

บทที่ 5

สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง

ผลของการวิจัยเพื่อหาโครงสร้างของผลึก $(C_6H_5)_2 TlBrC_{12}H_8N_2$ ด้วยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์พบว่า ข้อมูลเบื้องต้นทั่วไปของผลึกที่จะนำไปใช้ในการคำนวณโครงสร้างหรือตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ของผลึกภายในหนึ่งหน่วยเซลล์ได้รวบรวมไว้ตามตารางที่ 5.1

ตารางที่ 5.1 แสดงข้อมูลทั่วไปของผลึก $(C_6H_5)_2 TlBrC_{12}H_8N_2$

ระบบผลึก	ทริกโกนัล
หมู่สมมาตรสามมิติ	$P 3_1 21$
มิติของหน่วยเซลล์ (ทริกโกนัล)	$a = 10.013 \pm 0.001 \text{ \AA}$ $c = 18.387 \pm 0.004 \text{ \AA}$
μ -สัมประสิทธิ์การดูดกลืนตามเส้นสำหรับรังสีเอ็กซ์ชนิด $Cu K_\alpha$	$168.7 (\text{cm}^{-1})^{-1}$
D_m - ความหนาแน่นหาโดยวิธีการลอยตัวของผลึกในของเหลวคาร์บอนเตตราคลอไรด์ซึ่งมีความหนาแน่น $1.60 \text{ กรัม (cm}^{-3})$ ที่ $25^\circ C$	$1.89 \text{ กรัม (cm}^{-3})^{-3}$
D_x	$1.93 \text{ กรัม (cm}^{-3})^{-3}$
Z - จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์	3 หน่วยสูตร/หน่วยเซลล์

ในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึกประกอบด้วย 3 หน่วย อลิ้มมาตรโดยในหนึ่งหน่วย
 อลิ้มมาตรประกอบด้วย Tl , Br , N₁, C₂, C₃, C₄, C₅, C₁₂; C₁₃, C₁₅, C₁₆,
 C₁₇, C₁₈, C₁₉ และ C₂₀ ดังแสดงในรูปที่ 5.1

หลังจากการคำนวณโครงสร้างหรือตำแหน่งอะตอมจากข้อมูลความเข้ม 247 จุด
 สะท้อน และปรับตำแหน่งอะตอมอย่างละเอียดแล้วได้ค่าดัชนีแห่งความเชื่อถือเป็น 0.111
 ส่วนตำแหน่งอะตอมแสดงตามตารางที่ 5.2

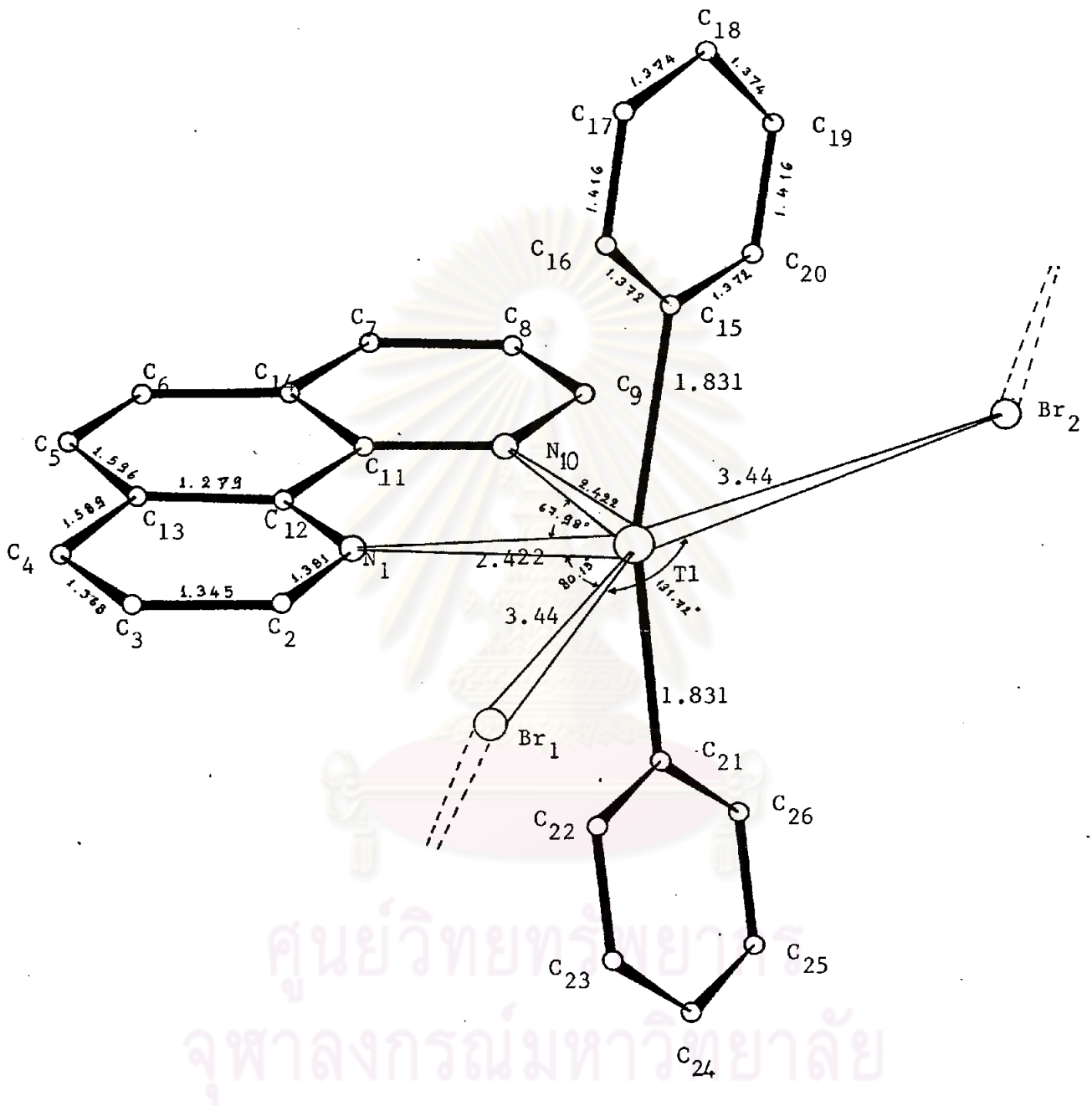
ตารางที่ 5.2 แสดงตำแหน่งอะตอมในหนึ่งหน่วย อลิ้มมาตรของผลึก (C₆H₅)₂

