KADSADA SALA : SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDIES OF ORGANIC COCRYSTALLINE MATERIALS. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. KENNETH J. HALLER, Ph.D. 100 PP.

HYDROGEN BOND PATTERN/GRAPH SET ANALYSIS/COCRYSTAL/ MOLECULAR CRYSTAL

The 2:1 cocrystalline adduct of catechol and hexamine has been prepared by solution crystallization using mixed chloroform and diethyl ether as solvents, and studied using single crystal X-ray structure analysis. The strong N-atom hydrogen bond acceptors of hexamine all participate in hydrogen bonds with the strong O–H donors of catechol, forming local $R_4^4(18)$ rings, which link through the hexamine molecules to form one-dimensional chains of alternating catechol and hexamine molecules. One hydroxyl group participates in both intramolecular (*d*[O···O] = 2.724 (1) Å, 103.0 (16)°) and intermolecular (*d*[O···N] = 2.822 (1) Å, 160 (2)° strong hydrogen bonds, creating hydrogen bonding motifs with graph theory designation *S(5)*. The other hydroxyl group participates in one strong donor (*d*[O···N] = 2.760 (1) Å, 162 (2)°) and one weak hydrogen bond acceptor (*d*[C···O] = 3.026 (1) Å, 111.4 (11)°) interactions. Including the weak hydrogen bond the graph set notation describing the intermolecular interactions would be designated $R_2^2(8)$. Intermolecular C–H···π edge-to-face hydrogen bond interactions of phenyl rings propagated by 2_1-screw axes are also present as herringbone columns.

School of Chemistry Student's Signature

Academic Year 2009 Advisor's Signature

เกษฎา สาลา : การสังเคราะห์และโครงสร้างซุปราโมเลคิวลาร์ของผลึกร่วมระหว่างแคททีคอลและเฮกซามีน (SYNTHESIS AND SUPRAMOLECULAR STRUCTURE OF COCRYSTALLINE CATECHOL AND HEXAMINE) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร. เค็นเนท เจ. แฮลเลอร์, 100 หน้า.

ผลึกร่วมอัตราส่วน 2:1 ของแคททีคอลและเฮกซามีน เตรียมโดยตกผลึกในสารละลายผสมระหว่างคลอโรฟอร์มและไดเอทิลอีเทอร์ และได้ทำการศึกษาโครงสร้างด้วยรังสีเอ็กซ์ผลึกเชิงเดี่ยว พบว่าไนโตรเจนทุกอะตอมของเฮกซามีนมีส่วนร่วมในการเกิดพันธะไฮโดรเจนแบบแข็งแรงกับตัวให้ไฮโดรเจน O–H ของแคททีคอล เกิดเป็นวงแบบ $R_4^4(18)$ ซึ่งเชื่อมผ่านโมเลกุลของเฮกซามีนเกิดเป็นโครงสร้างแบบสายโซ่ 1 มิติที่ประกอบด้วยโมเลกุลของแคททีคอลและเฮกซามีนสลับกันไป หมู่ไฮดรอกซิล 1 หมู่ที่เกิดเป็นทั้งพันธะไฮโดรเจนแบบแข็งแรงภายในโมเลกุล (d[O···O] = 2.724 (1) Å, 103.0 (16)°) และระหว่างโมเลกุล (d[O···N] = 2.822 (1) Å, 160 (2)°) เกิดเป็นรูปแบบพันธะไฮโดรเจนแบบสัญลักษณ์ $S(5)$ ส่วนหมู่ไฮดรอกซิลอีกหนึ่งหมู่ มีส่วนร่วมทั้งในการรับพันธะไฮโดรเจนแบบแข็งแรง (d[O···N] = 2.760 (1) Å, 162 (2)°) และการให้พันธะไฮโดรเจนแบบอ่อน (d[C···O] = 3.026 (1) Å, 111.4 (11)°) ส่วนพันธะไฮโดรเจนแบบอ่อนมีรูปแบบสัญลักษณ์ที่อธิบายอันตรกิริยาแบบ $R_2^2(8)$ พันธะไฮโดรเจนระหว่างโมเลกุล C–H···π แบบ edge-to-face ของวงฟีนิลอยู่บนแกนหมุนเกลียว 2_1 (2_1-screw) เกิดการเรียงตัวซ้อนกันเป็นแบบ herringbone column

สาขาวิชาเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2552 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____