

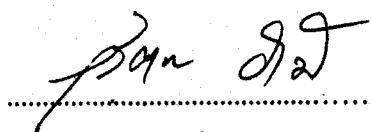
ชื่อวิทยานิพนธ์ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในการ ศึกษาอันตรกิริยา ระหว่างไอออนกับ
น้ำ (H_2O , HOD , D_2O) ในผลึกไฮเดรตของแอลคาไลน์เอิร์ท ไฮโอไซด์
โดยใช้เทคนิคการเจือจางด้วยไอโซโทปเปรียบเทียบกับไฮเดรตอื่นที่
เกี่ยวข้อง

ชื่อผู้ทำวิทยานิพนธ์ นายทองศรี บุญประเสริฐ
คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์



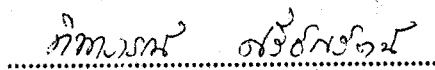
ประธานกรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ฉนพร คำนววิรุฑ)



กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุจิตรา ยั่งมี)



กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ทพารณ ศรีธัญรัตน์)

บทคัดย่อ

ไฮเดรตที่เจือจางด้วยไอโซโทป หรือคิวเทอร์เรต ของ $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{MgBr}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{MgI}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaBr}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaI}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{BaBr}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ และ $\text{BaI}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ในรูปของ $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{MgBr}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{MgI}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{CaBr}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{CaI}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O-dx}$, และ $\text{BaI}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O-dx}$ ได้ทำในบรรยากาศของ N_2 แห้ง และ บันทึกลงสเปกตรัมอินฟราเรดด้วยเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรโฟโตมิเตอร์ (เพอร์กิน เอลเมอร์ 683) ที่กำลังขยาย 1.2 cm^{-1} ที่ 1000 cm^{-1} เทคนิคที่ใช้เตรียมตัวอย่างเพื่อบันทึกลงสเปกตรัมใช้แบบ การอัดเม็ด KBr และ นูจอลมัต ที่ใช้น้ำมันพาราฟินและฟอลิกลอโรไทรฟลูออโรเอทิลีน (PCTFE) ที่มี CsI เป็นหน้าต่างแสง อันตรกิริยาแอนไอออน-น้ำ ของ $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{MgBr}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O-dx}$, $\text{MgI}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O-dx}$ ซึ่งสังเกตจากตำแหน่งของการสั่นแบบไม่ควมของหมู่ OH ที่เรียกว่า $\nu_{\text{OH}}(\text{HOD})$ ที่ปรากฏโดยเฉลี่ยทุกเทคนิคมีค่าดังนี้ 3401 , 3402 , 3427 cm^{-1} ตามลำดับ

ค่า $V_{OH}(HOD)$ เฉลี่ยทุกเทคนิคสำหรับ $CaCl_2 \cdot 2H_2O-dx$, $CaBr_2 \cdot 2H_2O-dx$, $CaI_2 \cdot 4H_2O-dx$ เป็น 3378, 3402 และ 3443 ในขณะที่สำหรับ $BaCl_2 \cdot 2H_2O-dx$, $BaBr_2 \cdot 2H_2O-dx$, และ $BaI_2 \cdot 2H_2O-dx$ เป็น 3387, 3397 และ 3427 cm^{-1} ตามลำดับ ข้อมูลเชิงเทอร์โมไดนามิกส์ ในรูปค่าเอนทาลปีการเกิดพันธะไฮโดรเจน (ΔH_H) คำนวณจาก $\Delta V_{OH}(HOD)$ ที่บอกถึงอันตรกิริยาแอนไฮออน-น้ำ ของไฮเดรตที่อ้างถึง โดยเฉลี่ยสำหรับทุกเทคนิคมีค่า 14.05, 14.05, 12.94 ; 15.03, 14.00, 12.26; และ 14.61 , 14.20, 12.99 $kJ mol^{-1} OH$ ตามลำดับ ค่า $R_{O...O}/\text{\AA}$ ที่สมมูลซึ่งคำนวณได้ สำหรับไฮเดรตที่อ้างถึงข้างต้น เป็น 2.796, 2.796, 2.812 ; 2.784, 2.797, 2.822 ; และ 2.789, 2.793, 2.881 ตามลำดับ ค่า $R_{O...Y}/\text{\AA}$ ของไฮเดรตในลำดับเดียวกัน คำนวณได้เป็น 3.196, 3.346, 3.562; 3.184, 3.347, 3.572 ; และ 3.189, 3.343 , 3.561 $\text{\AA}$ ตามลำดับ ได้พบว่าเกือบทุกตัวอย่างและเกือบทุกเทคนิค จะเห็นการเกิดค้ำเบดของ $V_2(H_2O)$ ชัดเจน อันบอถึงการมีโมเลกุลของน้ำที่แตกต่างกันทางผลึกวิทยา สารตัวอย่างส่วนหนึ่งที่ทำการศึกษา ยังเกิดยอดแถบที่เข้มปานกลางถึงมาก ที่ประมาณ 1016 cm^{-1} ซึ่งจัดให้เป็นการสั่นแบบ $V_1(A_1)$ ของ $M-OH_2$ หรือ $M-OD_2$ แบบ ZXY_2 ที่แบน ส่วนในย่านไลเบรชันของน้ำสังเกตได้โดยเฉลี่ย ρ_r , ρ_t และ ρ_w สำหรับ $MgCl_2 \cdot 6H_2O-dx$ ปรากฏที่ประมาณ 670, 580 และ 523 cm^{-1} ตามลำดับ ในกรณีของ $MgBr_2 \cdot 6H_2O-dx$ และ $MgI_2 \cdot 8H_2O-dx$ ไลเบรชัน 2 แบบ คือ ρ_r และ ρ_w ปรากฏยอดแถบที่ 601, 500 cm^{-1} และ 684, 480 cm^{-1} ปรากฏ $V_{M...O}$ ที่ 371 cm^{-1} สำหรับอันตรกิริยา แคตไอออน-น้ำ ในรูป $V_{M...O}$ พบสำหรับ $Mg...O$ ที่ 350 cm^{-1} ไฮเดรต $CaCl_2 \cdot 2H_2O-dx$ พบไลเบรชัน ρ_r และ ρ_w ปรากฏยอดแถบที่ 600, 500 cm^{-1} และ $V_{Ca...O}$ พบที่ความถี่ 380 cm^{-1} ในกรณีของ $CaBr_2 \cdot 2H_2O-dx$ ปรากฏเพียงไลเบรชัน ρ_w อย่างเดียวเท่านั้นที่ความถี่ประมาณ 450 cm^{-1} สำหรับไฮเดรต $CaI_2 \cdot 4H_2O-dx$ ปรากฏแถบไลเบรชัน ρ_r และ ρ_w ที่ความถี่ประมาณ 625 , 459 cm^{-1} ตามลำดับ ไฮเดรต $BaCl_2 \cdot 2H_2O$ แสดง ρ_r , ρ_t และ ρ_w ปรากฏยอดแถบที่ความถี่ประมาณ 688, 593, 465 cm^{-1} ตามลำดับ ในขณะที่ $V_{Ba...O}$ ปรากฏที่ความถี่ 350 cm^{-1} ไลเบรชันแบบ ρ_r และ ρ_w ของไฮเดรต $BaBr_2 \cdot 2H_2O-dx$ จะปรากฏยอดแถบที่ความถี่ประมาณ 569 และ 435 cm^{-1} ในขณะที่ $V_{Ba...O}$ ปรากฏที่ 361 cm^{-1} ใน กรณี $BaI_2 \cdot 2H_2O-dx$ ปรากฏยอดแถบของ ρ_r , ρ_t และ ρ_w ที่ความถี่ประมาณ 698, 593 และ 462 cm^{-1} ตามลำดับ ส่วน $V_{Ba...O}$ เกิดขึ้นที่ 340 cm^{-1}