TlBrC₁₂H₈N₂ หลังจากปรับตำแหน่งอะตอม

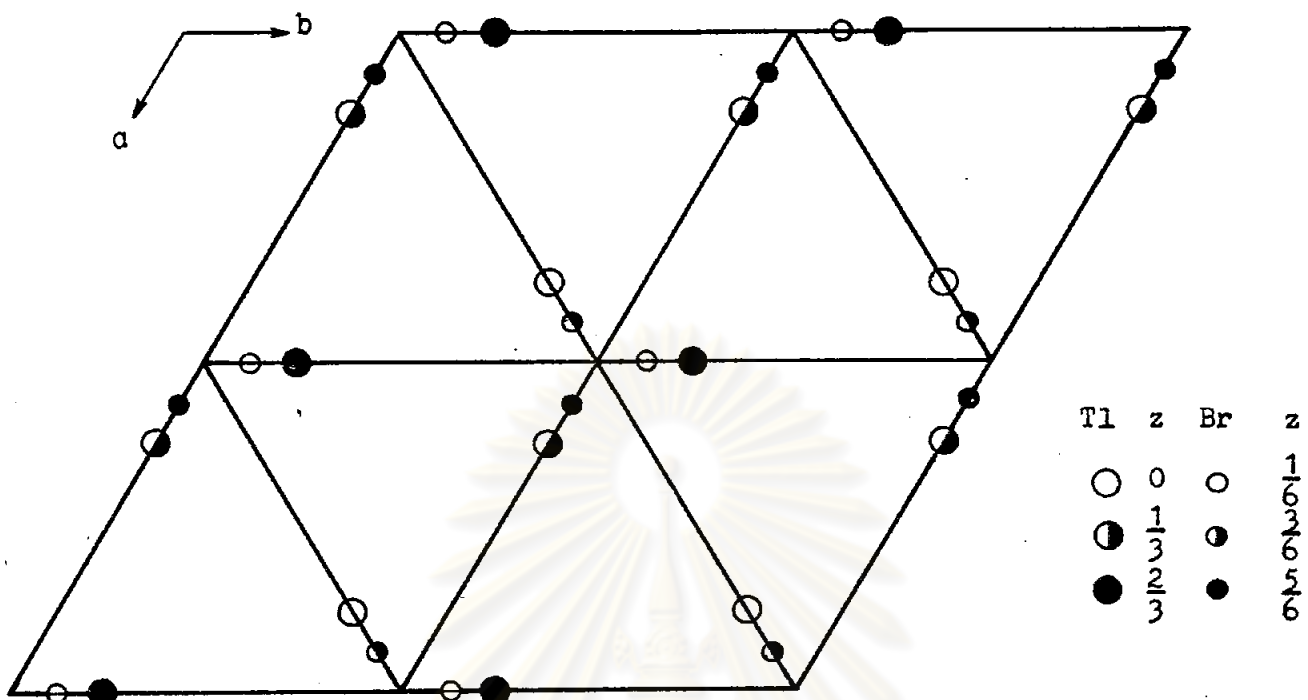
อะตอม	ตำแหน่งในหน่วย ลิ้มมาตรสามมิติ	ตำแหน่งอะตอมในหน่วยเซลล์		
		x	y	z
Tl	3a	0.1013(5)	0.0	$\frac{1}{3}$
Br	3b	0.0	0.0784(13)	$\frac{1}{6}$
N ₁	6c	0.319	0.035	0.262
C ₂	6c	0.319	0.069	0.189
C ₃	6c	0.437	0.090	0.146
C ₄	6c	0.555	0.076	0.176
C ₅	6c	0.691	0.017	0.297
C ₁₂	6c	0.441	0.019	0.294

ตารางที่ 5.2 (ต่อ)

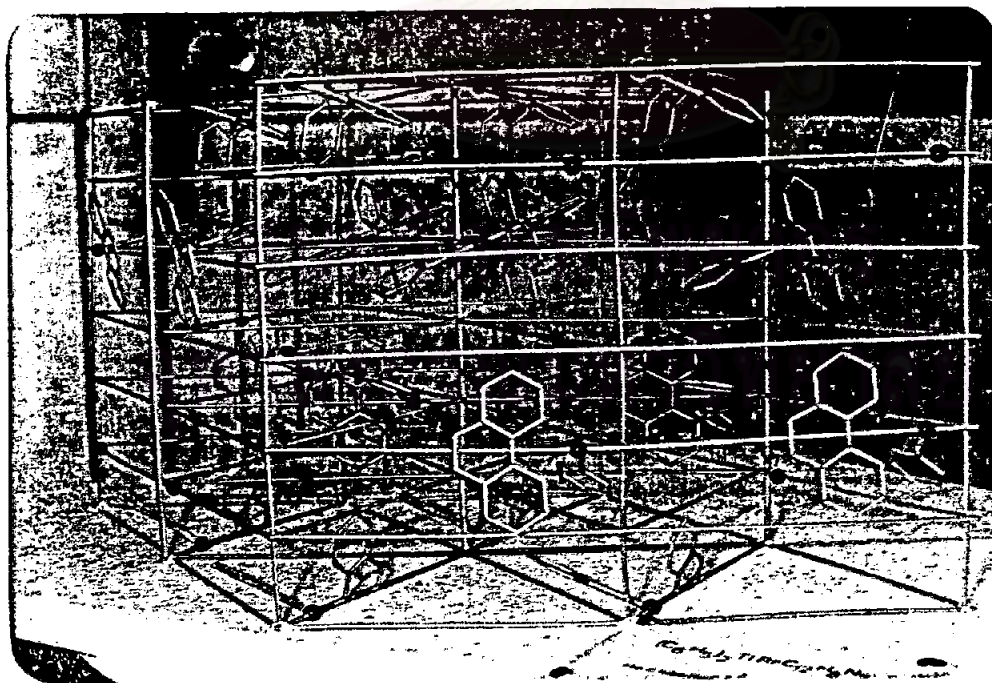
อะตอม	ตำแหน่งในหมู่ สัมมาตราบสามมิติ	ตำแหน่งอะตอมในหน่วยเซลล์		
		x	y	z
C ₁₃	6c	0.559	0.036	0.259
C ₁₅	6c	0.180	0.200	0.363
C ₁₆	6c	0.319	0.280	0.398
C ₁₇	6c	0.400	0.444	0.399
C ₁₈	6c	0.342	0.524	0.363
C ₁₉	6c	0.203	0.444	0.328
C ₂₀	6c	0.122	0.280	0.328
H ₁	6c	0.224	0.083	0.160
H ₂	6c	0.437	0.118	0.088
H ₃	6c	0.549	0.090	0.146
H ₄	6c	0.784	0.031	0.268
H ₉	6c	0.390	0.216	0.426
H ₁₀	6c	0.547	0.505	0.426
H ₁₁	6c	0.403	0.647	0.363
H ₁₂	6c	0.187	0.505	0.300
H ₁₃	6c	-0.030	0.216	0.300



รูปที่ 5.1 แสดงโครงสร้าง โมเลกุล ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$



รูปที่ 5.2 แสดงตำแหน่งอะตอม Tl และ Br ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ ภายใน 4 หน่วยเซลล์เมื่อฉายลงไปตามแกน Z



รูปที่ 5.3 แสดงแบบจำลอง 4 หน่วยเซลล์ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$

ตารางที่ 5.3 แสดงความยาวพันธะของอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วยเซลล์

อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)	อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)
Tl - Br	3.440 [*] (5)	Br - N ₁	3.853 (7)
- N ₁	2.422 [*] (4)	- C ₂	3.267 (7)
- C ₂	3.284 (3)	- C ₃	4.334 (6)
- C ₃	4.576 (3)	- C ₄	5.568 (6)
- C ₄	5.114 (5)	- C ₅	7.636 (6)
- C ₅	5.862 (6)	- C ₁₂	5.286 (6)
- C ₁₂	3.389 (5)	- C ₁₃	6.062 (6)
- C ₁₃	4.620 (5)	- C ₁₅	3.946 (1)
- C ₁₅	1.831 [*] (1)	- C ₁₆	5.096 (5)
- C ₁₆	2.818 (1)	- C ₁₇	5.741 (4)
- C ₁₇	4.103 (1)	- C ₁₈	5.423 (4)
- C ₁₈	4.585 (1)	- C ₁₉	4.339 (8)
- C ₁₉	4.032 (2)	- C ₂₀	3.445 (5)
- C ₂₀	2.714 (2)	N ₁ - C ₂	1.381 [*] (7)
C ₂ - C ₃	1.345 [*] (7)	- C ₃	2.357 (7)
- C ₄	2.338 (8)	- C ₄	2.693 (7)
- C ₅	4.482 (8)	- C ₅	3.873 (8)
- C ₁₂	2.467 (8)	- C ₁₂	1.434 (8)
- C ₁₃	2.886 (8)	- C ₁₃	2.393 (8)

* คือ ความยาวของพันธะแสดงดังรูป 5.1

ตารางที่ 5.3 (ต่อ)

อะตอม	ความยาวพันธะ(Å)	อะตอม	ความยาวพันธะ(Å)
- C ₁₅	3.966 (1)	- C ₁₅	3.237 (8)
- C ₁₆	4.396 (1)	- C ₁₆	3.523 (7)
- C ₁₇	5.150 (7)	- C ₁₇	4.524 (7)
- C ₁₈	5.478 (8)	- C ₁₈	5.144 (8)
- C ₁₉	5.123 (8)	- C ₁₉	4.935 (8)
- C ₂₀	4.366 (8)	- C ₂₀	4.040 (8)
C ₄ - C ₅	2.835 (8)	C ₃ - C ₄	1.368*(8)
- C ₁₂	2.388 (7)	- C ₅	4.077 (8)
- C ₁₃	1.589*(7)	- C ₁₂	2.815 (1)
- C ₁₅	5.671 (8)	- C ₁₃	2.597 (8)
- C ₁₆	5.604 (8)	- C ₁₅	5.156 (8)
- C ₁₇	6.201 (8)	- C ₁₆	5.369 (8)
- C ₁₈	6.787 (8)	- C ₁₇	5.961 (8)
- C ₁₉	6.834 (8)	- C ₁₈	6.314 (8)
- C ₂₀	6.299 (8)	- C ₁₉	6.118 (8)
C ₁₂ - C ₁₃	1.279*(7)	- C ₂₀	5.547 (8)
- C ₁₅	4.058 (8)	C ₅ - C ₁₂	2.517 (8)
- C ₁₆	3.906 (8)	- C ₁₃	1.596*(8)
- C ₁₇	4.867 (8)	- C ₁₅	6.356 (8)
- C ₁₈	5.763 (8)	- C ₁₆	5.844 (9)
- C ₁₉	5.853 (9)	- C ₁₇	6.529 (9)
- C ₂₀	5.082 (9)	- C ₁₈	7.563 (9)

ตารางที่ 5.3 (ต่อ)

อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)	อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)
$C_{15} - C_{16}$	1.372* (6)	- C_{19}	7.955 (9)
- C_{17}	2.422 (5)	- C_{20}	7.404 (9)
- C_{18}	2.813 (6)	$C_{13} - C_{15}$	5.195 (8)
- C_{19}	2.422 (8)	- C_{16}	4.925 (8)
- C_{20}	1.372* (8)	- C_{17}	5.681 (8)
$C_{16} - C_{17}$	1.416* (6)	- C_{18}	6.551 (8)
- C_{18}	2.423 (8)	- C_{19}	6.744 (9)
- C_{19}	2.756 (8)	- C_{20}	6.121 (9)
- C_{20}	2.363 (8)	$C_{18} - C_{19}$	1.374* (6)
$C_{17} - C_{18}$	1.374* (8)	- C_{20}	2.423 (5)
- C_{19}	2.365 (8)	$C_{19} - C_{20}$	1.416 (6)
- C_{20}	2.756 (6)		

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



ตารางที่ 5.4 แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ในโครงสร้างหน่วยเซลล์มาตรฐาน

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$Br_1-Tl-Br_2$	131.72 [*]	0.39	N_1-Tl-C_{19}	96.57	0.03
$-N_1$	80.15 [*]	0.08	$-C_{20}$	103.58	0.05
$-C_2$	58.09	0.08	C_2-Tl-C_3	5.53	0.02
$-C_3$	63.62	0.09	$-C_{12}$	43.36	0.06
$-C_{12}$	101.44	0.10	$-C_{13}$	38.34	0.06
$-C_{13}$	96.42	0.10	$-C_{15}$	97.62	0.08
$-C_{15}$	91.76	0.21	$-C_{16}$	91.84	0.09
$-C_{16}$	108.65	0.17	$-C_{17}$	87.66	0.05
$-C_{17}$	98.74	0.17	$-C_{18}$	86.59	0.03
$-C_{18}$	83.74	0.18	$-C_{19}$	88.27	0.01
$-C_{19}$	70.50	0.20	$-C_{20}$	92.94	0.02
$-C_{20}$	66.90	0.20	C_3-Tl-C_{12}	37.82	0.03
N_1-Tl-C_2	22.06	0.01	$-C_{13}$	32.81	0.03
$-C_3$	16.53	0.02	$-C_{15}$	97.87	0.01
$-C_{12}$	21.29	0.05	$-C_{16}$	89.89	0.08
$-C_{13}$	16.27	0.05	$-C_{17}$	86.57	0.06
$-C_{15}$	98.17	0.13	$-C_{18}$	87.14	0.04
$-C_{16}$	84.11	0.11	$-C_{19}$	90.37	0.03
$-C_{17}$	83.52	0.07	$-C_{20}$	95.69	0.04
$-C_{18}$	88.91	0.05	$C_{12}-Tl-C_{13}$	5.02	0.00

