

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

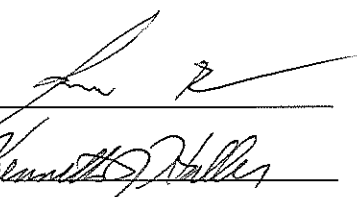
The 2:1 cocrystalline adduct of catechol and hexamine has been prepared by solution crystallization using mixed chloroform and diethyl ether as solvents, and studied using single crystal X-ray structure analysis. The strong N-atom hydrogen bond acceptors of hexamine all participate in hydrogen bonds 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 ($d[\text{O}\cdots\text{O}] = 2.724$ (1) Å, 103.0 (16)°) and intermolecular ($d[\text{O}\cdots\text{N}] = 2.822$ (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 ($d[\text{O}\cdots\text{N}] = 2.760$ (1) Å, 162 (2)°) and one weak hydrogen bond acceptor ($d[\text{C}\cdots\text{O}] = 3.026$ (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 $\cdots\pi$ edge-to-face hydrogen bond interactions of phenyl rings propagated by 2_1 -screw axes are also present as herringbone columns.

School of Chemistry

Academic Year 2009

Student's Signature

Advisor's Signature



เกศญา สาธา : การสังเคราะห์และโครงสร้างซูปราโมเลคิวลาร์ของผลึกร่วมระหว่าง
แคททีคอลและเฮกซามีน (SYNTHESIS AND SUPRAMOLECULAR STRUCTURE
OF COCRYSTALLINE CATECHOL AND HEXAMINE) อาจารย์ที่ปรึกษา :
รองศาสตราจารย์ ดร. เก็นเนท เจ. แชลเลอร์, 100 หน้า.

ผลึกร่วมอัตราส่วน 2:1 ของแคททีคอลและเฮกซามีน เตรียมโดยตกผลึกในสารละลายผสม
ระหว่างคลอโรฟอร์มและไดเอทิลอีเทอร์ และได้ทำการศึกษาโครงสร้างด้วยรังสีเอ็กซ์ผลึกเชิงเดี่ยว
พบว่าไฮโดรเจนทุกอะตอมของเฮกซามีนมีส่วนร่วมในการเกิดพันธะไฮโดรเจนแบบแข็งแรงกับตัว
ให้ไฮโดรเจน O-H ของแคททีคอล เกิดเป็นวงแบบ R_4^+ (18) ซึ่งเชื่อมผ่านโมเลกุลของเฮกซามีนเกิด
เป็นโครงสร้างแบบสายโซ่ 1 มิติที่ประกอบด้วยโมเลกุลของแคททีคอลและเฮกซามีนสลับกันไป
หมู่ไฮดรอกซิล 1 หมู่ที่เกิดเป็นทั้งพันธะไฮโดรเจนแบบแข็งแรงภายในโมเลกุล ($d[\text{O}\cdots\text{O}] = 2.724$
(1) Å, 103.0 (16)°) และระหว่างโมเลกุล ($d[\text{O}\cdots\text{N}] = 2.822$ (1) Å, 160 (2)°) เกิดเป็นรูปแบบพันธะ
ไฮโดรเจนแบบสัญลักษณ์ $S(5)$ ส่วนหมู่ไฮดรอกซิลอีกหนึ่งหมู่มีส่วนร่วมทั้งในการรับพันธะ
ไฮโดรเจนแบบแข็งแรง ($d[\text{O}\cdots\text{N}] = 2.760$ (1) Å, 162 (2)°) และการให้พันธะไฮโดรเจนแบบอ่อน
($d[\text{C}\cdots\text{O}] = 3.026$ (1) Å, 111.4 (11)°) ส่วนพันธะไฮโดรเจนแบบอ่อนมีรูปแบบสัญลักษณ์ที่อธิบาย
อันตรกิริยาแบบ $R_2^2(8)$ พันธะไฮโดรเจนระหว่างโมเลกุล C-H $\cdots\pi$ แบบ edge-to-face ของวงฟีนิล
อยู่บนแกนหมุนเกลียว 2_1 (2_1 -screw) เกิดการเรียงตัวซ้อนกันเป็นแบบ herringbone column

สาขาวิชาเคมี
ปีการศึกษา 2552

ลายมือชื่อนักศึกษา

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

