (i) the polytypism of $[\text{SnCl}_2(\text{C}_2\text{H}_4\text{CO}_2\text{H})(\text{C}_2\text{H}_4\text{CO}_2)]^- \cdot [\text{C}_{12}\text{H}_9\text{N}_2]^+$, (ii) the pseudo symmetry and systematically weak reflections in $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{HMT} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, (iii) the extra reflections of $\text{PS}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$, (iv) the twinning including partial and perfect overlap of diffraction intensities in $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{I}_2 \cdot 2\text{HMT} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, where $M = \text{Ni}$ and Mn , (v) the commensurately modulated structure of $\{[\text{Cu}(\text{bipy})]_4(\text{SO}_4)_2 \cdot 2(\text{TPA})\}_n$, and (vi) the high and low temperature structures involved in an order-disorder transformation of crystallized $[\text{Ag}(\text{bipy})\text{NO}_3]_n$ and the reason for the observed diffuse scattering of the disordered form.

School of Chemistry

Academic Year 2004

Student's Signature W. Somphon

Advisor's Signature Kenneth J. Haller