* คือ มุมระหว่างพันธะแสดงดังรูป 5.3 และ 5.7

ตารางที่ 5.4. (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
-C ₁₅	97.56	0.16	C ₁₇ -Tl-C ₁₈	17.06	0.00
-C ₁₆	77.38	0.10	-C ₁₉	33.79	0.00
-C ₁₇	80.40	0.07	-C ₂₀	41.78	0.02
-C ₁₈	91.30	0.06	C ₁₈ -Tl-C ₁₉	16.82	0.00
-C ₁₉	103.78	0.06	-C ₂₀	25.21	0.03
-C ₂₀	112.30	0.09	C ₁₉ -Tl-C ₂₀	8.97	0.03
C ₁₃ -Tl-C ₁₅	97.80	0.15	Tl-Br-N ₁	38.27	0.10
-C ₁₆	78.85	0.10	-C ₂	58.57	0.13
-C ₁₇	81.03	0.07	-C ₃	71.07	0.14
-C ₁₈	90.74	0.06	-C ₁₃	105.31	0.06
-C ₁₉	102.20	0.06	-C ₁₅	27.63	0.02
-C ₂₀	110.45	0.09	-C ₁₆	41.50	0.12
C ₁₅ -Tl-C ₁₆	24.21	0.06	-C ₁₉	61.15	0.07
-C ₁₇	17.55	0.09	-C ₂₀	46.42	0.03
-C ₁₈	11.32	0.03	N ₁ -Br-C ₂	20.30	0.04
-C ₁₉	21.42	0.05	-C ₃	32.79	0.05
-C ₂₀	27.25	0.05	-C ₁₅	49.03	0.04
C ₁₆ -Tl-C ₁₇	10.03	0.01	-C ₁₉	73.82	0.03
-C ₁₈	26.68	0.02	-C ₂₀	66.94	0.03
-C ₁₉	43.06	0.02	C ₂ -Br-C ₃	12.50	0.01
-C ₂₀	50.54	0.01	-C ₁₅	65.94	0.04

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$-C_{19}$	83.40	0.05	$-C_3$	84.88	0.02
$-C_{20}$	81.11	0.01	$-C_4$	115.39	0.02
C_3-Br-C_{15}	76.87	0.06	$-C_5$	162.44	0.01
$-C_{19}$	89.73	0.02	$-C_{12}$	177.55	0.03
$-C_{20}$	90.21	0.03	$-C_{13}$	151.17	0.01
$C_{15}-Br-C_{19}$	33.57	0.05	$-C_{15}$	66.97	0.11
$-C_{20}$	19.95	0.01	$-C_{16}$	87.29	0.13
$C_{19}-Br-C_{20}$	16.33	0.06	$-C_{17}$	86.13	0.15
$Tl-N_1-Br$	61.58	0.07	$-C_{19}$	57.60	0.15
$-C_2$	116.72 *	0.07	$-C_{20}$	51.70	0.13
$-C_3$	146.46	0.07	$C_2-N_1-C_3$	29.74	0.01
$-C_4$	176.96	0.07	$-C_4$	60.24	0.01
$-C_5$	135.98	0.07	$-C_5$	107.29	0.00
$-C_{12}$	120.86 *	0.07	$-C_{12}$	122.42 *	0.00
$-C_{13}$	147.25	0.07	$-C_{13}$	96.03	0.00
$-C_{15}$	34.04	0.00	$-C_{15}$	111.95	0.01
$-C_{16}$	52.73	0.02	$-C_{16}$	120.95	0.01
$-C_{17}$	64.33	0.01	$-C_{17}$	109.41	0.01
$-C_{19}$	54.25	0.02	$-C_{19}$	89.90	0.01
$-C_{20}$	40.77	0.03	$-C_{20}$	94.30	0.01
$Br-N_1-C_2$	55.14	0.01	$C_3-N_1-C_4$	30.51	0.00

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$-C_5$	77.56	0.01	$-C_{20}$	138.70	0.00
$-C_{12}$	92.68	0.01	$C_{12}-N_1-C_{13}$	26.39	0.01
$-C_{13}$	66.30	0.00	$-C_{15}$	115.08	0.01
$-C_{15}$	133.74	0.00	$-C_{16}$	94.48	0.01
$-C_{16}$	130.88	0.01	$-C_{17}$	95.17	0.01
$-C_{17}$	116.49	0.01	$-C_{19}$	123.64	0.01
$-C_{19}$	108.87	0.00	$-C_{20}$	130.07	0.01
$-C_{20}$	117.84	0.00	$C_{13}-N_1-C_{15}$	134.12	0.00
$C_4-N_1-C_5$	47.05	0.01	$-C_{16}$	111.27	0.00
$-C_{12}$	62.18	0.01	$-C_{17}$	106.32	0.00
$-C_{13}$	35.79	0.01	$-C_{19}$	130.66	0.00
$-C_{15}$	145.85	0.00	$-C_{20}$	142.92	0.00
$-C_{16}$	128.25	0.01	$C_{15}-N_1-C_{16}$	22.92	0.00
$-C_{17}$	116.15	0.01	$-C_{17}$	31.10	0.00
$-C_{19}$	124.60	0.00	$-C_{19}$	24.95	0.00
$-C_{20}$	137.78	0.00	$-C_{20}$	17.71	0.00
$C_5-N_1-C_{12}$	15.12	0.00	$C_{16}-N_1-C_{17}$	14.41	0.00
$-C_{13}$	11.26	0.00	$-C_{19}$	32.97	0.00
$-C_{15}$	126.51	0.01	$-C_{20}$	35.59	0.00
$-C_{16}$	104.32	0.01	$C_{17}-N_1-C_{19}$	28.54	0.00
$-C_{17}$	101.80	0.00	$-C_{20}$	37.00	0.00
$-C_{19}$	128.75	0.00	$C_{19}-N_1-C_{20}$	14.11	0.00

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
Tl-C ₂ -Br	63.34	0.08	-C ₁₂	29.38	0.00
-N ₁	41.21	0.07	-C ₁₃	55.55	0.00
-C ₃	160.86	0.07	-C ₁₅	49.20	0.01
-C ₄	130.12	0.07	-C ₁₆	43.42	0.01
-C ₅	96.81	0.08	-C ₂₀	67.31	0.01
-C ₁₂	70.59	0.08	C ₃ -C ₂ -C ₄	30.74	0.00
-C ₁₃	96.76	0.08	-C ₅	64.05	0.01
-C ₁₅	27.22	0.01	-C ₁₂	90.27	0.01
-C ₁₆	39.85	0.03	-C ₁₃	64.10	0.01
-C ₂₀	38.37	0.04	-C ₁₅	147.97	0.00
Br-C ₂ -N ₁	104.56	0.03	-C ₁₆	130.63	0.01
-C ₃	135.80	0.03	-C ₂₀	147.38	0.00
-C ₄	166.53	0.03	C ₄ -C ₂ -C ₅	33.31	0.01
-C ₅	160.15	0.03	-C ₁₂	59.53	0.01
-C ₁₂	133.94	0.03	-C ₁₃	33.36	0.01
-C ₁₃	160.11	0.03	-C ₁₅	126.24	0.00
-C ₁₅	65.29	0.07	-C ₁₆	108.79	0.00
-C ₁₆	81.95	0.09	-C ₂₀	137.91	0.00
-C ₂₀	51.23	0.11	C ₅ -C ₂ -C ₁₂	26.22	0.00
N ₁ -C ₂ -C ₃	119.65*	0.01	-C ₁₃	0.09	0.00
-C ₄	88.91	0.00	-C ₁₅	97.41	0.01
-C ₅	55.60	0.00	-C ₁₆	82.34	0.01

