



บทที่ 1

บทนำ

ผลึกของกรดไซเพอริค (Cyperenic acid) เป็นผลึกที่สกัดได้มาจากต้นเจตพังคี หรือ Croton crassifolius Geisel วงศ์ Euphobiaceae ซึ่งเป็นต้นไม้ในเขตภูมิอากาศร้อน มีประโยชน์เป็นยาแก้ท้องขึ้น ปวดแน่นในท้อง ขับผายลม ทำให้เรอ ผะกับน้ำปูนใสทาท้องเด็กอ่อน ต้นรวมกับรากถ่ายานรับประทานเป็นยาบำรุงธาตุ บำรุงหัวใจ และอื่น ๆ อีกมากมาย

ผลึกของกรดไซเพอริคสกัดได้เป็นครั้งแรกในธรรมชาติ โดยคณะของ รองศาสตราจารย์ ดร. โสภณ เรืองสำราญ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย โดยการสกัดด้วย เอทานอล นำสิ่งที่สกัดได้ไปแยกด้วยวิธีการโครมาโทกราฟี โดยใช้ซิลิกาเจลและอะลูมินาเป็นตัวดูดซับ (adsorbent) โดยชะ (elute) ด้วยตัวทำละลายต่าง ๆ สามารถแยกผลึกของกรดไซเพอริคบริสุทธิ์ออกมาได้

การศึกษาโครงสร้างผลึกของกรดไซเพอริคด้วยวิธีเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ในการวิจัยครั้งนี้ เป็นการศึกษาโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยว (single crystal X-ray diffraction) คือการให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกเดี่ยว บังเหียงรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนบนฟิล์ม ภาพของรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนที่ปรากฏบนฟิล์มมีลักษณะเป็นจุดสะท้อนที่มีความเข้มต่างกัน จากการวัดความเข้มของจุดสะท้อนทุกจุดที่ปรากฏบนฟิล์ม ทำให้หาขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต (observed structure factor amplitude) ได้ ข้อมูลของความเข้มที่ได้ นำไปคำนวณหาตำแหน่งอะตอมของธาตุต่าง ๆ ในผลึก ซึ่งทำให้สามารถคำนวณขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างคำนวณ (calculated structure factor amplitude) ของจุดสะท้อนทุกจุดได้ นำขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต และขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างคำนวณมาเปรียบเทียบกับกัน ถ้าได้ค่าที่ใกล้เคียงกัน แสดงว่าตำแหน่งอะตอมที่หาได้เป็นตำแหน่งที่ถูกต้อง เมื่อนำตำแหน่งอะตอมเหล่านี้ไปปรับ (refine) เพื่อให้ได้ค่าถูกต้องขึ้น จะทำให้ได้โครงสร้างถูกต้องสมบูรณ์ยิ่งขึ้นด้วย

สำหรับภาควิชาเพื่อศึกษาโครงสร้างผลึกของกรดไซเพอริคครั้งนี้ แบ่งการวิจัยออกเป็น 2 ชั้น คือ

1. การรวบรวมข้อมูลทั่วไปของผลึก เป็นการศึกษาข้อมูลเบื้องต้นที่จะนำไปสู่การคำนวณหาตำแหน่งอะตอมของธาตุในผลึก ข้อมูลเหล่านี้คือ ความหนาแน่นของผลึก หาโดยใช้วิธีการ

ลอยตัว (floating method) ของผลึกในของเหลวที่มีความหนาแน่นใกล้เคียงกัน ค่าคงที่
 โครงผลึก ระบบและหุ้ลุ่มมาตราชำมมิติ (space group) ของผลึก ซึ่งหาได้จากภาพถ่ายออสซิลเลชัน (oscillation photograph) ภาพถ่ายลาวเอ (Laue photograph) ภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก (Weissenberg photograph) และภาพถ่ายพรีเซสชัน (precession photograph) ส่วนค่าคงที่โครงผลึกที่ถูกต้อง หาได้จากภาพถ่ายผลึกผง (powder photograph)

2. การคำนวณโครงสร้างของผลึก แบ่งออกเป็น 2 ขั้นตอนที่สำคัญคือ

2.1 การรวบรวมข้อมูลความเข้ม ได้จากการวัดความเข้มของจุดสะท้อนที่ปรากฏบนฟิล์มของภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก และภาพถ่ายพรีเซสชัน เทียบกับสเกลความเข้มมาตรฐาน (standard intensity scale) ที่สร้างขึ้น แก่ความเข้มที่วัดได้ให้ถูกต้องขึ้น เนื่องจากปัจจัยต่าง ๆ ที่ทำให้ความเข้มผิดพลาดไป วิเคราะห์ข้อมูลความเข้มที่ถูกต้องแล้วจากวิธีทั้งสอง

2.2 การหาตำแหน่งอะตอมต่าง ๆ ในผลึก โดยใช้วิธีการผลึกวิทยาแบบตรง (direct methods in crystallography) ได้จากการใช้ข้อมูลความเข้มจากวิธีการแบบไวซ์เซ็นเบอร์ก ไปคำนวณแฟคเตอร์โครงสร้างเฉลี่ยปกติ (normalized structure factor) หรือค่า E คำนวณแผนภาพ E (E-map) จากนั้นใช้การสังเคราะห์ฟูเรียร์ (Fourier synthesis) คำนวณแผนภาพความหนาแน่นอิเล็กตรอนเพื่อหาตำแหน่งอะตอมเพิ่ม

วิทยานิพนธ์นี้ได้กล่าวถึงทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง และขั้นตอนในการวิจัย โดยแบ่งเนื้อหาออกเป็น 6 บท คือ

บทที่ 1 บทนำ

บทที่ 2 กล่าวถึงทฤษฎีเบื้องต้นของการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์

บทที่ 3 กล่าวถึงการถ่ายภาพผลึกด้วยวิธีการพรีเซสชัน

บทที่ 4 กล่าวถึงที่มา และวิธีการคำนวณแฟคเตอร์ลอเรนซ์-โพลาไรซ์ สำหรับวิธีการพรีเซสชัน

บทที่ 5 เป็นบทที่กล่าวถึงขั้นตอนการทดลอง และการศึกษาโครงสร้างของผลึก

บทที่ 6 ซึ่งเป็นบทสุดท้าย เป็นการสรุปผลการวิจัย