สำนักหอสมุดกลาง พระจอมเกล้าลาดกระบัง

การศึกษาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ของสารประกอบไพริดอกซัล

นางสาวบูชณีย์ จันทร์งาม
นางสาวปียนาถ วงษ์ศิริ
นางสาวผจงจิตร จิมลง

โครงงานพิเศษนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต
ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ปีการศึกษา 2540

ปพ.
ป6911
2540
เลขหมู่.....
เลขทะเบียน.....32033
วัน, เดือน, ปี.....8 ก.พ. 2542

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Tautomerization of Pyridoxal Based Compounds

Miss Buchanee Chan-ngam

Miss Piyanad Wongsiri

Miss Phachongchit Chimlong

A Special Project Submitted in Partial Fulfillment of the

Requirement for the Degree of Bachelor of Science

Department of Chemistry

Faculty of Science

King Mongkut' s Institute of Technology Ladkrabang

1997

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หัวข้อโครงงานพิเศษ	การศึกษาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ของสารประกอบไพริดอกซัล
โดย	นางสาวบูชณีย์ จันทร์งาม
	นางสาวปิยนาถ วงษ์ศิริ
	นางสาวผจงจิตร ชิมลง
ภาควิชา	เคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา	ผศ.ดร. ประยงค์ ดวงดี

ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง อนุมัติให้นับโครงงานพิเศษฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต

หัวหน้าภาควิชาเคมี

(ผศ. นงนุช เกตรานุวัฒน์)

คณะกรรมการโครงงานพิเศษ

ประธานกรรมการ

(ดร. อิทธิพล แจ้งชัด)

กรรมการ

(ดร. ตะวัน สุขน้อย)

กรรมการ

(ผศ.ดร. ประยงค์ ดวงดี)

ลิขสิทธิ์ของภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หัวข้อโครงงานพิเศษ	**การศึกษาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ของสารประกอบไพริดอกซัล**
นักศึกษา	**นางสาวบูชณีย์ จันทร์งาม**
	นางสาวปิยนาถ วงษ์ศิริ
	นางสาวผจงจิตร ชิมลง
อาจารย์ที่ปรึกษา	**ผศ. ดร. ประยงค์ ดวงดี**
ภาควิชา	**เคมี**
ปีการศึกษา	**2540**

บทคัดย่อ

โครงงานพิเศษนี้เป็นการนำสารประกอบไพริดอกซัลคือ ไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน (PIH) SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างๆมาทำการศึกษาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (K_Z) โดยใช้เครื่องวัดการดูดกลืนแสงแบบอัลตราไวโอเลต / วิสสิเบิล และศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชัน โดยใช้เทคนิคโพเทนชิโอเมตริกไทเทรชัน แล้วคำนวณโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ SUPERQUAD จากการศึกษาพบว่า ค่า K_Z มีค่าลดลง เมื่อปริมาณไดออกเซนเพิ่มขึ้น ส่วนค่าคงที่โปรโตเนชันมีแนวโน้มเพิ่มขึ้น แต่ค่าคงที่ดีโปรโตเนชันมีแนวโน้มเพิ่มขึ้นเมื่อปริมาณไดออกเซนลดลง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Special Project Title Tautomerization of Pyridoxal Based Compounds

Name Miss Buchanee Chan-ngam

Miss Piyanad Wongsiri

Miss Phachongchit Chimlong

Special Project Advisor Dr. Prayong Duangdee

Department Chemistry

Academic Year 1997

Abstract

This project studied tautomerization of Pyridoxal Isonicotinoyl Hydrazone (PIH), SAG 47 and SAG 11 in dioxane-water mixtures at different ratios for determining the tautomeric equilibrium constant (K_Z) by using UV-Vis Spectrophotometer. The protonation and deprotonation constants of the pyridoxal based compounds were determined by using potentiometric titration. Protonation and deprotonation constants were calculated by a computer program named SUPERQUAD. The results showed that K_Z of PIH, SAG 47 and SAG 11 decreased as volumetric fractions of dioxane increased. Protonation constants increased and deprotonation constants decreased when volumetric fractions of dioxane increased.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กิตติกรรมประกาศ

ขอกราบขอบพระคุณ ผศ.ดร. ประยงค์ ดวงดี อาจารย์ที่ปรึกษาโครงงานพิเศษที่กรุณาให้คำแนะนำ คำปรึกษา ให้ความรู้ ความช่วยเหลือด้านต่างๆ รวมทั้งชี้แนะแนวทางในการดำเนินงานทั้งด้านวิชาการ หลักการทำงาน และแนวทางในการดำเนินชีวิต ตลอดจนให้การสนับสนุนการดำเนินการจัดทำโครงงานพิเศษนี้ด้วยดี และสม่ำเสมอมาตลอด

ขอกราบขอบพระคุณ ดร. อิทธิพล แจ้งชัด และดร. ตะวัน สุขน้อย ที่กรุณาเป็นกรรมการตรวจสอบโครงงานพิเศษนี้

ขอขอบพระคุณเจ้าหน้าที่ห้องปฏิบัติการ และ เจ้าหน้าที่ธุรการ ประจำภาควิชาเคมีทุกท่านที่กรุณาให้ความสะดวกในการจัดทำโครงงานพิเศษในครั้งนี้

ขอขอบคุณเพื่อนๆทุกคนที่คอยให้กำลังใจ ให้คำแนะนำและให้ความช่วยเหลือในการดำเนินงานครั้งนี้ให้สำเร็จไปได้ด้วยดี ขอขอบคุณมิตรภาพและประสบการณ์ที่ดีร่วมกัน

สุดท้ายนี้ขอกราบขอบพระคุณ คุณพ่อ คุณแม่ ผู้มีพระคุณสูงสุดที่คอยให้กำลังใจอยู่เสมอ ทำให้กล้าเผชิญต่อปัญหาและฝ่าฟันอุปสรรคต่างๆมาได้จนถึงทุกวันนี้

ถ้ามีสิ่งผิดพลาดประการใดคณะผู้จัดทำขอน้อมรับและขออภัยมา ณ ที่นี้ด้วย

นางสาวบูชณีย์ จันทร์งาม
นางสาวปิยนาถ วงษ์ศิริ
นางสาวผจงจิตร ชิมลง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ

เรื่อง	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย	ก
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ข
กิตติกรรมประกาศ	ค
สารบัญ	ง
สารบัญตาราง	ฉ
สารบัญรูป	ซ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความเป็นมาของโครงงาน	1
1.2 ทบทวนงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	1
1.3 วัตถุประสงค์	4
1.4 ขอบเขตของการศึกษา	4
บทที่ 2 ทฤษฎีและหลักการ	5
2.1 ทูโทเมอริซึม	5
2.2 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับสารเคมี	11
2.3 โพเทนชิออเมตรี	14
2.4 ขั้วกลาสสำหรับวัด pH	16
2.5 ศักย์ไฟฟ้าของขั้ว	19
2.6 โพเทนชิโอเมตริกไทเทรชัน	22
2.7 หลักการของโปรแกรม SUPERQUAD (SUPER)	23
2.8 หลักการของโปรแกรม ELECTRODE CALIBRATION (ELE)	24
บทที่ 3 การวิจัยและการดำเนินงาน	26
3.1 สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง	26
3.2 อุปกรณ์และเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง	26
3.3 การหาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์	27
3.4 การหาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชัน	28
3.4.1 การเตรียมสารละลายที่ใช้ในการทดลอง	28
3.4.2 วิธีดำเนินงานวิจัย	30

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

	หน้า
บทที่ 4 ผลการวิจัยและดำเนินงาน	32
ตอนที่ 1 การศึกษาค่าคงที่ทูโทเมอร์ของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่มีอัตราส่วนต่างกัน	32
ตอนที่ 2 การศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่มีอัตราส่วนต่างกัน	32
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ	62
ภาคผนวก	
ภาคผนวก ก รูปแสดงการดูดกลืนแสงของ PIH SAG 47 และ SAG 11ในตัวทำละลายผสมที่อัตราส่วนต่างๆ	63
ภาคผนวก ข ตารางแสดงข้อมูลการไทเทรตจากการทำแคลิเบรทอิเลคโทรด และข้อมูลการไทเทรตของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างๆ	87
ภาคผนวก ค วิธีการใช้เครื่อง UV Spectrophotometer Jasco 7800	97
ภาคผนวก ง ตัวอย่างการใช้โปรแกรม CURVE EXPERT 1.3	100
ภาคผนวก จ รายละเอียดเกี่ยวกับโปรแกรม TR 600	101
ภาคผนวก ฉ ความหมายของคำสั่งต่างๆ ที่ใช้ใน Sample Identification และ comments	105
ภาคผนวก ช Data Input สำหรับโปรแกรม SUPERQUAD และโปรแกรม ELE	107
ภาคผนวก ซ ตัวอย่างอินพุทของโปรแกรม ELE ที่ได้จากการคำนวณโดยโปรแกรม DCO ในการแคลิเบรทอิเลคโทรด	113
ภาคผนวก ฌ ตัวอย่างเอาท์พุทของโปรแกรม ELE ในการแคลิเบรทอิเลคโทรด	118
ภาคผนวก ญ ตัวอย่างอินพุทสำหรับโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับการศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH	124
ภาคผนวก ฐ ตัวอย่างเอาท์พุทของโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับการศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH	129
เอกสารอ้างอิง	143

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญตาราง

		หน้า
ตารางที่ 3-1	แสดงการเตรียมสารละลายผสมระหว่างไดออกเซน น้ำ และสารตัวอย่าง	27
ตารางที่ 4-1	แสดงช่วงความยาวคลื่นที่เลือกในการอินทิเกรตหาพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสงของ PIH SAG 47 และ SAG 11	35
ตารางที่ 4-2	แสดงพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง a_z, a_n ของ PIH	35
ตารางที่ 4-3	แสดงพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง a_z, a_n ของ SAG 47	36
ตารางที่ 4-4	แสดงพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง a_z, a_n ของ SAG 11	36
ตารางที่ 4-5	แสดงค่าความชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11	37
ตารางที่ 4-6	แสดงค่า K_z ของ PIH SAG 47 และ SAG 11	37
ตารางที่ 4-7	แสดงค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆพร้อมทั้ง pH ที่พบของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างกัน	38
ตารางที่ 4-8	แสดงค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆพร้อมทั้ง pH ที่พบของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างกัน	38
ตารางที่ 4-9	แสดงค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆพร้อมทั้ง pH ที่พบของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างกัน	39
ตารางที่ ข-1	แสดงข้อมูลการไทเทรตที่ได้จากการทำแคลิเบรทอิเลคโทรด	87
ตารางที่ ข-2	แสดงข้อมูลการไทเทรตของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 50 : 50	88
ตารางที่ ข-3	แสดงข้อมูลการไทเทรตของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 60 : 40	89
ตารางที่ ข-4	แสดงข้อมูลการไทเทรตของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 80 : 20	90
ตารางที่ ข-5	แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 15 : 85	91
ตารางที่ ข-6	แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 20 : 80	92
ตารางที่ ข-7	แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 30 : 70	93