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

หมู่	องศา	σ	หมู่	องศา	σ
-C ₂₀	113.61	0.01	-C ₅	130.40	0.04
C ₁₂ -C ₂ -C ₁₃	26.17	0.00	-C ₁₂	92.90	0.04
-C ₁₅	74.15	0.01	-C ₁₃	119.85	0.04
-C ₁₆	62.09	0.01	N ₁ -C ₃ -C ₄	88.47	0.01
-C ₂₀	91.81	0.01	-C ₅	68.08	0.01
C ₁₃ -C ₂ -C ₁₅	97.36	0.01	-C ₁₂	30.58	0.01
-C ₁₆	82.30	0.01	-C ₁₃	57.52	0.01
-C ₂₀	113.57	0.01	C ₂ -C ₃ -C ₄	119.09*	0.01
C ₁₅ -C ₂ -C ₁₆	17.96	0.00	-C ₅	98.69	0.01
-C ₂₀	18.15	0.00	-C ₁₂	61.19	0.01
C ₁₆ -C ₂ -C ₂₀	31.29	0.00	-C ₁₃	88.14	0.01
Tl-C ₃ -Br	45.32	0.06	C ₄ -C ₃ -C ₅	20.40	0.00
-N ₁	17.01	0.05	-C ₁₂	57.89	0.00
-C ₂	13.61	0.05	-C ₁₃	30.95	0.00
-C ₄	105.48	0.05	C ₅ -C ₃ -C ₁₂	37.50	0.00
-C ₅	85.08	0.05	-C ₁₃	10.55	0.00
-C ₁₂	47.58	0.05	C ₁₂ -C ₃ -C ₁₃	26.95	0.00
-C ₁₃	74.53	0.05	N ₁ -C ₄ -C ₂	30.85	0.00
Br-C ₃ -N ₁	62.33	0.04	-C ₃	61.02	0.01
-C ₂	31.71	0.04	-C ₅	88.91	0.01
-C ₄	150.80	0.04	-C ₁₂	32.07	0.00

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
-C ₁₃	61.75	0.01	-C ₁₂	42.91	0.01
C ₂ -C ₄ -C ₃	30.18	0.01	-C ₁₃	17.34	0.00
-C ₅	119.75	0.01	C ₄ -C ₅ -C ₁₂	52.59	0.01
-C ₁₂	62.91	0.00	-C ₁₃	27.02	0.00
-C ₁₃	92.60	0.00	C ₁₂ -C ₅ -C ₁₃	25.57	0.00
C ₃ -C ₄ -C ₅	149.93	0.00	T1-C ₁₂ -N ₁	37.85	0.02
-C ₁₂	93.09	0.01	-C ₂	66.05	0.02
-C ₁₃	122.78*	0.00	-C ₃	94.59	0.02
C ₅ -C ₄ -C ₁₂	56.84	0.01	-C ₄	123.61	0.02
-C ₁₃	27.15	0.00	-C ₅	165.82	0.02
C ₁₂ -C ₄ -C ₁₃	29.69	0.01	-C ₁₃	161.58	0.02
N ₁ -C ₅ -C ₂	17.11	0.00	-C ₁₅	26.56	0.00
-C ₃	34.37	0.00	-C ₁₆	44.76	0.01
-C ₄	44.04	0.00	-C ₁₇	56.23	0.00
-C ₁₂	8.55	0.00	N ₁ -C ₁₂ -C ₂	28.20	0.00
-C ₁₃	17.03	0.00	-C ₃	56.74	0.00
C ₂ -C ₅ -C ₃	17.26	0.00	-C ₄	85.76	0.01
-C ₄	26.93	0.00	-C ₅	156.33	0.00
-C ₁₂	25.66	0.00	-C ₁₃	123.73*	0.01
-C ₁₃	0.12	0.00	-C ₁₅	46.26	0.01
C ₃ -C ₅ -C ₄	9.68	0.00	-C ₁₆	64.05	0.01

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$-C_{17}$	67.77	0.01	$-C_{15}$	149.46	0.00
$C_2-C_{12}-C_3$	28.54	0.00	$-C_{16}$	129.74	0.00
$-C_4$	57.55	0.01	$-C_{17}$	120.98	0.00
$-C_5$	128.13	0.01	$C_{13}-C_{12}-C_{15}$	148.90	0.00
$-C_{13}$	95.53	0.01	$-C_{16}$	137.49	0.00
$-C_{15}$	70.07	0.01	$-C_{17}$	123.95	0.00
$-C_{16}$	83.99	0.01	$C_{15}-C_{12}-C_{16}$	19.72	0.00
$-C_{17}$	82.22	0.01	$-C_{17}$	19.76	0.00
$C_3-C_{12}-C_4$	29.02	0.01	$C_{16}-C_{12}-C_{17}$	13.70	0.00
$-C_5$	99.59	0.00	$T1-C_{13}-N_1$	16.48	0.02
$-C_{13}$	66.99	0.01	$-C_2$	44.90	0.02
$-C_{15}$	95.50	0.01	$-C_3$	72.66	0.02
$-C_{16}$	104.89	0.01	$-C_4$	98.94	0.02
$-C_{17}$	98.22	0.01	$-C_5$	135.23	0.02
$C_4-C_{12}-C_5$	70.57	0.00	$-C_{12}$	13.41	0.02
$-C_{13}$	37.97	0.00	$-C_{16}$	34.16	0.01
$-C_{15}$	121.02	0.00	$N_1-C_{13}-C_2$	28.42	0.01
$-C_{16}$	124.07	0.00	$-C_3$	56.18	0.01
$-C_{17}$	112.95	0.01	$-C_4$	82.46	0.00
$C_5-C_{12}-C_{13}$	32.60	0.01	$-C_5$	151.71	0.01

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$-C_{12}$	29.88	0.01	$-C_{18}$	161.34	0.06
$-C_{16}$	41.80	0.00	$-C_{19}$	142.55	0.08
$C_2-C_{13}-C_3$	27.76	0.00	$-C_{20}$	115.09*	0.12
$-C_4$	54.04	0.00	$Br-C_{15}-N_1$	64.00	0.14
$-C_5$	179.87	0.00	$-C_2$	48.78	0.11
$-C_{12}$	58.30	0.01	$-C_{12}$	82.65	0.14
$-C_{16}$	62.19	0.01	$-C_{16}$	141.92	0.01
$C_3-C_{13}-C_4$	26.28	0.00	$-C_{17}$	127.08	0.12
$-C_5$	152.11	0.00	$-C_{18}$	105.50	0.16
$-C_{12}$	86.07	0.01	$-C_{19}$	82.16	0.18
$-C_{16}$	85.14	0.01	$-C_{20}$	58.98	0.18
$C_4-C_{13}-C_5$	125.83*	0.00	$N_1-C_{15}-C_2$	18.84	0.00
$-C_{12}$	112.34*	0.01	$-C_{12}$	18.66	0.00
$-C_{16}$	107.22	0.01	$-C_{16}$	90.31	0.01
$C_5-C_{13}-C_{12}$	121.83*	0.01	$-C_{17}$	105.23	0.00
$-C_{16}$	117.91	0.01	$-C_{18}$	116.32	0.00
$C_{12}-C_{13}-C_{16}$	32.41	0.00	$-C_{19}$	120.74	0.01
$Tl-C_{15}-Br$	60.61	0.19	$-C_{20}$	116.45	0.01
$-N_1$	47.79	0.13	$C_2-C_{15}-C_{12}$	35.79	0.00
$-C_2$	55.16	0.09	$-C_{16}$	99.03	0.01
$-C_{12}$	55.88	0.16	$-C_{17}$	104.57	0.00
$-C_{16}$	122.62*	0.15	$-C_{18}$	106.59	0.00
$-C_{17}$	149.27	0.16	$-C_{19}$	104.00	0.01

