A-ET-58

ชื่อ-สกุล ผู้อธิบายงานวิจัย วีนัส คูณแสง

☐ นาย ■ น.ส. ☐ นาง ■ ศ. ■ ร. ☐ ผศ. ☐ รศ. ☐ ศ.

สาขาวิชา:
■ กายภาพ ☐ เกษตร
☐ รังสี ☐ วิศวะ-เทคโน
☐ วิทย์-คีกษา ☐ ทรัพย์-แวดล้อม
☐ แพทย์ ☐ ทั่วไป

ที่ทำงาน ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี
บางมด กรุงเทพฯ 10140 โทร. 4270039 ต่อ 6160, 6152

CORRELATION BETWEEN THE ELECTRONIC ENERGIES AND THE CRYSTALLOGRAPHIC PARAMETERS OF $[Cu(bipyam)_2(ONO)]^+$ CATION COMPLEXES

Venus Koonsaeng* and B.J. Hathaway**
*Chemistry Department, Faculty of Science, King Mongkut's Institute of Technology Thonburi, Bangkok 10140
**Chemistry Department, University College Cork, Ireland

An attempt is made to correlate the crystallographic parameters with the electronic reflectance spectra of six $[Cu(bipyam)_2(ONO)]^+$ cation distortion isomers, whose crystal structures involve cis-distorted CuN_4O_2 chromophore stereochemistries ranging from a regular cis-distorted octahedral to asymmetric cis-distorted octahedral stereochemistry. It suggests that the electronic spectra relate to the underling static CuN_4OO' chromophore geometry, and not to the dynamic Pseudo-Jahn Teller CuN_4O_2 chromophore structure.

ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานอิเลคทรอนิคส์กับข้อมูลโครงสร้างผลึกของอิออนเชิงซ้อน $[Cu(bipyam)_2(ONO)]^+$

วีนัส คูณแสง* และ B.J. Hathaway**
*ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี กรุงเทพฯ 10140
**ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยคอร์ก ไอร์แลนด์

ได้พยายามสร้างความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลโครงสร้างผลึกกับ electronic reflectance spectra ของไอโซเมอร์อิออนเชิงซ้อน 6 ตัว $[Cu(bipyam)_2(ONO)]^+$ ที่มีโครงสร้างผลึกแบบ regular cis-distorted octahedral CuN_4O_2 chromophore และเบี่ยงเบนไปเป็นแบบ asymmetric cis-distorted octahedral จากการศึกษาความสัมพันธ์ดังกล่าวจึงเสนอแนะได้ว่า electronic reflectance spectra มีความสัมพันธ์กับโครงสร้างแบบ underlying static CuN_4OO' chromophore แต่ไม่มีความสัมพันธ์กับโครงสร้างแบบ Pseudo-Jahn Teller CuN_4O_2 chromophore

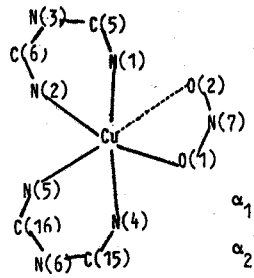
หมายเหตุ bipyam = 2,2'-bipyridylamine ($C_{10}H_9N_3$)

INDEX KEY WORDS: Complex, Coordination compound, electronic reflectance spectrum

ชื่อเรื่อง (ไทย) ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานอิเลคทรอนิคส์กับข้อมูลโครงสร้างผลึกของอิออนเชิงซ้อน $[Cu(bipyam)_2(ONO)]^+$

รูปที่ 2-5 เป็นตัวอย่างที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลจากโครงสร้างผลึกกับความแตกต่างของ electronic energies (E_2-E_1 = ΔE) ของสารประกอบเชิงซ้อน $[Cu(bipyam)_2(ONO)][Y]$ เมื่อ Y = $[BF_4]^-$, $[PF_6]^-$, Br^-, I^-, $[NO_3]^-$, $[NO_2]^-$ ซึ่งมีโครงสร้างใน Structural Pathway ของ cis-distorted octahedral CuN_4O_2 chromophore เรียงตามลำดับดังนี้

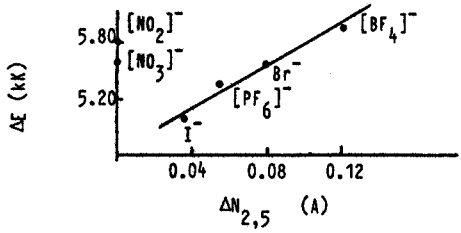
$$\underbrace{[NO_3]^-,\ [NO_2]^-}_{\text{Dynamic Pseudo Jahn-Teller Effect } CuN_4O_2 \text{ Chromophore (regular cis-distorted octahedral)}} < \underbrace{[PF_6]^-,\ I^- < Br^-,\ [BF_4]^-}_{\text{Underlying state } CuN_4OO' \text{ Chromophore involving Distorted square based pyramidal } (4+1+1^*) \text{ geometries}}$$



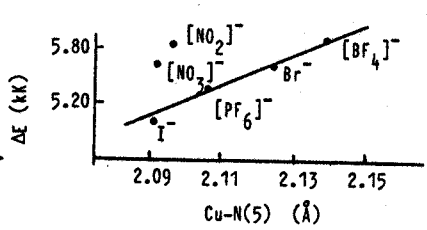
รูปที่ 1 Notation used for the CuN_4O_2 chromophore in $[Cu(bipyam)_2(ONO)]^+$ cations

α_1 = angle between N(4) and N(5) pyridine rings

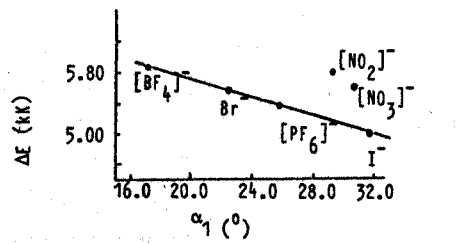
α_2 = C(15)-N(6)-C(16)



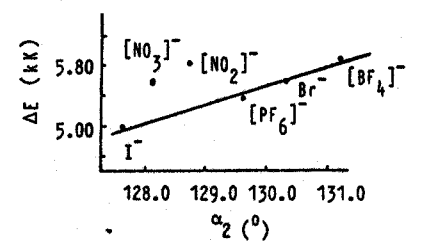
รูปที่ 2 ΔE V $\Delta N_{2,5}$



รูปที่ 3 ΔE V Cu-N(5)



รูปที่ 4 ΔE V α_1



รูปที่ 5 ΔE V α_2

References

1. Koonsaeng, V. and Hathaway, B.J. 1991, J. Sci Res. Chula. Univ. 16(1):35-47.
2. วีนัส คูณแสง และ B.J. Hathaway การประชุมวิชาการเพื่อเสนอผลงานวิจัย, 6-8 สิงหาคม 2533 ณ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒประสานมิตร หน้า 360-372.
3. วีนัส คูณแสง และ B.J. Hathaway วารสารวิจัยและพัฒนาสจธ. ปีที่ 12 ฉบับที่ 2 ธันวาคม 2532 หน้า 62-80