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หน้า

ตารางที่ ข-8 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 40 : 60 94

ตารางที่ ข-9 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 50 : 50 95

ตารางที่ ข-10 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 60 : 40 96

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญรูป

		หน้า
รูปที่ 2-1	แสดงโครงสร้างของ 3-Hydroxypyridene	5
รูปที่ 2-2	แสดงค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (K_Z) ของไพริดอกซิน	5
รูปที่ 2-3	แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนแสงของไพริดอกซินในสารละลายผสมไดออกเซนต่อน้ำที่อัตราส่วนต่างๆ	6
รูปที่ 2-4	แสดงการหาค่าความชันเพื่อนำไปใช้ในการคำนวณค่า K_z	8
รูปที่ 2-5	แสดงลักษณะพีกแบบเกาส์เซียน	9
รูปที่ 2-6	แสดงการซ้อนทับกันของพีก	10
รูปที่ 2-7	ปฏิกิริยาแสดงสมการสังเคราะห์ไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน (PIH)	11
รูปที่ 2-8	แสดงโครงสร้างโมเลกุลของ PIH	12
รูปที่ 2-9	แสดงสภาวะสมดุลการเกิด Protonation และ Deprotonation ของ PIH	12
รูปที่ 2-10	แสดงโครงสร้างโมเลกุลของ SAG 47	13
รูปที่ 2-11	แสดงโครงสร้างโมเลกุลของ SAG 11	13
รูปที่ 2-12	แสดงโครงสร้างไดออกเซน	13
รูปที่ 2-13	แสดงอุปกรณ์ในการทำโพเทนชิออเมตรี	15
รูปที่ 2-14	แสดงขั้วกลาสสำหรับวัด pH	16
รูปที่ 2-15	แสดง Combination electrode	18
รูปที่ 3-1	แสดงการจัดชุดเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง	29
รูปที่ 4-1	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 10 : 90	40
รูปที่ 4-2	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 10 : 90	41
รูปที่ 4-3	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 10 : 90	42
รูปที่ 4-4	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ PIH	43
รูปที่ 4-5	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 47	44
รูปที่ 4-6	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 11	45

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หน้า

รูปที่ 4-7	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ PIH เมื่อทำการแก้ไขโดยทำการตัดค่าที่ผิดพลาดออก	46
รูปที่ 4-8	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 47 เมื่อทำการแก้ไขโดยทำการตัดค่าที่ผิดพลาดออก	47
รูปที่ 4-9	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 11 เมื่อทำการแก้ไขโดยทำการตัดค่าที่ผิดพลาดออก	48
รูปที่ 4-10	แสดงค่าดงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆของ PIH ที่อัตราส่วนต่างๆของตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ	49
รูปที่ 4-11	แสดงค่าดงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 47 ที่อัตราส่วนต่างๆของตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ	50
รูปที่ 4-12	แสดงค่าดงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 11 ที่อัตราส่วนต่างๆของตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ	51
รูปที่ 4-13	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ PIH ที่อัตราส่วน 50 : 50	52
รูปที่ 4-14	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ PIH ที่อัตราส่วน 60 : 40	53
รูปที่ 4-15	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ PIH ที่อัตราส่วน 80 : 20	54
รูปที่ 4-16	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 47 ที่อัตราส่วน 15 : 85	55
รูปที่ 4-17	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 47 ที่อัตราส่วน 20 : 80	56
รูปที่ 4-18	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 47 ที่อัตราส่วน 30 : 70	57
รูปที่ 4-19	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 11 ที่อัตราส่วน 40 : 60	58
รูปที่ 4-20	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 11 ที่อัตราส่วน 50 : 50	59
รูปที่ 4-21	แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ SAG 11 ที่อัตราส่วน 60 : 40	60

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หน้า

รูปที่ 4-22	แสดงสปีชีส์ต่างๆ ที่อยู่ในสภาวะสมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ โปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11	61
รูปที่ ก-1	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 20 : 80	63
รูปที่ ก-2	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 30 : 70	64
รูปที่ ก-3	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 40 : 60	65
รูปที่ ก-4	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 50 : 50	66
รูปที่ ก-5	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 60 : 40	67
รูปที่ ก-6	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 70 : 30	68
รูปที่ ก-7	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 80 : 20	69
รูปที่ ก-8	แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 90 : 10	70
รูปที่ ก-9	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 20 : 80	71
รูปที่ ก-10	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 30 : 70	72
รูปที่ ก-11	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 40 : 60	73
รูปที่ ก-12	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 50 : 50	74
รูปที่ ก-13	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 60 : 40	75

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หน้า

รูปที่ ก-14	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 70 : 30	76
รูปที่ ก-15	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 80 : 20	77
รูปที่ ก-16	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 90 : 10	78
รูปที่ ก-17	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 20 : 80	79
รูปที่ ก-18	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 30 : 70	80
รูปที่ ก-19	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 40 : 60	81
รูปที่ ก-20	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 50 : 50	82
รูปที่ ก-21	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 60 : 40	83
รูปที่ ก-22	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 70 : 30	84
รูปที่ ก-23	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 80 : 20	85
รูปที่ ก-24	แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 90 : 10	86

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 1
บทนำ

1.1 ความเป็นมาของโครงงาน

ปัจจัยที่มีผลต่อค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (Tautomeric equilibrium constant, K_z) ของสารในตัวทำละลายผสม ได้แก่ ชนิดของสาร และชนิดของตัวทำละลายที่ใช้ นอกจากนี้ยังขึ้นกับอัตราส่วนของตัวทำละลายผสม ตัวอย่างเช่น ในการศึกษาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ของ 3-ไฮดรอกซีไพริดีน (3-Hydroxypyridine) ในสารละลายผสมระหว่างน้ำกับเมทานอลที่อัตราส่วนต่างๆกัน (จากการทดลองของ David E. Metzler และคณะ) จากการศึกษาดังกล่าว แสดงให้เห็นว่าถ้าเราทำการเตรียมสารที่มีสมบัติทูโทเมอร์ในตัวทำละลายผสม สารนั้นจะเกิดเป็นสปีชีส์ขึ้น 2 สปีชีส์ คือ สปีชีส์ที่เป็นกลาง (Neutral form) และสปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์ (Dipolar form) ซึ่งจะเกิดเป็นสปีชีส์ใดมากกว่ากันนั้นขึ้นกับค่า K_z ซึ่งมีค่าแตกต่างกันตามอัตราส่วนของตัวทำละลาย

การศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ ทำให้ทราบการดำรงอยู่ของสปีชีส์ที่อัตราส่วนผสมและที่ pH ต่างๆ

ดังนั้น ในการสังเคราะห์สารชนิดใดชนิดหนึ่ง จะต้องคำนึงถึงค่า K_z นี้ด้วย เราสามารถควบคุมให้กลุ่มของสารที่มาต่อ เข้าในตำแหน่งที่ต้องการได้ โดยเลือกอัตราส่วนของตัวทำละลายผสมและ pH ให้เหมาะสม

1.2 ทบทวนงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

David E. Metzler, Carol M. Harris, Robert J. Johnson, Donald B. Siano และ J. A. Thomson [1] ศึกษาการดูดกลืนแสงของ 3-ไฮดรอกซีไพริดีน ในสารละลายผสมระหว่างน้ำกับเมทานอลที่อัตราส่วนต่างๆ แล้วคำนวณหาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (K_z) โดยใช้ Weighted least-squares minimization computer program พบว่า เมื่อเพิ่มปริมาณเมทานอลซึ่งเป็นตัวทำละลายอินทรีย์ จะทำให้ค่า K_z ลดลง แสดงว่ามีปริมาณสปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์ (Dipolar form) ลดลง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Jose Manuel Sanchez-Ruiz, Juan Llor และ Manuel Cortijo [2] ศึกษาการหาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (K_z) ของไพริดอกซีนและ 3-ไฮดรอกซีไพริดีนในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำ โดยการวัดการดูดกลืนแสง และหาค่าคงที่ไอออไนเซชัน โดยใช้เทคนิคโพเทนชิออเมตริก จากการศึกษาพบว่า เมื่อปริมาณไดออกเซนมากขึ้น ค่า K_z จะมีค่าลดลง และค่าคงที่โปรโตเนชันที่ตำแหน่งฟีนอเลต (Phenolate) หรือ ไพริดิเนียมไนโตรเจน (Pyridinium nitrogen) จะมีค่าเพิ่มขึ้น

นายธวัฒน์ชัย เกษสุรินทร์ชัย และ นายอมร พรหมเภสัชสกุล [3] ศึกษาการหาค่าคงที่โปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของน้ำ วิตามินบี 6 ไฮโดรคลอไรด์ และไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน (PIH) ในตัวทำละลายผสมระหว่างน้ำและไดออกเซนที่อัตราส่วน 100/0, 80/20, 60/40 และ 40/60 โดยใช้เทคนิคโพเทนชิออเมตริกไทเทรชัน นำผลที่ได้ไปคำนวณค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชัน โดยใช้โปรแกรม 'SUPERQUAD' พบว่า ค่าคงที่โปรโตเนชันรวมทั้งสปีชีส์ $[LH_3]^+$ ของ PIH ที่เกิดขึ้นมีแนวโน้มเพิ่มขึ้น เมื่อปริมาณไดออกเซนมากขึ้น ส่วนค่าคงที่ดีโปรโตเนชันของน้ำ รวมทั้งสปีชีส์ $[LH]$ ที่เกิดจาก PIH และวิตามินบี 6 ไฮโดรคลอไรด์ และสปีชีส์ $[L]^{2-}$ ของวิตามินบี 6 ไฮโดรคลอไรด์ มีแนวโน้มลดลงเมื่อปริมาณไดออกเซนมากขึ้น