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$-C_{20}$	97.66	0.01	$-C_{18}$	121.85	0.07
$C_{12}-C_{15}-C_{16}$	73.85	0.01	$-C_{19}$	92.65	0.08
$-C_{17}$	93.94	0.00	$-C_{20}$	62.44	0.08
$-C_{18}$	112.76	0.00	$N_1-C_{16}-C_2$	15.63	0.00
$-C_{19}$	127.32	0.00	$-C_{12}$	21.44	0.00
$-C_{20}$	132.18	0.01	$-C_{13}$	26.93	0.00
$C_{16}-C_{15}-C_{17}$	30.22	0.00	$-C_{15}$	66.77	0.01
$-C_{18}$	59.45	0.00	$-C_{17}$	127.32	0.01
$-C_{19}$	88.68	0.00	$-C_{18}$	118.65	0.01
$-C_{20}$	118.90*	0.00	$-C_{19}$	102.96	0.01
$C_{17}-C_{15}-C_{18}$	29.23	0.00	$-C_{20}$	84.22	0.01
$-C_{19}$	58.46	0.00	$C_2-C_{16}-C_2$	33.93	0.00
$-C_{20}$	88.68	0.00	$-C_{13}$	35.50	0.00
$C_{18}-C_{15}-C_{19}$	29.23	0.00	$-C_{15}$	63.01	0.01
$-C_{20}$	59.45	0.00	$-C_{17}$	114.68	0.00
$C_{19}-C_{15}-C_{20}$	30.22	0.00	$-C_{18}$	103.08	0.01
$T1-C_{16}-N_1$	43.16	0.08	$-C_{19}$	88.40	0.01
$-C_2$	48.31	0.06	$-C_{20}$	73.67	0.01
$-C_{12}$	57.86	0.10	$C_{12}-C_{16}-C_{13}$	10.11	0.00
$-C_{13}$	66.99	0.10	$-C_{15}$	86.43	0.01
$-C_{15}$	33.17	0.09	$-C_{17}$	125.53	0.00
$-C_{17}$	149.71	0.05	$-C_{18}$	129.69	0.01

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$-C_{19}$	121.99	0.01	$-C_{20}$	41.00	0.06
$-C_{20}$	105.68	0.01	$N_1-C_{17}-C_{12}$	17.06	0.00
$C_{13}-C_{16}-C_{15}$	93.64	0.01	$-C_{15}$	43.67	0.00
$-C_{17}$	115.56	0.00	$-C_{16}$	38.26	0.01
$-C_{18}$	122.41	0.01	$-C_{18}$	109.33	0.01
$-C_{19}$	120.14	0.01	$-C_{19}$	85.44	0.01
$-C_{20}$	109.14	0.01	$-C_{20}$	61.91	0.00
$C_{15}-C_{16}-C_{17}$	120.59*	0.00	$C_{12}-C_{17}-C_{15}$	56.29	0.00
$-C_{18}$	91.36	0.00	$-C_{16}$	40.77	0.00
$-C_{19}$	61.47	0.00	$-C_{18}$	124.83	0.01
$-C_{20}$	30.55	0.00	$-C_{19}$	102.47	0.01
$C_{17}-C_{16}-C_{18}$	29.23	0.00	$C_{15}-C_{17}-C_{16}$	29.19	0.00
$-C_{19}$	59.12	0.00	$-C_{18}$	91.37	0.00
$-C_{20}$	90.04	0.00	$-C_{19}$	60.77	0.00
$C_{18}-C_{16}-C_{19}$	29.90	0.00	$-C_{20}$	29.85	0.00
$-C_{20}$	60.81	0.00	$C_{16}-C_{17}-C_{18}$	120.56*	0.00
$C_{19}-C_{16}-C_{20}$	30.92	0.00	$-C_{19}$	89.96	0.00
$T1-C_{17}-N_1$	32.15	0.06	$-C_{20}$	59.04	0.00
$-C_{12}$	43.36	0.07	$C_{18}-C_{17}-C_{19}$	30.60	0.00
$-C_{15}$	13.18	0.07	$-C_{20}$	61.52	0.00
$-C_{16}$	20.27	0.04	$C_{19}-C_{17}-C_{20}$	30.92	0.00
$-C_{18}$	101.74	0.00	$C_{15}-C_{18}-C_{16}$	29.19	0.00
$-C_{19}$	71.44	0.06	$-C_{17}$	59.40	0.00



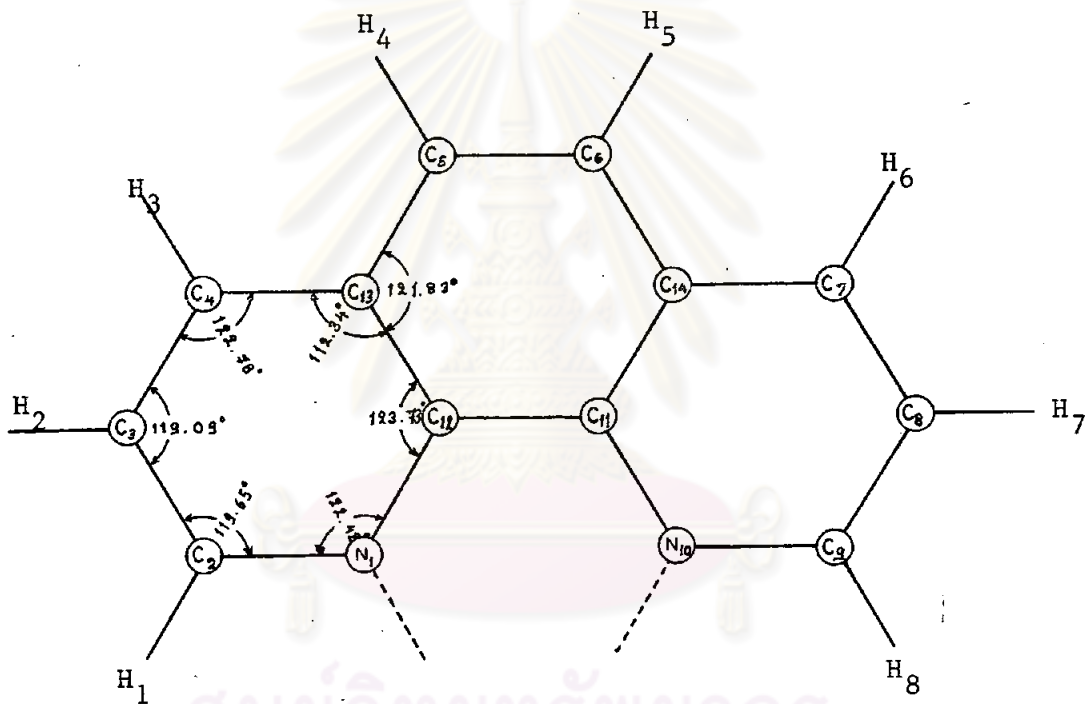
ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

