

ภาคผนวก ข

การคำนวณ และข้อมูล JCPDS

ข.1. การคำนวณหาขนาดของอนุภาคจากค่าพื้นที่ผิวจำเพาะ(specific surface area)

เมื่อได้ค่าพื้นที่ผิวจำเพาะของซิงก์ออกไซด์จากเครื่องวัดพื้นที่ผิวของอนุภาค สามารถคำนวณหาขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของอนุภาคจากสมการ

$$d_{\text{BET}} = \left(\frac{6}{\rho_{\text{ZnO}}} \times \text{SSA} \right)$$

โดย d_{BET} คือ เส้นผ่านศูนย์กลางของซิงก์ออกไซด์

ρ_{ZnO} คือ ค่าความหนาแน่นของซิงก์ออกไซด์มีค่า 5.676 กรัม/ลูกบาศก์เซนติเมตร

SSA คือ ค่าพื้นที่ผิวจำเพาะที่ได้จากเครื่องวัดพื้นที่ผิวของอนุภาค

ข.2. การคำนวณร้อยละผลได้ของอนุภาคที่สังเคราะห์โดยเฟรมสเปรย์ไพโรลิซิส

ร้อยละผลได้ของซิงก์ออกไซด์ที่สังเคราะห์โดยเฟรมสเปรย์ไพโรลิซิส สามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$\text{ร้อยละผลได้} = \frac{\text{ปริมาณที่สังเคราะห์ได้จริง (กรัม)}}{\text{ปริมาณที่สังเคราะห์ได้ในทางทฤษฎี(กรัม)}}$$

โดยปริมาณที่สังเคราะห์ได้ในทางทฤษฎี คำนวณจากความเข้มข้นของซิงก์และแพลเลเดียมในสารละลายตั้งต้น ดังแสดงในตัวอย่างด้านล่างนี้

ตัวอย่าง การคำนวณปริมาณที่สังเคราะห์ได้ในทางทฤษฎีของซิงก์ออกไซด์ที่เจือด้วยแพลเลเดียม

ร้อยละ 0.50

วิธีคำนวณ สารตั้งต้นมีความเข้มข้น 0.50 โมล/ลิตร ใช้ในการสังเคราะห์ 95 มิลลิลิตร

ดังนั้นมีสารตั้งต้น 0.0475 โมล

แบ่งเป็นซิงก์ $\frac{99.5}{100} \times 0.0475 = 0.04726$ โมล

(ในซิงก์แนปทานต์ 1 โมล มีซิงก์ 1 โมล)

$$\text{และแพลงเคเดียม } \frac{0.50}{100} \times 0.0475 = 2.38 \times 10^{-4} \text{ โมล}$$

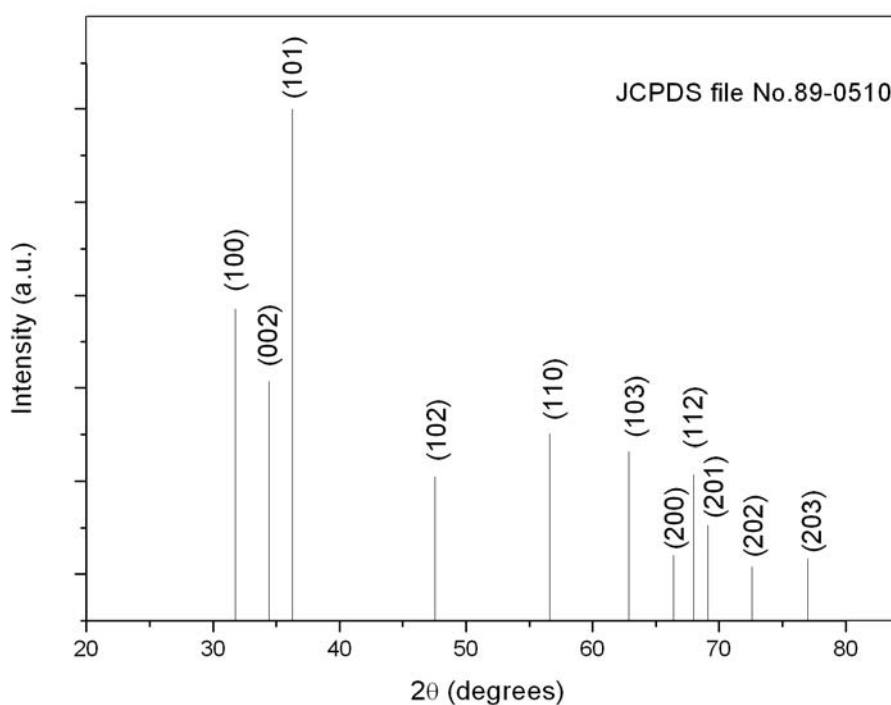
จะสังเคราะห์ซิงก์ออกไซด์ และแพลงเคเดียมได้ 0.04975 โมล และ 2.5×10^{-4} โมล ตามลำดับ