นายกิติกร ปัญญาเทียม และ นางสาวศศิธร เอี่ยมธนะ [4] ศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน (PIH) กับโลหะยูรานิล และหาค่าคงตัวเสถียรภาพในการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน โดยใช้เทคนิคโพเทนชิออเมตริกไทเทรชัน จากการศึกษาพบว่า ขั้นแรกสมมติให้ PIH ที่เป็นลิแกนด์อิสระมีโครงสร้างเป็น LH_2 จากค่า log-β ของการเกิดโปรโตเนชันและดีโปรโตเนชัน อาจพิจารณาได้ว่าค่า log β ที่เท่ากับ 3.94760 น่าจะเป็นค่าคงที่ของการเกิดโปรโตเนชันที่ไนโตรเจน ซึ่งจะเกิดในช่วง pH ตั้งแต่ 2 ถึง 5 จากค่า log β ที่เท่ากับ -6.41049 น่าจะเป็นค่าคงที่ของการเกิดดีโปรโตเนชันที่ตำแหน่งฟีนอลิกไฮโดรเจน ซึ่งจะเกิดในช่วง pH เท่ากับ 3.1 และจะค่อยๆ เพิ่มสูงขึ้นจนสูงสุดที่ pH เท่ากับ 8 จากค่า log β ที่เท่ากับ -15.86356 น่าจะเป็นค่าคงที่ของการเกิดดีโปรโตเนชันจากฟีนอลิกไฮโดรเจน ซึ่งจะเกิดในช่วง pH เท่ากับ 8 และจะค่อยๆ เพิ่มสูงขึ้นจนสูงสุดที่ค่าความเป็นเบสสูงๆ ซึ่งจากค่า log β ที่ได้นำไปเป็นค่าตั้งต้นในการศึกษาถึงสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง PIH กับโลหะยูรานิล ซึ่งจะเกิดขึ้นในช่วง pH ตั้งแต่ 4 ถึง 5

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

นายบุญเลิศ อึ้งพงษ์พานิช และ นางสาวสุประภาดา โชติมณี [5] ศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน และการหาค่าคงตัวเสถียรภาพในการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน (PIH) กับไอออนของโลหะทรานสิชัน 7 ตัว คือ แคดเมียม (II) โคบอลต์ (II) คอปเปอร์ (II) เหล็ก (II) เหล็ก (III) นิกเกิล (II) และ ซิงค์ (II) โดยใช้เทคนิคโพเทนชิออเมตริกไทเทรชัน แล้วนำผลที่ได้มาคำนวณโดยใช้โปรแกรม 'SUPERQUAD' ทำให้ทราบถึงโครงสร้างของโมเลกุลของสารเชิงซ้อนสปีชีส์ต่างๆ ได้แก่ LH_3^+, LH^-, $[CoLH]^+$, $[CuLH]^+$, $[Fe(II)LH]^+$, $[Fe(III)LH]^+$, $[Ni(II)LH]^+$ และ $[Zn(II)LH]^+$ (เมื่อ LH_2 คือ PIH ที่เป็นลิแกนด์อิสระ) ค่าคงตัวเสถียรภาพเท่ากับ 5.75 , -8.58 , -3.7569 ,-3.46286, -3.18877 , -4.59039 , -3.5812 , -3.47439 และ -4.36767 ตามลำดับ โดยส่วนใหญ่จะเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนกับโลหะได้ดีในสภาวะที่เป็นเบสและความเข้มข้นของโลหะมากๆ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

1.3 วัตถุประสงค์

1.3.1 เพื่อหาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (Tautomeric equilibrium constant, K_T) ของสารประกอบกลุ่มไพริดอกซัลคือ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำ

1.3.2 เพื่อศึกษาผลของอัตราส่วนของตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำต่อค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์

1.3.3 เพื่อหาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11

1.3.4 เพื่อศึกษาผลของอัตราส่วนของตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำและ pH ต่อค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชัน

1.4 ขอบเขตของการศึกษา

1. ทำการหาค่าคงที่ของการเกิดทูโทเมอร์ของสารประกอบกลุ่มไพริดอกซัลได้แก่ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างๆ โดยใช้เครื่องวัดการดูดกลืนแสงแบบอัลตราไวโอเลต / วิสสิเบิล

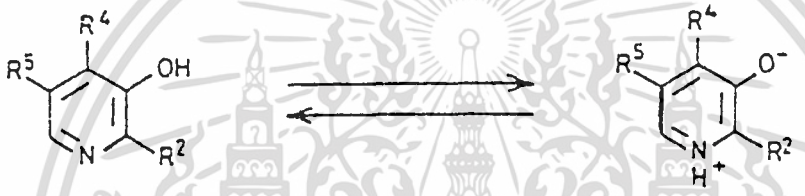
2. ทำการหาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างๆ โดยใช้เทคนิคโพเทนชิโอเมตริกไทเทรชัน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 2
ทฤษฎีและหลักการ

2.1 ทูโทเมอริซึม (Tautomerism)

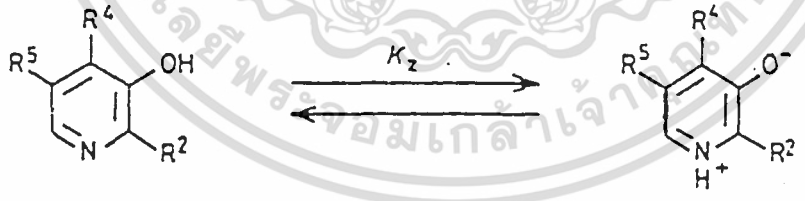
ทูโทเมอริซึม เป็นปรากฏการณ์การเกิดไอโซเมอร์ซึ่งแต่ละไอโซเมอร์อยู่ในสมดุลกัน ไอโซเมอร์ที่ เกิ ดขึ้น เรียกว่า ทูโทเมอร์ (Tautomers) ปรากฏการณ์นี้เป็นผลมาจากการเคลื่อนย้ายอะตอมไฮโดรเจนในโมเลกุลสาร ตัวอย่างของทูโทเมอริซึม เช่น ทูโทเมอริซึมของไพริดอกซินและ 3-ไฮดรอกซีไพริดีนดังรูปที่ 2-1



รูปที่ 2-1 3-Hydroxypyridine, $R^2 = R^4 = R^5 = H$; pyridoxine, $R^2 = CH_3$, $R^4 = R^5 = CH_2OH$ [2]

2.1.1 ค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (Tautomeric equilibrium constant, K_z)

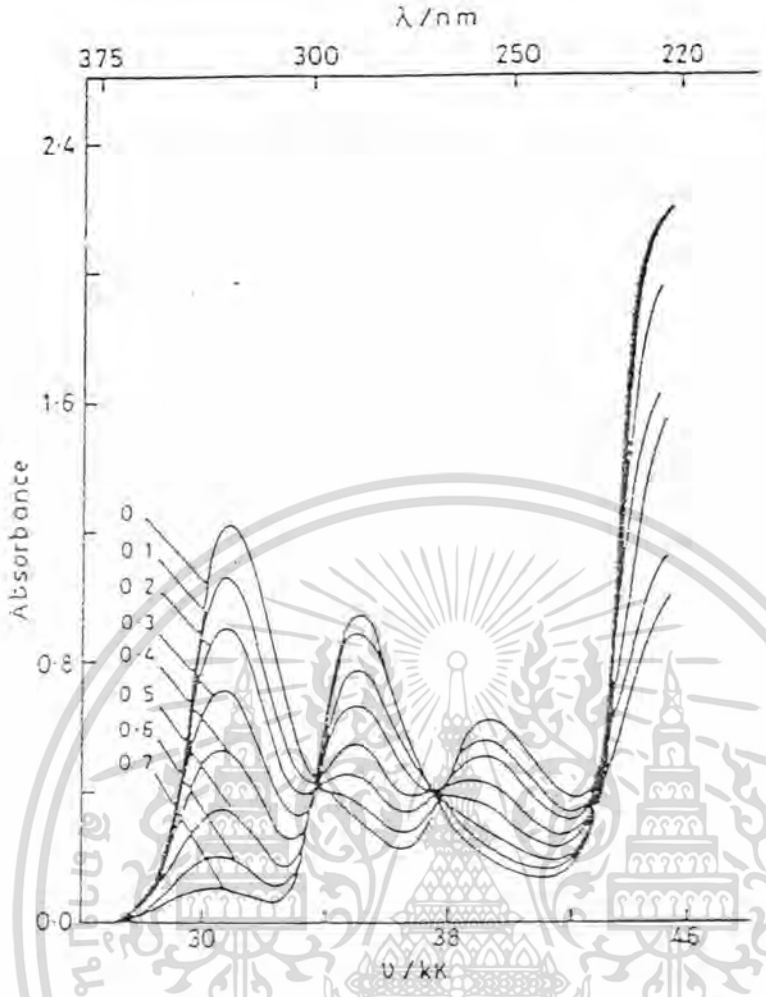
K_z คือค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ระหว่างสปีชีส์ที่เป็นกลางกับสปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์ เช่น ไพริดอกซิน แสดงได้ดังรูปที่ 2-2



รูปที่ 2-2 $R^2 = CH_3$, $R^4 = R^5 = CH_2OH$ [2]

สปีชีส์ที่เป็นกลางจะดูดกลืนแสงได้มากในตัวทำละลายที่ไม่มีขั้ว เช่น ไดออกเซน (มีการดูดกลืนแสงสูงสุดที่ 35 kK) ในทางตรงกันข้าม สปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์จะดูดกลืนแสงได้มากในตัวทำละลายที่มีขั้ว เช่น น้ำ (ดูดกลืนแสงสูงสุดที่ 30.8 kK และ 39.6 kK) ดังแสดงในรูปที่ 2-3

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2-3 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของไพริดอกซินที่ 25 °C ในสารละลายผสมไดออกเซนต่อน้ำที่อัตราส่วนต่างๆ 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7 ความเข้มข้นของไพริดอกซินทุกอัตราส่วนเป็น 1.00×10^{-4} M 1 kK = 10^3 cm^{-1} [2]

2.1.2 การคำนวณค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (K_z)