หมู่	องค์ค่า	σ	หมู่	องค์ค่า	σ
-C ₁₉	59.40	0.00	N ₁ -C ₁₉ -C ₁₅	34.32	0.01
-C ₂₀	29.19	0.00	-C ₁₆	44.07	0.01
C ₁₆ -C ₁₈ -C ₁₇	30.21	0.00	-C ₁₇	66.02	0.01
-C ₁₉	88.59	0.00	-C ₁₈	90.93	0.00
-C ₂₀	58.37	0.00	-C ₂₀	44.05	0.00
C ₁₇ -C ₁₈ -C ₁₉	118.80*	0.00	C ₁₅ -C ₁₉ -C ₁₆	29.85	0.00
-C ₂₀	88.59	0.00	-C ₁₇	60.77	0.00
C ₁₉ -C ₁₈ -C ₂₀	30.21	0.00	-C ₁₈	91.37	0.00
Tl-C ₁₉ -Br	48.35	0.13	-C ₂₀	29.19	0.00
-N ₁	29.18	0.06	C ₁₆ -C ₁₉ -C ₁₇	30.92	0.00
-C ₁₅	16.02	0.03	-C ₁₈	61.52	0.00
-C ₁₆	44.28	0.05	-C ₂₀	59.04	0.00
-C ₁₇	74.76	0.06	C ₁₇ -C ₁₉ -C ₁₈	30.60	0.00
-C ₁₈	105.05	0.06	-C ₂₀	89.96	0.00
-C ₂₀	17.37	0.07	C ₁₈ -C ₁₉ -C ₂₀	120.56*	0.00
Br-C ₁₉ -N ₁	48.58	0.12	Tl-C ₂₀ -Br	66.68	0.20
-C ₁₅	64.27	0.13	-N ₁	35.66	0.08
-C ₁₆	88.93	0.13	-C ₂	48.69	0.06
-C ₁₇	114.57	0.12	-C ₁₅	37.66	0.07
-C ₁₈	136.86	0.09	-C ₁₆	67.02	0.08
-C ₂₀	43.18	0.10	-C ₁₇	97.22	0.08

ตารางที่ 5.4 (ต่อ)

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
$-C_{18}$	126.30	0.09	$C_2-C_{20}-C_{15}$	64.19	0.01
$-C_{19}$	153.66	0.10	$-C_{16}$	75.04	0.01
$-C_{20}$	26.24	0.10	$-C_{17}$	89.68	0.01
$Br-C_{20}-N_1$	61.36	0.16	$-C_{18}$	103.89	0.00
$-C_2$	47.67	0.13	$-C_{19}$	114.73	0.00
$-C_{15}$	101.07	0.19	$C_{15}-C_{20}-C_{16}$	30.55	0.00
$-C_{16}$	121.54	0.16	$-C_{17}$	61.47	0.00
$-C_{17}$	135.27	0.06	$-C_{18}$	91.36	0.00
$-C_{18}$	134.35	0.08	$-C_{19}$	120.59*	0.00
$-C_{19}$	120.49	0.16	$C_{16}-C_{20}-C_{17}$	30.92	0.00
$N_1-C_{20}-C_{15}$	45.85	0.01	$-C_{18}$	60.81	0.00
$-C_{16}$	60.18	0.01	$-C_{19}$	90.04	0.00
$-C_{17}$	81.09	0.00	$C_{17}-C_{20}-C_{18}$	29.89	0.00
$-C_{18}$	102.62	0.00	$-C_{19}$	59.12	0.00
$-C_{19}$	121.84	0.00	$C_{18}-C_{20}-C_{19}$	29.23	0.00

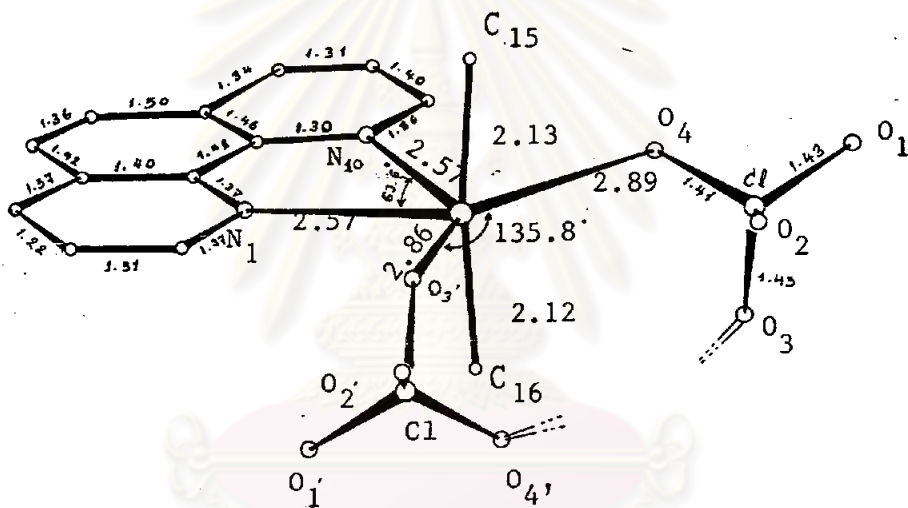
พิจารณาตำแหน่งอะตอม Tl ที่ $z = \frac{1}{3}$ พบว่าการสับพันธะของอะตอม N_1 และ N_{10} ของกลุ่ม $C_{12}H_8N_2$ กับอะตอม Tl อยู่ในระนาบเดียวกับระนาบการสับพันธะของอะตอม Tl และอะตอม Br ดังรูปที่ 5.1 โดยกลุ่ม $C_{12}H_8N_2$ เอียงเป็นมุม 12.43 องศา กับระนาบ XZ ระยะพันธะระหว่างอะตอม Tl- N_1 และอะตอม Tl- N_{10} เป็น 2.422 (4) Å มุมระหว่างอะตอม N_1 -Tl- N_{10} เป็น 67.98 องศา ลักษณะการสับพันธะของ $C_{12}H_8N_2$ แสดงดังรูปที่ 5.3



