

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ	TRG5780212
ชื่อโครงการ	พหุสัณฐานใหม่ของโครงข่ายแลนทาไนด์ซัลเฟต
ชื่อนักวิจัย	วีรินทร์ดา ทะปะละ
อีเมล	weerinradah@gmail.com
ระยะเวลาโครงการ	1 มิถุนายน 2557 – 25 กรกฎาคม 2563

จากความพยายามในการสังเคราะห์ และศึกษาอัตรลักษณ์ทางโครงสร้างชนิดใหม่ของโครงข่ายแลนทาไนด์ซัลเฟต ทำให้พบพหุสัณฐานใหม่ของโครงข่าย คือ $[\text{Ln}_2(\text{SO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_4]$ เมื่อ $\text{Ln} = \text{Pr}$ และ Nd โดยทั้งสองโครงข่ายมีโครงสร้างผลึกเหมือนกัน ที่อยู่ในปริภูมิ $P2_1/m$ ลักษณะโครงสร้างผลึกเป็นโครงข่ายสามมิติ ที่เกิดจากการเชื่อมต่อระหว่างสายโซ่หนึ่งมิติของหน่วยย่อย $\{\text{LnO}_9\}$ และระนาบในสองมิติของหน่วยย่อย $\{\text{LnO}_8\}$ โดยมีกลุ่มซัลเฟตเป็นตัวเชื่อมต่อผ่านสามรูปแบบของการโคออร์ดิเนชัน คือ μ_3 - $\eta^1\eta^1\eta^1\eta^1$, μ_4 - $\eta^1\eta^1\eta^1\eta^1$ และ μ_4 - $\eta^2\eta^2\eta^1\eta^0$ โดยพบว่าในโครงสร้างผลึกชนิดใหม่นี้ปรากฏความไม่เป็นระเบียบของโครงสร้างอยู่เป็นจำนวนมาก จากการศึกษาโครงข่ายทั้งหมดของแลนทาไนด์ซัลเฟต ทำให้สรุปได้ว่าจำนวนโมเลกุลของน้ำในโครงสร้างที่ต่างกันของโครงข่าย $[\text{Ln}^{\text{III}}_2(\text{SO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_n]$ เมื่อ $n = 0 - 9$ ส่งผลทำให้เกิดความหลากหลายทางโครงสร้าง และควมมีรูพรุน ที่เกี่ยวข้องโดยตรงกับรูปแบบการโคออร์ดิเนชันของกลุ่มซัลเฟต และรูปทรงทางเลขาคณิตในการโคออร์ดิเนชันของแลนทาไนด์ นอกจากนี้แล้วจากความพยายามในการเตรียมสารประกอบโครงข่ายชนิดใหม่ของโครงข่ายโคออร์ดิเนชันของแลนทาไนด์ โดยเริ่มจากเกลือชนิดต่าง ๆ ของแลนทาไนด์และสารเชื่อมต่ออินทรีย์ 1,3,5-triazine-2,4,6-triamine hexaacetic acid (H_6TTHA) ได้โครงข่ายใหม่ $[\text{Eu}_2(\text{TTHA})(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ที่เป็นโครงข่ายสามมิติที่ปราศจากรูพรุน

คำสำคัญ แลนทาไนด์ซัลเฟต, พหุสัณฐาน, โครงสร้างผลึก, ยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรสโกปี, เสถียรภาพทางความร้อน

ABSTRACT

Project Code	TRG5780212
Project Title	New Polymorphs of Lanthanide Sulfate Frameworks
Investigator	Weerinradah Tapala
E-mail Address	weerinradah@gmail.com
Project Period	June 1 st , 2014 – July 31 st , 2020

Crystal structures of two new lanthanide sulfate polymorphs, *i.e.* $[\text{Ln}_2(\text{SO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_4]$ ($\text{Ln} = \text{Pr}$ (**I**) and Nd (**II**)), have been prepared and characterized. The new polymorphs are revealed to be isostructural, crystallized in monoclinic $P2_1/m$ space group and built up from the one-dimensional chain of $\{\text{LnO}_9\}$ and the two-dimensional layer of $\{\text{LnO}_8\}$ connected through the SO_4^{2-} using three different coordination modes, *i.e.* $\mu_3\text{-}\eta^1\text{:}\eta^1\text{:}\eta^1\text{:}\eta^1$, $\mu_4\text{-}\eta^1\text{:}\eta^1\text{:}\eta^1\text{:}\eta^1$ and $\mu_4\text{-}\eta^2\text{:}\eta^2\text{:}\eta^1\text{:}\eta^0$. Apparently, the apparent polymorphic diversity in **I** and **II** is brought about by structure disordering. Founded on the available polymorphic $[\text{Ln}^{\text{III}}_2(\text{SO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_n]$ ($n = 0 - 9$), different degrees of coordinating water molecules is seemingly the prime cause of structural variation, defied by framework diversity and porosity, which are closely related to coordination modes of SO_4^{2-} and coordination geometry about the Ln^{III} . In addition to the study the polymorphism of lanthanide sulfate framework, a new crystal framework of $[\text{Eu}_2(\text{TTHA})(\text{H}_2\text{O})_4]\cdot\text{H}_2\text{O}$ ($\text{H}_6\text{TTHA} = 1,3,5\text{-triazine-2,4,6-triamine hexaacetic acid}$) was also synthesized and characterized.

Keywords lanthanide sulfate; polymorph; crystal structure; UV-vis spectroscopy; thermogravimetry