ค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (K_z) ระหว่างสปีชีส์ที่เป็นกลางกับสปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์ แสดงได้ดังรูปที่ 2-2

$$K_z = f_z / f_n \qquad (2\text{-}1)$$

เมื่อ f_z คือ molar fraction ของสปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์

f_n คือ molar fraction ของสปีชีส์ที่เป็นกลาง

โดย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$f_n = a_n / a^0_n \qquad (2\text{-}2)$$

และ

$$f_z = a_z / a^0_z \qquad (2\text{-}3)$$

เมื่อ a_n คือ พื้นที่การดูดกลืนแสง ของสปีชีส์ที่ว่องไวกับตัวทำละลายอินทรีย์

a^0_n คือ พื้นที่การดูดกลืนแสงของสปีชีส์ที่ ไม่ว่องไว กับตัวทำละลายอินทรีย์

a_z คือ พื้นที่การดูดกลืนแสงของสปีชีส์ที่ว่องไวกับน้ำ

a^0_z คือ พื้นที่การดูดกลืนแสงของสปีชีส์ที่ไม่ว่องไวกับน้ำ

แทนสมการ (2-2) และ (2-3) ในสมการ (2-1)

$$K_z = (a_z / a^0_z) / (a_n / a^0_n) \qquad (2\text{-}4)$$

$$K_z = (a^0_n / a^0_z)(a_z / a_n) \qquad (2\text{-}5)$$

เนื่องจาก $f_n + f_z = 1$ (2-6)

$$(a_n / a^0_n) + (a_z / a^0_z) = 1 \qquad (2\text{-}7)$$

เอา a^0_z คูณทั้งสองข้างของสมการ (2-7)

$$(a^0_z / a^0_n)\, a_n + a_z = a^0_z \qquad (2\text{-}8)$$

$$a_z = a^0_z - (a^0_z / a^0_n)\, a_n \qquad (2\text{-}9)$$

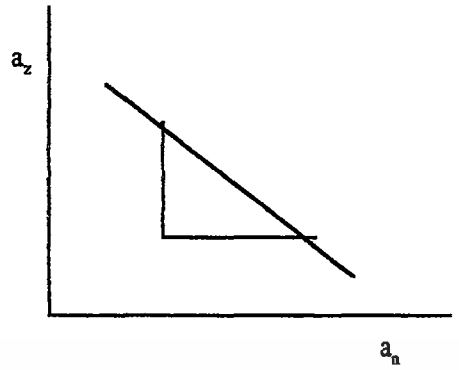
เราสามารถหาค่า a^0_z / a^0_n ได้โดยการพลอตกราฟระหว่าง a_z กับ a_n

จากสมการ (2-9)

$$\text{ความชัน} = -(a^0_z / a^0_n)$$

แสดงได้ดังรูปที่ 2-5

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2-4 การหาค่าความชันเพื่อนำไปใช้ในการคำนวณหาค่า K_z

โดยค่า a^0_z / a^0_n จะไม่เปลี่ยนแปลงไปตามองค์ประกอบของตัวทำละลาย

ดังนั้น สามารถหาค่า K_z ได้จากสมการ

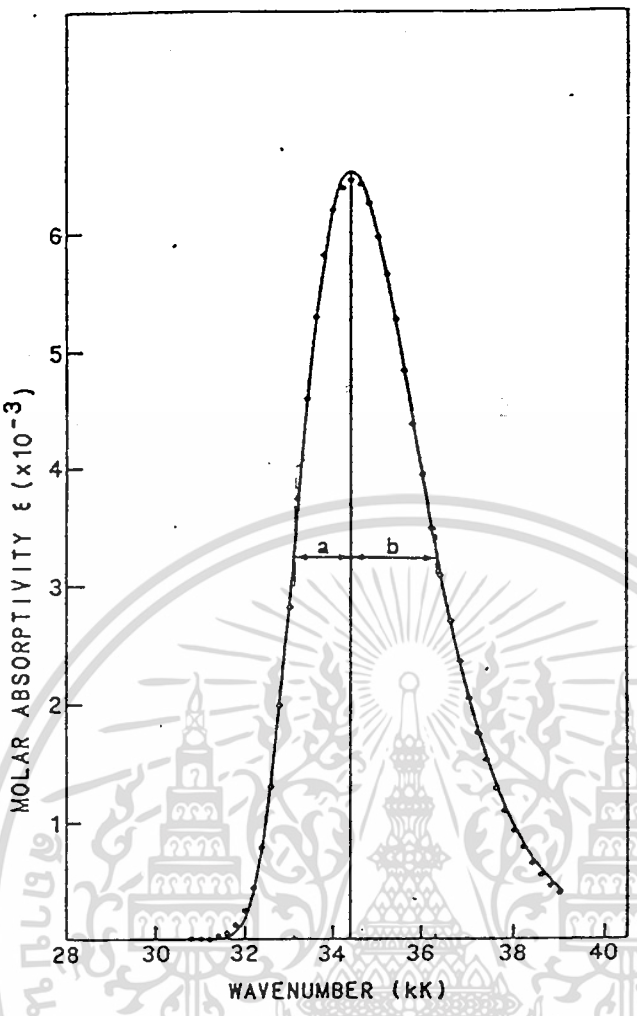
$$K_Z = (a_z / a_n) / (-\text{slope}) \qquad (2\text{-}10)$$

<u>หมายเหตุ</u> a_z และ a_n หาได้จากพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง

2.1.3 การหาพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง

พื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสงมีลักษณะเป็นแบบเกาส์เซียน (Gaussian curve) คือ พีกจะเบนไปทางความยาวคลื่นน้อย นั่นคือ $b > a$ ดังรูปที่ 2-5

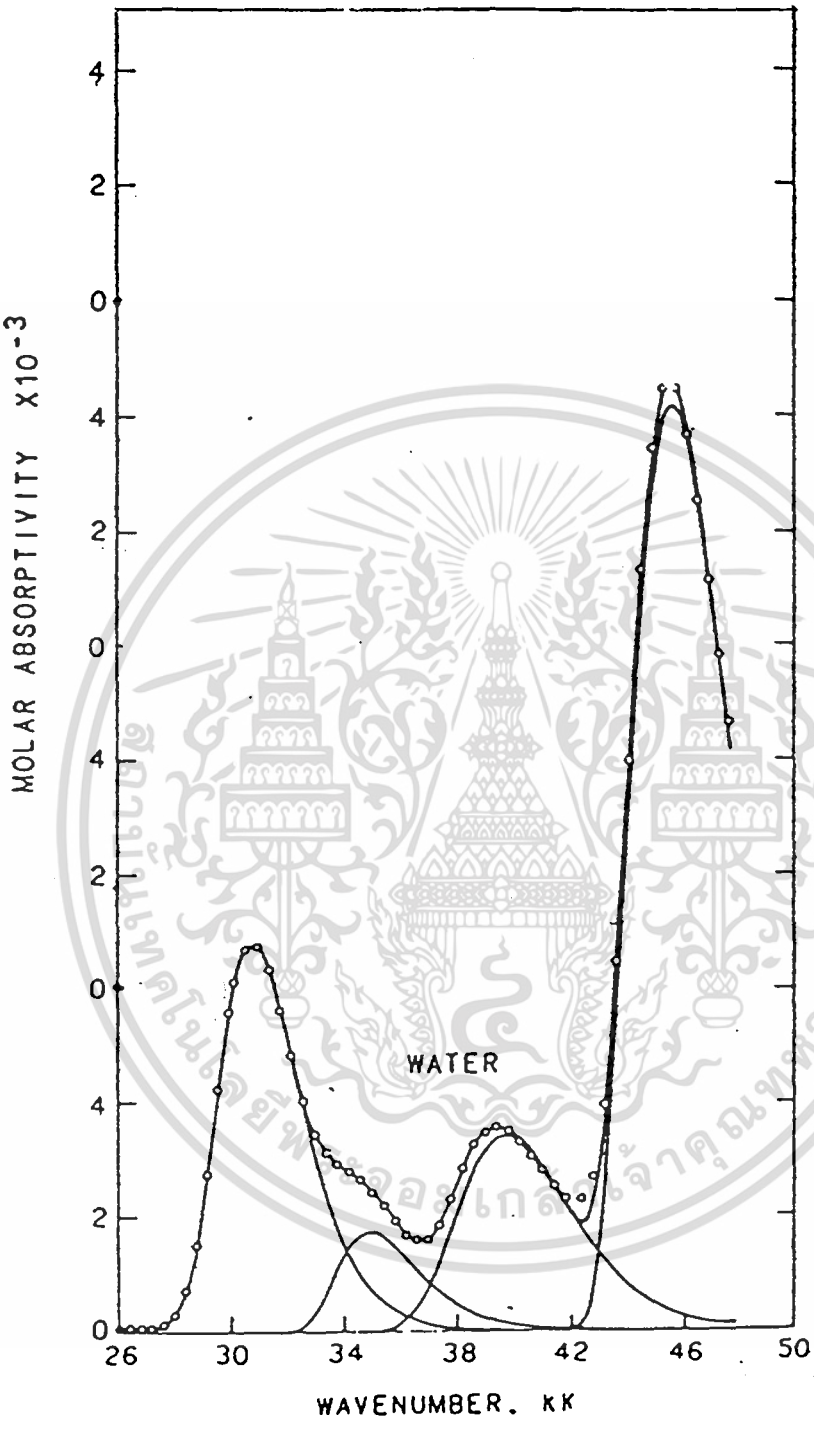
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2-5 ลักษณะพีกแบบเกาส์เซียน (Gaussian curve) [1]

การหาพื้นที่ใต้พีกโดยการอินทิเกรตทั้งหมดจะผิดพลาดได้เนื่องจากพีกเกิดการซ้อนทับกันดังรูปที่ 2-6

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2-6 การซ้อนทับกันของพีก [1]

ดังนั้นจึงทำการหาพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสงเพียงครึ่งพีก แล้วนำค่าที่ได้ไปแทนในสมการ (2-10) จะได้ค่า K_z ตามที่ต้องการ

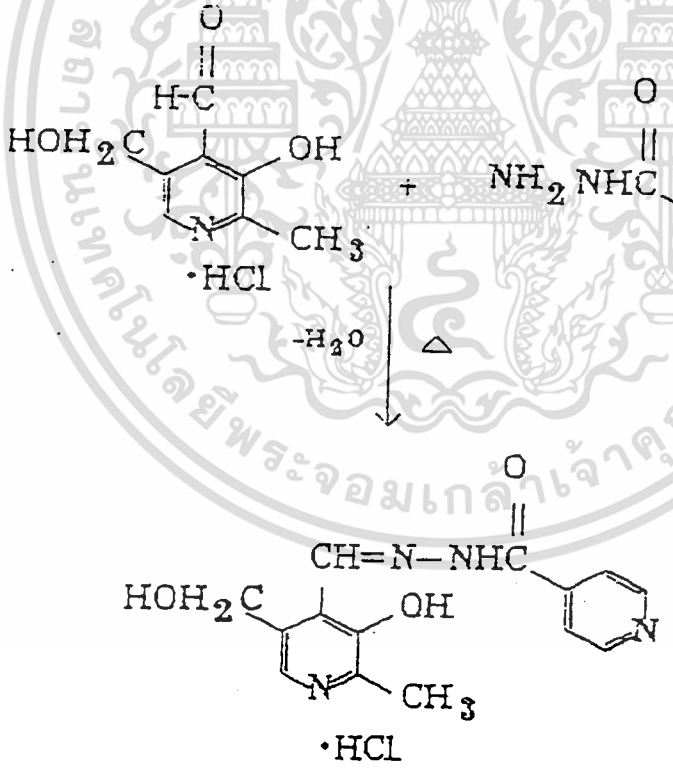
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับสารเคมี

2.2.1 ไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน (Pyridoxal Isonicotinoyl Hydrazone)

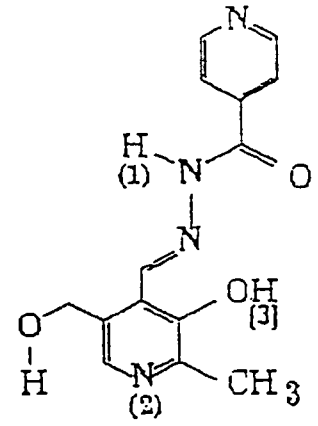
Pyridoxal Isonicotinoyl Hydrazone หรือ PIH เป็นสารประกอบอินทรีย์ที่ถูกสังเคราะห์ขึ้นเพื่อใช้ประโยชน์ในทางการแพทย์ ในการรักษาสภาพที่ร่างกายมีไอออนของโลหะเหล็กมากเกินไป (Iron Overload) ซึ่งมักมีสาเหตุมาจากการรักษาโรคเกี่ยวกับเลือด โดยอาศัยคุณสมบัติในการจับกับไอออนของโลหะเหล็กเกิดเป็นสารเชิงซ้อน PIH ถูกสังเคราะห์ขึ้นโดยปฏิกิริยาการควบแน่นระหว่าง Isonicotinoyl Hydrazide กับ Pyridoxal ในบัฟเฟอร์ Sodium Acetate 0.1 M โดยใช้ Pyridoxalhydrochloride ทำปฏิกิริยากับ Isonicotinic Acid Hydrazide ใน Methanol % Product = 93.60 ; อุณหภูมิการสลายตัวของ Product = 244 °C

ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นคือ



รูปที่ 2-7 ปฏิกิริยาแสดงการสังเคราะห์ไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน [5]

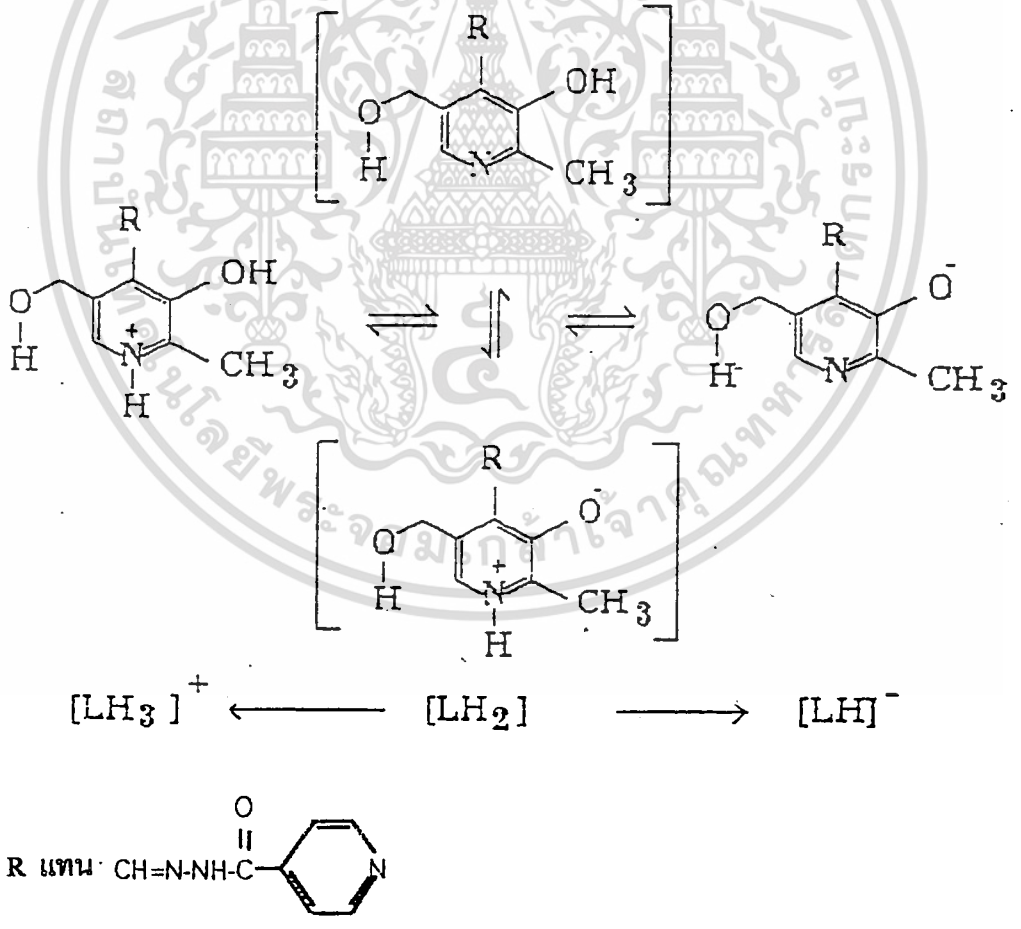
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2-8 โครงสร้างโมเลกุลของ PIH [5]

จากรูปที่ 2-8 โมเลกุล PIH จะมีการรับโปรตอน (Protonation) ที่ตำแหน่งที่ 2 และปลดปล่อยโปรตอน (Deprotonation) ที่ตำแหน่งที่ 1 และ 3

นอกจากนี้ PIH สามารถเกิดการเปลี่ยนรูปได้ที่ภาวะปกติ ดังแสดงในรูปที่ 2-9

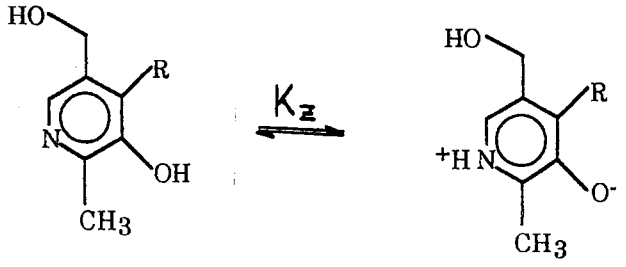


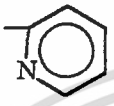
หมายเหตุ : R แทน

รูปที่ 2-9 สภาวะสมดุลการเกิด Protonation และ Deprotonation ของ PIH [5]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

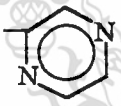
2.2.2 1-[Pyridoxylidene]-2-[2′- Pyrazyl] Hydrazine (SAG 47)



หมายเหตุ : R แทน CH=N-NH 

รูปที่ 2-10 โครงสร้างโมเลกุลของ SAG 47

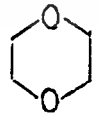
2.2.3 1-[Pyridoxylidene]-2-[2′- Pyridyl] Hydrazine (SAG 11)

หมายเหตุ : R แทน CH=N-NH 

รูปที่ 2-11 โครงสร้างโมเลกุลของ SAG 11

2.2.4 ไดออกเซน

ไดออกเซน (Dioxane) หรือ ไดเอทิลีนออกไซด์ มีสูตรโมเลกุล คือ $C_4H_8O_2$



รูปที่ 2-12 โครงสร้างไดออกเซน [6]

<u>สมบัติของไดออกเซน</u>

1. เป็นของเหลวที่ติดไฟได้ (Flammable liquid)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2. ละลายได้ในน้ำและตัวทำละลายอินทรีย์

3. ไดออกเซนมีความเป็นพิษ โดยทำให้เกิดการระคายเคืองต่อผิวหนัง ปอด และโพรงจมูก และอาจทำให้เกิดมะเร็งได้

4. ไดออกเซนมีน้ำหนักโมเลกุล = 88.11

จุดเดือด = 100-102 °C

จุดหลอมเหลว = 10-12 °C

จุดวาบไฟ = 11 °C

การนำไปใช้งาน

1. ใช้เป็นตัวทำละลายสำหรับเซลลูโลสอะซิเตท, เอทิลเซลลูโลส, เบนซิลเซลลูโลส, เรซิน, น้ำมัน และไข

2. ใช้เป็นตัวทำละลายสำหรับสารประกอบอนินทรีย์

2.3 โพเทนชิออเมตรี (Potentiometry)

โพเทนชิออเมตรี เป็นวิธีวิเคราะห์เชิงเคมีไฟฟ้า โดยอาศัยหลักการวัดความต่างศักย์ (Potential difference) ระหว่างขั้วไฟฟ้าสองขั้วที่จุ่มอยู่ในสารละลาย ณ สภาวะสมดุลของการดำเนินปฏิกิริยาเคมีแบบผันกลับของสารละลายนั้น ซึ่งเป็นสภาวะที่แทบไม่มีการไหลของกระแสเกิดขึ้นภายในวงจรเลย

ลักษณะของเซลล์ไฟฟ้าเคมีที่ใช้สำหรับการวิเคราะห์นี้ คือ กัลวานิกเซลล์ เนื่องจากศักย์ไฟฟ้าของเซลล์แบบกัลวานิกเซลล์ขึ้นอยู่กับแอคติวิตี (Activity) ของไอออนที่ไวต่อขั้วที่มีอยู่ในสารละลาย ดังนั้นการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จึงสามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์หาปริมาณของสารได้