รูปที่ 5.3 แสดงลักษณะการสับพันธะของกลุ่ม $C_{12}H_8N_2$

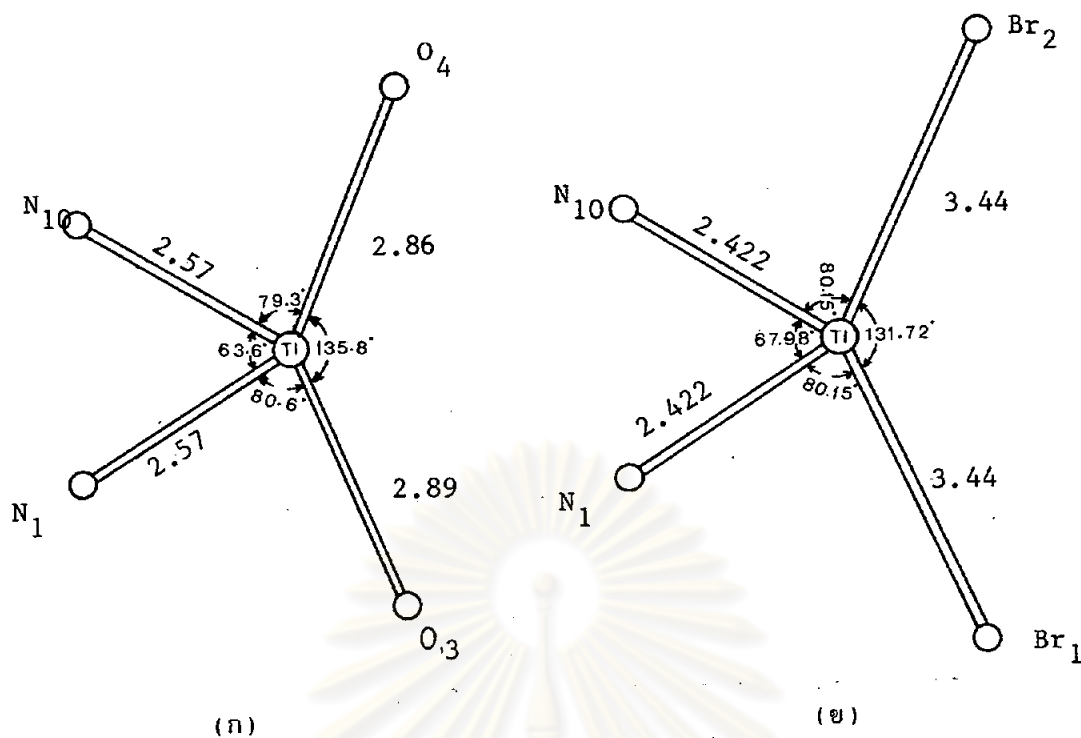
ความยาวพันธะของอะตอม Br-Tl ซึ่งอยู่ในระนาบเดียวกับกลุ่ม $C_{12}H_8N_2$ มีความยาวเป็น 3.440 (5) Å เนื่องจากมีแกนลัทธิ 3_1 ในแนวแกน c ดังนั้นอะตอมของ Br (ที่ตำแหน่ง $z = \frac{1}{2}$ ในกรณีที่อะตอม Tl อยู่ที่ตำแหน่ง $z = \frac{1}{3}$) จะสับพันธะกับอะตอม Tl ใหม่ที่ตำแหน่ง $z = \frac{2}{3}$ ทำให้การสับพันธะของอะตอมมีรูปคล้ายกันหอย นั่นคือการสับ

พันธะของอะตอม Tl และอะตอม Br โยงกันเป็นแบบลูกโซ่ ซึ่งมีโครงสร้างที่คล้ายกับผลึก $C_{14}H_{14}ClN_2O_4Tl$ (Blundell and Powell, 1972) เนื่องจากผลึก $C_{14}H_{14}ClN_2O_4Tl$ มีสัมมาตราชองส์กรู 2_1 ตามแนวแกน b ทำให้อะตอม O ตัวหนึ่งของกลุ่ม ClO_4 สัมพันธ์กับอะตอม Tl ส่วนอะตอม O อีก 3 ตัวที่เหลือซึ่งแขนหนึ่งก็สัมพันธ์กับอะตอม Cl จะมีอะตอม O 1 ตัวที่จะสัมพันธ์กับอะตอม Tl อีกตัวหนึ่งทำให้การสัมพันธ์ของอะตอมเกิดเป็นลูกโซ่เช่นกัน แสดงดังรูปที่ 5.4



รูปที่ 5.4 แสดงโครงสร้างโมเลกุลของผลึก $C_{14}H_{14}ClN_2O_4Tl$

เมื่อเปรียบเทียบความยาวและมุมของพันธะระหว่างอะตอม Tl กับอะตอมข้างเคียงของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ กับผลึก $C_{14}H_{14}ClN_2O_4Tl$ แสดงได้ดังรูปที่ 5.5



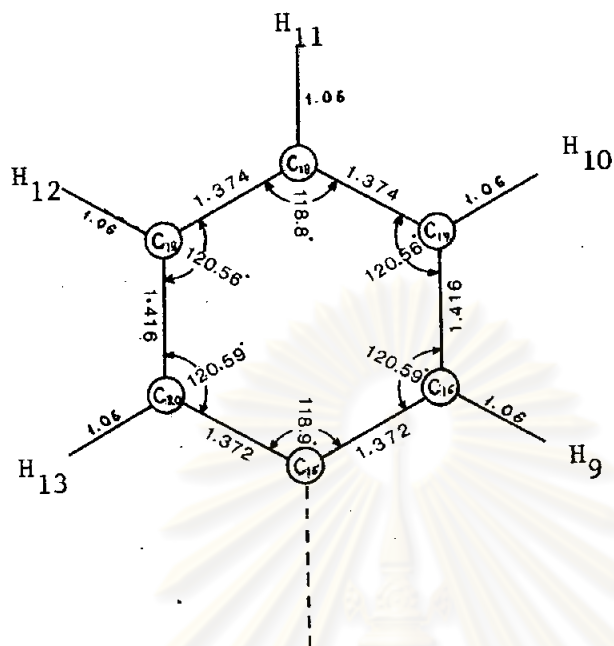
รูปที่ 5.5 แสดงความยาวและมุมของพันธะระหว่างอะตอม Tl กับอะตอมข้างเคียง

(ก) ผลึก $C_{14}H_{14}ClN_2O_4Tl$

(ข) ผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$

ส่วนวงแหวนพินิลพบว่าเอียงเป็นมุม 33.41° กับระนาบ xy ความยาวเฉลี่ยของพันธะของอะตอม C - C เป็น 1.387 \AA ความยาวของพันธะระหว่างอะตอม Tl-C₁₅ เป็น 1.823 \AA ส่วนความยาวพันธะและมุมระหว่างอะตอม C - C และอะตอม C-H แสดงดังรูปที่ 5.6

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ 5.6 แสดงความยาวและมุมของพันธะระหว่างอะตอม C - C และอะตอม C - H ของวงแหวน C_6H_6

ความยาวและมุมของพันธะระหว่างอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วย อสมมาตรแสดงตามตารางที่ 5.3 และ 5.4 ตามลำดับ

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย