



บทคัดย่อ

EXTENDED ABSTRACTS

การประชุมวิชาการ

วิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทย ครั้งที่ 28

24-26 ตุลาคม 2545

ณ ศูนย์การประชุมแห่งชาติสิริกิติ์ กรุงเทพฯ

28th Congress on Science and Technology of Thailand

24-26 October 2002

Queen Sirikit National Convention Center, Bangkok

สมาคมวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทย
THE SCIENCE SOCIETY OF THAILAND



คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ
FACULTY OF SCIENCE
KMITP NORTH BANGKOK

โครงสร้างผลึกแบบแพดเดิล-วีลโคออร์ดิเนชันพอลิเมอร์ของสารประกอบไดคอปเปอร์เทอร์อะตระแทะเร

CRYSTAL STRUCTURE OF THE MISSING [Cu₂(TEREPHTHALATE)₄] "PADDLE-WHEEL" COORDINATION POLYMER

กิตติพงษ์ ไชยนอก*^a, เค็นเนท จ. ฮัลเลอร์**^a และ เอียน ดี. วิลเลียมส์^b

Kittipong Chainok*^a, Kenneth J. Haller**^a and Ian D. Williams^b

^a School of Chemistry, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima 30000 Thailand; ^b Department of Chemistry, Hong Kong University of Science and Technology, Clear Water Bay, Kowloon, Hong Kong. e-mail addresses: ^akchainok10@yahoo.com ^{**}haller@ccs.sut.ac.th

บทคัดย่อ: โครงสร้างผลึกของสารประกอบเชิงซ้อน Cu₂Terephthalate) ศึกษาเบื้องต้นด้วย X-ray พบว่าผลึกของสารประกอบเชิงซ้อนอยู่ในระบบ Triclinic มี Space group คือ P1 ซึ่งประกอบด้วย $a = 10.791(3)$ Å, $b = 10.878(4)$ Å, $c = 14.025(3)$ Å, $\alpha = 91.920(18)^\circ$, $\beta = 89.835(17)^\circ$, $\gamma = 95.319(22)^\circ$, $V = 1638.3$ Å³ ที่อุณหภูมิ 200 องศาเซลเซียส โครงสร้างของสารประกอบประกอบด้วย 2 framework โดยที่แต่ละ framework จะเกิดเป็นโครงผลึกว่างตาข่าย 2 มิติ ของ สองอะตอมกลางคอปเปอร์และเชื่อมกันด้วย terephthalate ลิแกนด์ ซึ่งในแต่ละชั้นของโครงสร้างสารประกอบถูกเชื่อมต่อกันลักษณะเป็นสะพาน โดย bipyridine ลิแกนด์

Abstract: Preliminary x-ray structural results show a triclinic space group, *P1*, with $a = 10.791(3)$ Å, $b = 10.878(4)$ Å, $c = 14.025(3)$ Å, $\alpha = 91.920(18)^\circ$, $\beta = 89.835(17)^\circ$, $\gamma = 95.319(22)^\circ$, $V = 1638.3$ Å³ at $T = 200$ K, with two interpenetrating framework structures, each made up of a two dimensional network of copper dimer centers interconnected by terephthalate ligands. Alternate layers are bridged by bipyridine ligands.

Experimental: Prepared by solvothermal synthesis from copper sulfate, bipyridine, and terephthalic acid in ethanol. *Crystal data:* Blue; network composition: [Cu₂(C₈H₆O₄)₂(C₁₀H₈N₂)₂]_n; triclinic, *P1* (No. 1); $a = 10.791(3)$ Å, $b = 10.878(4)$ Å, $c = 14.025(3)$ Å, $\alpha = 91.920(18)^\circ$, $\beta = 89.835(17)^\circ$, $\gamma = 95.319(22)^\circ$, $V = 1638.3$ Å³; $Z = 2$; $D_{calc} = 1.240$ Mg/m³ (network only); Enraf-Nonius KappaCCD diffractometer, 0.3 mm *itg* capillary focusing collimator, $\lambda_{MoK\alpha} = 0.71073$ Å; Oxford Instruments cryosystem, $T = 200$ K; total data collected, 5,522, unique data 2,748; $R_{int} = 0.0937$; 1929 observed $I > 2\sigma(I)$

Results, Discussion and Conclusion: The current coordination polymer was prepared in our studies of chemically functionalizable nanoporous materials. Previous preparations using trimesic acid (1), or copper nitrate instead of copper sulfate (2), gave related open framework coordination polymers. The basic coordination units in the trimesic acid system, [Cu₂(μ-O₂CR)₃(H₂O)₂], are paddle-wheels about a Cu^I-Cu^{II} axis with approximate 4-fold symmetry. Similar solvothermal synthesis starting from copper nitrate with the difunctional terephthalic acid (TPA) and bipyridine (bipy) ligands was expected to form a similar paddle-wheel system, but was missing one paddle, giving [Cu₂(μ-O₂CR)₃L₂] Cu^I-Cu^{II} T-shaped units. Solvothermal synthesis changing copper nitrate to copper sulfate yields the expected paddle-wheel system shown below. Layers of interconnected [Cu₂(μ-O₂CR)₄] units form perpendicular to [0 0 1]. Layers are bridged by pyridine ligand

which space the bridged layers such that a third layer fits between them. Thus, adjacent layers are in different interpenetrating networks. The content of the large pores visible along [0 0 1] has not been determined.

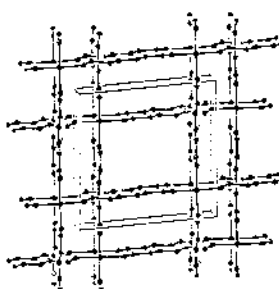


Figure. View along [0 0 1] including coordination polymer network from two unit cells along each cell axis. Layers 1 and 3 are in one network and layers 2 and 4 are in the second. The two networks interpenetrate

- ← layer 1 inside the indicated cell
- ← layer 2 above the indicated cell
- ← layers 1 and 3 are bridged by bipy
- ← layer 2 inside the indicated cell
- ← layer 4 above the indicated cell
- ← layers 2 and 4 are bridged by bipy

References:

1. Chui, S. S.-Y.; Lo, S. M.-F.; Charmant, J. P. H.; Orpen, A. G.; Williams, I. D. (1999) *Science* 283, 1148-1150.
2. Lo, S. M.-F.; Chui, S. S.-Y.; Shek, L.-Y.; Lin, Z.; Zhang, X. X.; Wen, G.-H.; Williams, I. D. (2000) *J. Am. Chem. Soc.* 122, 6293-6294.

Keywords: copper, coordination polymer, crystallography, supramolecular structure