2.3.1 อุปกรณ์ในการทำโพเทนชิออเมตรี

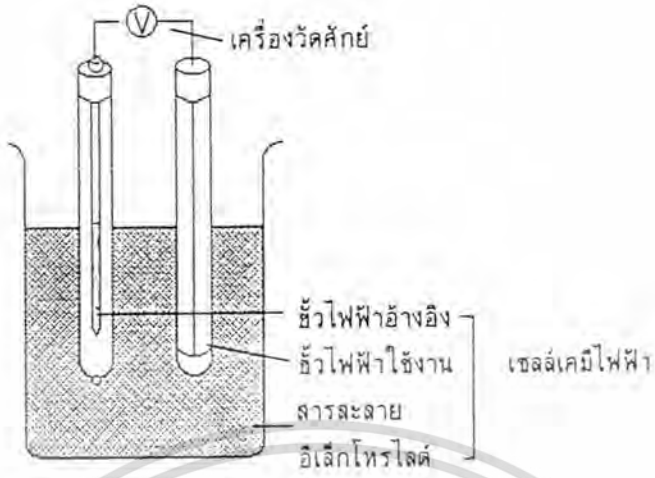
อุปกรณ์หลักในการทำโพเทนชิออเมตรี แบ่งเป็นสองส่วนดังนี้

1) ส่วนของเซลล์เคมีไฟฟ้าซึ่งประกอบด้วยขั้วอ้างอิงและขั้วทำงานจุ่มอยู่ในสารละลายอิเล็กโทรไลต์ของสารตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์

2) ส่วนของอุปกรณ์หรือเครื่องมือ ในการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ซึ่งเรียกว่า โพเทนชิออมิเตอร์หรือ พีเอชมิเตอร์

อุปกรณ์ทั้งสองส่วนต่อเข้าด้วยกันครบวงจรไฟฟ้า ดังแสดงในรูปที่ 2-13

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2-13 อุปกรณ์ในการทำโพเทนชิออเมตรี [7]

2.3.2 ขั้วไฟฟ้า

ขั้วไฟฟ้าเป็นส่วนประกอบของแต่ละครึ่งเซลล์เคมีไฟฟ้า ทำหน้าที่เป็นตัวนำไฟฟ้าต่อเชื่อมระหว่างสารละลายอิเล็กโทรไลต์และอุปกรณ์วัดสัญญาณไฟฟ้า

สารละลายที่ต้องการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าหรือ pH ต้องประกอบเป็นเซลล์เคมีไฟฟ้าโดยมีขั้วไฟฟ้าสองชนิดคือ

1) ขั้วชี้บอก (Indicator electrode) หรือขั้วทำงาน (Working electrode) เป็นขั้วที่ไวต่อไอออนที่ต้องการวิเคราะห์หาปริมาณ การเปลี่ยนแปลงใด ๆ ในสารละลายอันเป็นผลมาจากการเกิดปฏิกิริยาของสารตัวอย่างจะไปมีผลต่อค่าศักย์ไฟฟ้าของขั้วนี้ ซึ่งทำหน้าที่เป็นขั้วแคโทดของเซลล์

ขั้วไฟฟ้าทำงานที่ใช้ในการทำโพเทนชิออเมตรี ได้แก่ ขั้วไฟฟ้ารีดอกซ์ (Redox electrode) และขั้วไฟฟ้าแบบเยื่อ (Membrane electrode)

2) ขั้วอ้างอิง (Reference electrode) ใช้เป็นเพียงขั้วที่ต่อเพื่อให้ครบวงจรไฟฟ้าเท่านั้น และมักถูกต่อไว้ทางด้านแอโนด ขั้วอ้างอิงเป็นขั้วที่ไม่ขึ้นกับความเข้มข้นของไอออนในสารละลายและต้องมีศักย์ไฟฟ้าคงที่ ไม่ขึ้นกับการเปลี่ยนแปลงของกระแสในวงจร (เป็นขั้วไฟฟ้าแบบนอนโพลาไรซ์ในอุดมคติ) ไม่ขึ้นกับส่วนประกอบของสารตัวอย่าง ขั้วไฟฟ้าอ้างอิงที่ดีต้องมีส่วนประกอบคงตัวไม่เปลี่ยนแปลงง่ายเมื่อเก็บไว้ และไม่แปรเปลี่ยนตามอุณหภูมิด้วย

ขั้วไฟฟ้าอ้างอิงที่นิยมใช้ในการวิเคราะห์แบบโพเทนชิออเมตรีคือ ขั้วไฟฟ้าคาโลเมล และขั้วไฟฟ้าซิลเวอร์-ซิลเวอร์คลอไรด์ การเลือกใช้ขึ้นอยู่กับส่วนประกอบของสารตัวอย่างที่วิเคราะห์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การระวังรักษาขั้วไฟฟ้า

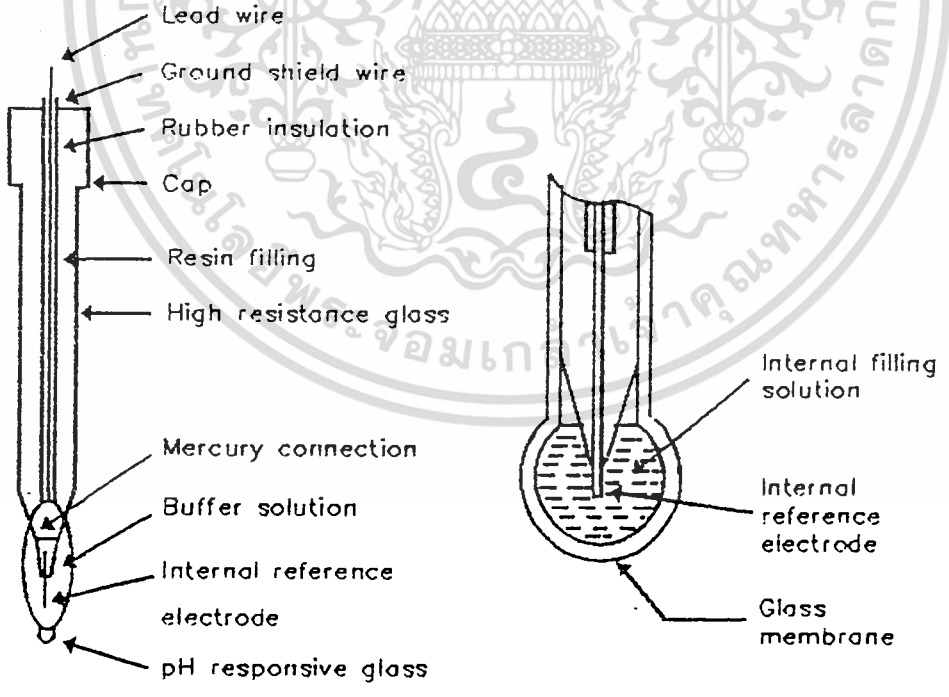
1) ในระหว่างการใช้งานให้ล้างขั้วไฟฟ้าด้วยน้ำกลั่นและซับให้แห้งทุกครั้งที่เปลี่ยนสารละลายใหม่ เพื่อป้องกันการปะปนของสารที่ติดมากับผิวหน้าของขั้วไฟฟ้า

2) ไม่ควรทิ้งขั้วไฟฟ้าไว้ในอากาศนานเกินไป ระหว่างช่วงพักของการใช้งานควรแช่ขั้วไฟฟ้าในน้ำกลั่นหรือสารละลายบัฟเฟอร์

3) เมื่อต้องการหยุดใช้งานเป็นเวลานาน ควรเก็บขั้วไฟฟ้าในกล่องเก็บ โดยเฉพาะขั้วไฟฟ้าอ้างอิงทุติยภูมิ ควรใช้ปลอกสวมป้องกันการระเหยของสารละลายภายในขั้วไฟฟ้า และถ้าเกิดผลึกบนขั้วไฟฟ้าอันเนื่องมาจากการระเหยของสารละลาย ควรแช่ขั้วไฟฟ้าในน้ำอุ่นๆ (อุณหภูมิของน้ำไม่เกิน 80 องศาเซลเซียส) เพื่อให้ผลึกละลายก่อนนำมาใช้งานครั้งต่อไป

2.4 ขั้วกลาสสำหรับวัด pH (Glass electrode for pH measurement)

ขั้วกลาสที่ใช้วัด pH ของสารละลายมีลักษณะดังแสดงในรูปที่ 2-14 สารละลายอิเล็กโทรไลต์ที่บรรจุอยู่ภายใน คือ กรดไฮโดรคลอริก (HCl) และมีขั้ว Ag/AgCl เป็นขั้วอ้างอิงภายในเพื่อทำให้สามารถต่อเซลล์ได้ครบวงจร ศักย์ไฟฟ้าของขั้วขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของ HCl ที่อยู่ภายนอก โดยมีกลาสเมมเบรนเป็นตัวกั้นระหว่างสารละลายภายนอกและภายใน



รูปที่ 2-14 ขั้วกลาสสำหรับวัด pH [8]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