ซิงก์ออกไซด์มีมวลโมเลกุล 81.40 กรัม

แพลงเคเดียมมีมวลโมเลกุล 106.42 กรัม

$$\begin{aligned} \therefore \text{ปริมาณที่ควรสังเคราะห์ได้มีค่า } & (0.04726 \times 81.40) + (2.38 \times 10^{-4} \times 106.42) \text{ กรัม} \\ & = 3.872 \text{ กรัม} \\ & \approx 3.87 \text{ กรัม} \end{aligned}$$

ข.3. JCPDS file No. 89-0510



รูป ข.1. รูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ของซิงก์ออกไซด์จาก JCPDS file No. 89-0510

ZnO

Zinc Oxide

Ref: Calculated from ICSD using POWD-12++

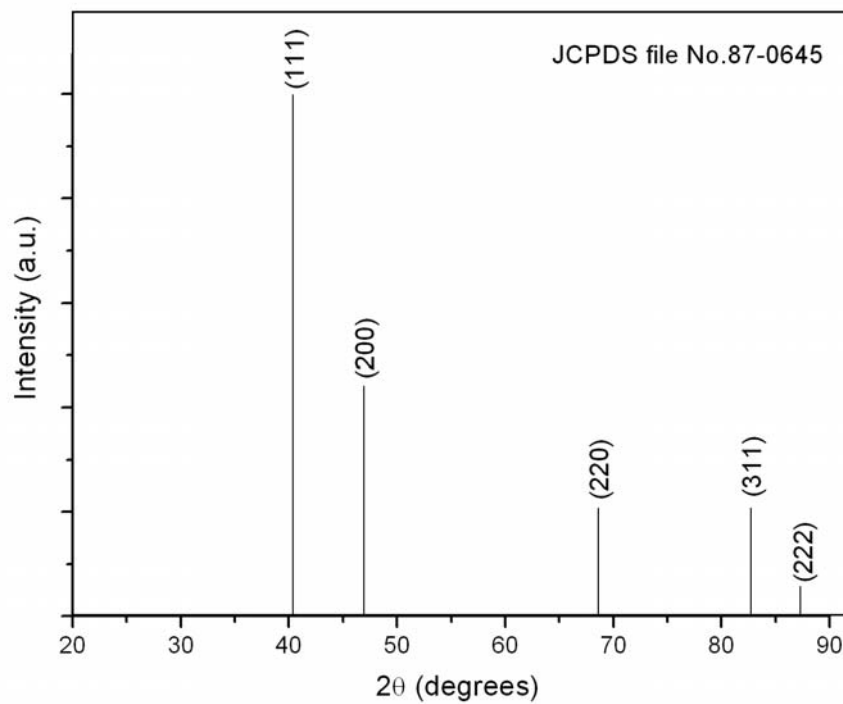
Ref: Sawada, H., Wang, R., Sleight, A.W., J. Solid State Chem., 122, 148 (1996)

Molecular Weight: 81.38

Volume [CD]: 47.58

Dx: 5.680 Dm:
 Sys: Hexagonal
 Lattice: Primitive
 S.G.: P63mc(168)
 Cell Parameters:
 a 3.248 b c 5.205
 α β γ
 I/I_{cor}: 5.38
 Rad: CuK α 1
 Lambda:
 Filter:
 d-sp: calculated
 ICSD #: 082028

ข.4. JCPDS file No.87-0645



รูป ข.2. รูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ของแพลเลเดียมจาก JCPDS file No.87-0645

Pd

Palladium

Ref: Calculated from ICSD using POWD-12++, (1997)

Ref: Davey, W.P., Phys. Rev., 25, 753 (1925)

Molecular Weight:	106.40		
Volume [CD]:	57.83		
Dx:	12.222	Dm:	11.700
Sys:	Cubic		
Lattice:	Face-centered		
S.G.:	Fm $\bar{3}m(225)$		
Cell Parameters:			
a 3.867	b	c	
α	β	γ	
I/I _{cor} :	16.40		
Rad:	CuK α 1		
Lambda:			
Filter:			
d-sp:	calculated		
ICSD # :	082028		
Mineral Name:	Palladium, syn		