20 JAN 2003

LIBRARY AND INFORMATION CENTER
MAHIDOL UNIVERSITY

X-RAY STUDY OF SINGLE CRYSTAL OF BENZANILIDE A MODEL FOR POLY (P-PHENYLENE TEREPHTHALAMIDE)

WICHAN THANYAMANEELERTSAKUL

With compliments
of
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยมหิดล

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE
(CHEMICAL PHYSICS)
FACULTY OF GRADUATE STUDIES
MAHIDOL UNIVERSITY
2002

TH
W633X
2002
C.

(ISBN 974-04-2632-8)

COPYRIGHT OF MAHIDOL UNIVERSITY
Copyright by Mahidol University

4136439 SCCP/M: MAJOR: CHEMICAL PHYSICS; M.Sc. (CHEMICAL PHYSICS)
KEY WORDS : MODEL COMPOUND/ HERRINGBONE PATTERN/ KEVLAR/ POLY (P-PHENYLENE TEREPHTHALAMIDE)/ PPTA/ SINGLE CRYSTAL

WICHAN THANYAMANEELERTSAKUL: X-RAY STUDY OF SINGLE CRYSTAL OF BENZANILIDE - A MODEL FOR POLY (P-PHENYLENE TEREPHTHALAMIDE). THESIS ADVISORS: ORAPIN RANGSIMAN, Dr.rer.nat., TAWEECHAI AMORNSAKCHAI, Ph.D., PONGCHAN THINAPONG, Ph.D.,116 p. ISBN 974-04-2632-8.

The molecular and crystal structures of a series of model compounds of poly (*p*-phenylene terephthalamide) (PPTA) were analyzed by X-ray diffraction method. The model compounds were modified on end groups which were attached to the benzene rings. Each molecule was linked by NH...O hydrogen bond. Data from crystal structure analysis obtained from preparation of model compounds and data from Cambridge Structural Database (CSD) were combined.

The results of the twisted angle between benzene and amide groups can be classified into three types: Twisted I, Twisted II, and Planar. The changes in conformation can be related to hydrogen-bonded packing within a layer, which gives parallel form for Twisted I conformation, the cross form for Twisted II conformation, and the Z-shape form for Planar conformation. The molecular conformation of Twisted I (same direction) with edge-to-face form shows a herringbone pattern which conforms with the crystal structure of poly (*p*-phenylene terephthalamide).

Copyright by Mahidol University

4136439 SCCP/M : สาขาวิชา : ฟิสิกส์เชิงเคมี ; วท.ม.(ฟิสิกส์เชิงเคมี)

วิชาญ ธัญมณีเลิศสกุล : ศึกษาโครงสร้างผลึกของเบนซานิลายด์ สารประกอบจำลองของโพลี-พี-ฟีนีลีน เทอเรฟทาลามายด์ (X-RAY STUDY OF SINGLE CRYSTAL OF BENZANILIDE-A MODEL FOR POLY (P-PHENYLENE TEREPHTHALAMIDE)) คณะกรรมการควบคุมวิทยานิพนธ์: อรพินท์ รังสิมันต์, Dr.rer.nat., ทวีชัย อมรศักดิ์ชัย, Ph.D., พงษ์จันทร์ ทิณพงษ์, Ph.D., 116 หน้า. ISBN 974-04-2632-8.

งานวิจัยนี้ได้ทำการสังเคราะห์สารประกอบจำลอง poly (*p*-phenylene terephthalamide) (PPTA) และได้รวบรวมข้อมูลโครงสร้างผลึกของสารประกอบจำลองที่ได้จาก Cambridge Structural Database (CSD) โดยมีการเติมหมู่ฟังก์ชั่น ที่วงเบนซีน เพื่อศึกษาอิทธิพลการบิดระหว่างระนาบของวงเบนซีน และกลุ่มเอไมด์ ซึ่งมีผลต่อการจัดเรียงตัวในโครงสร้างของผลึก

ผลของการบิดระหว่างระนาบ ทำให้เกิดรูปร่างโมเลกุลได้ 3 แบบ แบบที่หนึ่ง (Twisted I) พบว่าโมเลกุลมีการจัดเรียงตัวขนานกัน ส่วนแบบที่สอง (Twisted II) แต่ละโมเลกุลมีการจัดเรียงตัวไขว้กัน และสำหรับแบบที่สาม (Planar) โมเลกุลมีการจัดเรียงตัวในรูปแบบ Z-shape ตามทิศของพันธะไฮโดรเจน รูปร่างโมเลกุลที่พบในแต่ละแบบ มีความสัมพันธ์กับการจัดเรียงตัวของโมเลกุลในโครงสร้างผลึกของสารประกอบจำลอง พบว่ากลุ่มของ Twisted I ที่มีการจัดเรียงโมเลกุลไปในทางเดียวกันในโครงสร้างผลึกแบบ edge-to-face นั้นให้การจัดเรียงตัวในโครงสร้างผลึก เป็นแบบลวดลายก้างปลา คล้ายกับที่พบในสาร poly (*p*-phenylene terephthalamide)

Copyright by Mahidol University