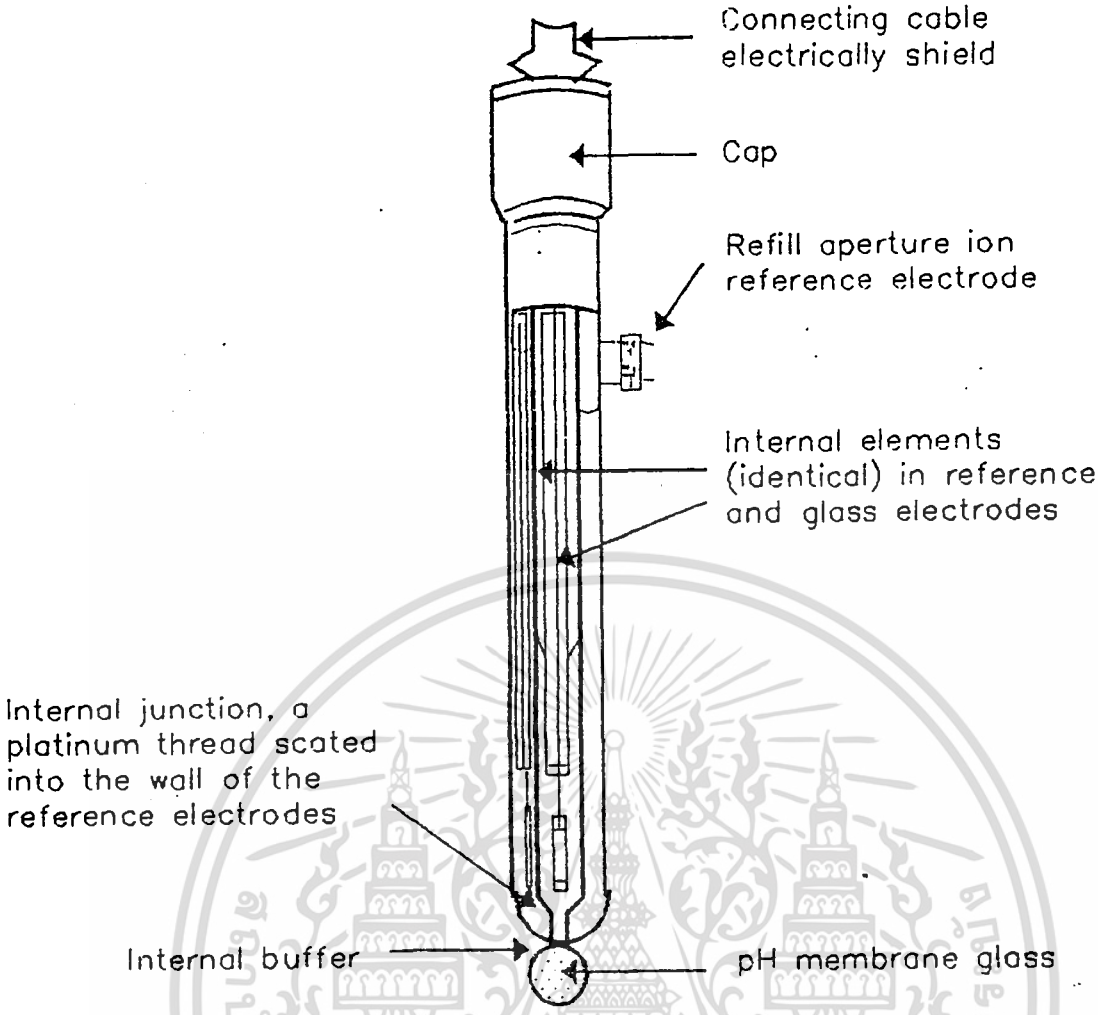
เมื่อต้องการวัด pH ของสารละลายต้องใช้ขั้วกลาสเป็นขั้วชี้บอก และขั้วคาโลเมลอิ่มตัวเป็นขั้วอ้างอิง จุ่มลงในสารละลายที่ต้องการวัดค่า pH แล้วต่อเข้าเครื่อง pH meter หรือโพเทนชิออมิเตอร์

ขั้วกลาสที่นำมาใช้ในการวัดค่า pH ของสารละลาย สามารถรับความรู้สึกต่อสารละลายได้ไว และเปลี่ยนแปลง pH ได้อย่างรวดเร็ว เพื่อปรับค่าให้อ่านได้อย่างถูกต้องเมื่อสารละลายเป็นสารละลายบัฟเฟอร์ แต่ถ้าสารละลายนั้นไม่ใช่สารละลายบัฟเฟอร์ ขั้วจะรับความรู้สึกต่อค่า pH นั้นได้ช้า ต้องให้เวลานานพอสมควรจึงจะอ่านค่า pH ได้ถูกต้อง เมื่อต้องการนำขั้วมาใช้วัดค่า pH แต่ละครั้งต้องล้างด้วยน้ำกลั่นหลายๆ ครั้งแล้วตามด้วย สารละลายที่ต้องการวัดค่า pH (Rinse) จากนั้นจึงค่อยอ่านค่า pH เมื่อขั้วกลาสจุ่มอยู่ในสารละลายจนค่าที่อ่านได้คงที่ สารละลายที่ไม่มีสมบัติเป็นสารละลายบัฟเฟอร์ เมื่อต้องการวัด pH ควรทำการคนสารละลายนั้นแรงๆ ขั้วกลาสสำหรับวัดค่า pH สามารถนำมาใช้ได้สะดวก มีสิ่งรบกวนน้อยกว่าการใช้ขั้วชนิดอื่น และมีราคาไม่แพง สารประเภทที่เป็นตัวออกซิไดส์หรือตัวรีดิวซ์โปรตีน และก๊าซ ไม่สามารถรบกวนการวัดค่า pH โดยใช้ขั้วกลาสได้

ขั้วกลาสโดยทั่วไปมีลักษณะดังรูปที่ 2-15 ซึ่งเป็นคอมบิเนชันอิเลคโทรด (Combination electrode) ประกอบด้วยขั้วอ้างอิงที่ทำด้วย Ag/AgCl จุ่มอยู่ในสารละลาย KCl 3 M สารละลายนี้จะเชื่อมต่อกับสารละลายภายนอกที่ต้องการวัดโดยผ่านไดอะเฟรม (Diaphragm) สำหรับขั้วชี้บอก ประกอบด้วยหลอดแก้วที่แยกต่างหากจากขั้วอ้างอิง ซึ่งข้างในจะประกอบด้วยส่วนที่นำไฟฟ้าที่ทำด้วย Ag/AgCl เช่นกัน จุ่มอยู่ในกรดไฮโดรคลอริก และสามารถเชื่อมต่อกับสารละลายภายนอกที่ต้องการวัดโดยผ่านกลาสเมมเบรน โดยเมมเบรนชนิดนี้จะยอมให้ H^+ ผ่านเข้าออก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

32033



รูปที่ 2-15 Combination electrode [8]

<u>ข้อจำกัดบางประการของขั้วกลาสที่อาจมีผลต่อการวัดค่า pH ของสารละลาย</u>

1. ศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตร (Asymmetry potential) ถ้าสารละลายที่ต้องการวัดค่า pH มีคุณสมบัติเหมือนกับสารละลายภายในขั้วกลาสทุกอย่าง และผิวของกลาสเมมเบรนทั้งสองข้างก็มีส่วนประกอบและคุณสมบัติเหมือนกัน ดังนั้น ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่วัดได้ควรมีค่าเท่ากับศูนย์ แต่จากการวัดค่าจริงๆ พบว่าศักย์ไฟฟ้าที่วัดได้ (E°) ไม่เป็นศูนย์ ศักย์ไฟฟ้าที่วัดได้นี้เรียกว่า **ศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตร** เมื่อขั้วกลาสมีอายุการใช้งานนานขึ้นพบว่าศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตรจะมีค่ามากขึ้น

อย่างไรก็ตาม ผลของค่าศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตรที่เกิดขึ้นนี้ สามารถกำจัดได้โดยการทำแคลิเบรทขั้วโดยใช้สารละลายมาตรฐานที่ทราบค่า pH ที่แน่นอน

2. Alkali error เป็นข้อผิดพลาดที่เกิดขึ้นเนื่องจากกลาสเมมเบรนที่ใช้มีความไวต่อแคทไอออนอื่นๆ นอกเหนือจากไฮโดรเจนไอออนได้ด้วย pH ที่วัดได้จะน้อยกว่าความเป็นจริง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3. Acid error เกิดตรงข้ามกับ Alkali error ค่า pH ที่วัดได้จะน้อยกว่าความเป็นจริง และพบว่าเมื่อ pH ต่ำลง ข้อผิดพลาดของ pH ที่วัดได้จะสูงขึ้น

4. Dehydration ขั้วกลาสที่ใช้วัด pH ของสารละลาย ไม่ควรปล่อยทิ้งให้แห้ง ผิวของกลาสเมมเบรนต้องถูกไฮเดรตตลอดเวลาด้วยสารละลายเกลือที่เป็นชนิดเดียวกันและมีความเข้มข้นเท่ากับสารละลายภายในเอง (ในกรณีนี้จะเป็นสารละลาย KCl 3 M) มิฉะนั้นจะทำให้การวัดค่า pH ของสารละลายเกิดข้อผิดพลาดได้

5. Variation in junction potential ค่าศักย์ไฟฟ้าที่เกิดขึ้นที่รอยต่อของสารละลายอาจเกิดการเปลี่ยนแปลงได้บ้าง ทำให้ค่า pH ที่วัดได้ไม่แน่นอน โดยปกติจะเปลี่ยนแปลงได้ถึง 0.01 หน่วยของ pH จึงทำให้การวัด pH ของสารละลายชนิดเดียวกันได้ค่าที่แตกต่างกัน

4. ข้อผิดพลาดจากค่า pH ของสารละลายบัฟเฟอร์ ในการวัดค่า pH ของสารละลายทุกครั้ง ต้องมีการทำอิเลคโทรดแคลิเบรชัน ด้วยสารละลายบัฟเฟอร์มาตรฐาน ถ้าสารละลายบัฟเฟอร์ที่ใช้ทำแคลิเบรชันมีค่า pH เปลี่ยนแปลงไป เนื่องจากการเก็บรักษาไว้ไม่ดีทำให้ส่วนประกอบเกิดการเปลี่ยนแปลง เป็นสาเหตุทำให้การวัด pH ของสารละลายตัวอย่างผิดพลาดด้วย ดังนั้นเพื่อกำจัดข้อบกพร่องชนิดนี้ และในกรณีที่ปรับค่าความแรงไอออนของการทำอิเลกโทรดแคลิเบรชันและค่าความแรงไอออนของสารละลายในขณะทำการทดลองให้ใกล้เคียงกัน (ความแรงไอออนที่แตกต่างกันมีผลต่อค่า pH และอิเลคโทรดพารามิเตอร์ที่ได้ออกมาแตกต่างกันด้วย) จึงทำอิเลกโทรดแคลิเบรชันด้วยวิธีการไทเทรตกรด-เบส ซึ่งเป็นการวัดค่าศักย์ไฟฟ้า (mV) โดยตรง และใช้โปรแกรมทางคอมพิวเตอร์คำนวณค่า E° , Electrode slope และค่าความเข้มข้นของกรด หรือเบสค่าใดค่าหนึ่ง ค่าทั้งหมดเหล่านี้สามารถนำมาคำนวณย้อนกลับเป็นค่า pH ได้

2.5 <u>ศักย์ไฟฟ้าของขั้ว</u> (Electrode potential , E)

ศักย์ไฟฟ้าของขั้ว หมายถึง พลังงานทางไฟฟ้าที่ต้องใช้ ในการทำให้ประจุลบเคลื่อนที่จากขั้วหนึ่งไปยังจุดๆหนึ่งที่มีระยะทางถึงอนันต์ หรือหมายถึง พลังงานทางไฟฟ้าที่ต้องใช้ในการดึงประจุบวกจากจุดอนันต์ให้เคลื่อนที่เข้าหาขั้วนั้น ปกติจะไม่สามารถวัดค่าพลังงานนั้นได้โดยตรง แต่สามารถหาความแตกต่างของาพลังงานนั้นระหว่างขั้ว 2 ขั้วได้ โดยนำขั้ว 2 ชนิดประกอบกันเป็นเซลล์ไฟฟ้าเคมีแล้ววัดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ ศักย์ไฟฟ้าของขั้วที่วัดที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส และความเข้มข้นของสารละลายเท่ากับ 1 หน่วยแอคทิวิตี เรียกว่า ศักย์ไฟฟ้าของขั้วมาตรฐาน (Standard electrode potential , E°) ถ้ามีการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นและอุณหภูมิ ศักย์ไฟฟ้าของขั้วจะเปลี่ยนค่าไปตามสมการของเนินสท์ (Nernst equaion) ดังนี้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

พิจารณาปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นคือ

$$A_{ox} + n = A_{red} \quad (2\text{-}11)$$

$$E = E^{\circ} - 2.303\,[RT/nF] \log [a_{red}/a_{ox}] \quad (2\text{-}12)$$

โดย

$$a_{red} = \gamma_{red}[A_{red}]$$

$$a_{ox} = \gamma_{ox}[A_{ox}]$$

แทนค่า a ลงในสมการ (2-12) จะได้

$$E = E^{\circ} - 2.303[RT/nF] \log[\gamma_{red}A_{red}/\gamma_{ox}A_{ox}] \quad (2\text{-}13)$$

ปกติในกรณีของไอออนชนิดเดียวกันค่า γ จะไม่ต่างกันมากดังนั้นถือว่า

$$\gamma_{red} = \gamma_{ox}$$

$$E = E^{\circ} - 2.303[RT/nF] \log[A_{red}/A_{ox}] \quad (2\text{-}14)$$

เมื่อ E = ศักย์ไฟฟ้า หน่วยเป็นมิลลิโวลต์

E° = ศักย์ไฟฟ้าของขั้วมาตรฐาน หน่วยเป็นมิลลิโวลต์

R = ค่าคงที่ของแก๊ส มีค่าเท่ากับ 8.314

T = อุณหภูมิ มีหน่วยเป็นเคลวิน

F = ค่าคงที่ของฟาราเดย์ มีค่าเท่ากับ 96,500 คูลอมบ์

n = จำนวนอิเล็คตรอนที่ถ่ายเทในปฏิกิริยา

$[A_{red}]$ = ความเข้มข้นของตัวรีดิวซ์ หน่วยเป็นโมลาร์

$[A_{ox}]$ = ความเข้มข้นของตัวออกซิไดซ์ หน่วยเป็นโมลาร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากสมการของเนินสท์ ทำให้สามารถคำนวณหาค่าศักย์ไฟฟ้าของขั้วที่จุ่มอยู่ในสารละลายที่มีความเข้มข้นและอุณหภูมิต่างๆกัน เมื่อต้องการหาค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ก็สามารถคำนวณหาได้จากสมการ

$$E = E_{cathode} - E_{anode} \qquad (2\text{-}15)$$

สำหรับ Combination electrode ศักย์ไฟฟ้าที่เกิดขึ้นภายในเซลล์จะมีค่าดังนี้

$$E = E_{ref} - E_{Ag/AgCl} + E_j + (V_2 - V_1) \qquad (2\text{-}16)$$

เมื่อ E_j = ศักย์ไฟฟ้าที่รอยต่อของสารละลายระหว่างขั้ว E_{ref} กับสารละลายที่ต้องการวิเคราะห์

V_1 = ศักย์ไฟฟ้าที่รอยต่อระหว่างกลาสเมมเบรนกับสารละลาย H^+ ที่ต้องการวิเคราะห์

V_2 = ศักย์ไฟฟ้าที่รอยต่อระหว่างกลาสเมมเบรนกับสารละลาย H^+ ที่อยู่ในขั้วกลาส

เนื่องจาก E_{ref} , $E_{Ag/AgCl}$ และ E_j เป็นค่าคงที่ ดังนั้นศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จะมีค่าเท่าไรนั้นขึ้นอยู่กับค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าระหว่าง V_2 กับ V_1 และค่า V_2 กับ V_1 จะมีค่าเท่าไรนั้นขึ้นอยู่กับ pH ของสารละลาย เพราะเกิดการแลกเปลี่ยน H^+ ที่ผิวของกลาสเมมเบรน

ถ้าความต่างศักย์ไฟฟ้าของผิวเมมเบรนทั้งสองข้างมีค่าน้อย จะได้ว่า

$$V_2 - V_1 = \text{constant} + 2.303[RT/F] \log\{1/H^+\} \qquad (2\text{-}17)$$

แทนค่าสมการ (2-17) ลงในสมการที่ (2-16)

$$E = E_{ref} - E_{Ag/AgCl} + E_j + \text{constant} + 2.303[RT/F]\log[1/H^+] \qquad (2\text{-}18)$$

จัดรูปสมการใหม่ได้

$$E = k + 2.303[RT/F] * pH \qquad (2\text{-}19)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ค่า k คือ ค่าคงที่ที่สามารถคำนวณได้จากการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของสารละลายมาตรฐานที่ทราบค่า pH ที่แน่นอน ในกรณีที่ความเข้มข้นของสารละลายเท่ากับศูนย์ ค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่ได้ ก็คือศักย์ไฟฟ้าของเซลล์มาตรฐาน (E^0) นั่นเอง ดังนั้นค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานที่อุณหภูมิใดๆ ก็ตาม จะมีค่าเท่ากันเสมอ (ในทางปฏิบัติมักอนุโลมว่าค่า k ก็คือค่า E^0 ด้วย)

2.6 <u>โพเทนชิออเมตริกไทเทรชัน</u> (Potentiometric titration)

คือ วิธีการวิเคราะห์ที่ใช้เทคนิคของการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าควบคู่กับเทคนิคของการไทเทรต โดยการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของสารละลายที่ถูกไทเทรตทุกๆ ครั้งที่มีการเติมไทแทรนต์ลงไป แล้วนำข้อมูลที่วัดได้มาสร้างกราฟโดยให้ค่าศักย์ไฟฟ้าที่อ่านได้เป็นแกน Y และปริมาณไทแทรนต์ที่เติมเป็นแกน X ซึ่งทำให้ได้กราฟที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าศักย์ไฟฟ้ากับปริมาณไทแทรนต์ ที่เรียกว่า ไทเทรชันเคอร์ฟ (Titration curve) จากไทเทรชันเคอร์ฟ สามารถหาจุดยุติของการไทเทรตได้ การวิเคราะห์ทำได้โดยเลือกใช้ขั้วชี้บอกที่เหมาะสม ประกอบเป็นเซลล์ไฟฟ้าเคมีโดยใช้ขั้วคาโลเมลเป็นขั้วอ้างอิง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.7 หลักการของโปรแกรม SUPERQUAD (SUPER)

โปรแกรม SUPERQUAD เป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ภาษาฟอร์แทรนที่ได้รับการพัฒนามาใช้ในการคำนวณค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน โดยโปรแกรมนี้สามารถใช้คำนวณค่าความเข้มข้นของสารตั้งต้น หรือค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของอิเลกโทรดได้ด้วย โดยโปรแกรมเปิดทางเลือกให้สามารถกำหนดตัวแปรเหล่านี้ เป็นตัวแปรที่ไม่ทราบค่า และให้คอมพิวเตอร์คำนวณค่าออกมา หลักการของโปรแกรม SUPERQUAD มีดังต่อไปนี้

สำหรับสปีชีส์ทางเคมี A_aB_b.... แต่ละตัวที่เกิดขึ้นอันเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีในสารละลายจะมีค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาดังนี้

$$\beta_{ab} = [\, A_aB_b \ldots \,] / [\, A^a \,][\, B^b \,] \ldots \qquad (2\text{-}20)$$

เมื่อ β_{ab} คือ ค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา

A และ B คือ สารตั้งต้น (สำหรับโปรแกรมนี้มีได้ไม่เกิน 4 ตัว)

[A] และ [B] คือ ความเข้มข้นของสารที่เป็นอิสระแต่ละตัว

สมการสมดุลย์ของมวล (Mass-balance equation) ที่จะสอดคล้องกับสปีชีส์ทางเคมีและค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา จากสมการที่ (2-20) จะเป็น

$$T_A = [A] + \Sigma a_k \beta_{ab} \ldots [A]^a [B]^b \ldots \qquad (2\text{-}21)$$

$$T_B = [B] + \Sigma b_k \beta_{ab} \ldots [A]^a [B]^b \ldots \qquad (2\text{-}22)$$

T_A , T_B... คือ ความเข้มข้นทั้งหมดของสาร A, สาร B และอื่นๆที่เกี่ยวข้องทั้งหมดในปฏิกิริยา โดยสมมุติว่าจำนวนสปีชีส์ที่มีทั้งหมดเท่ากับ k

ความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่เป็นอิสระ [A], [B]... อย่างน้อยหนึ่งตัวจะถูกวัดหาปริมาณโดยตรงโดยอิเลกโทรดที่ไวต่อสารนั้นๆ (ในการทดลองนี้ใช้ pH อิเลกโทรดวัดความเข้มข้น H^+ เพียงตัวเดียว) โดยวัดศักย์ไฟฟ้าทุกๆจุดของสมการ (2-22) ที่มีการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของ T_A , T_B... อันเนื่องมาจากการไทเทรต

การแก้สมการที่ (2-22) โดยวิธี Numerical method จะทำให้สามารถหาค่าตัวแปรที่ต้องการ เช่น ค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยา (K) หรือค่าความเข้มข้น T_A ,T_B และอื่นๆได้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เนื่องจากสมการ (2-22) จะเป็นจริงก็ต่อเมื่อ มีแบบจำลองของระบบสมดุลที่สมเหตุผลซึ่งการคาดคะเนว่าระบบปฏิกิริยาที่กำลังศึกษาอยู่จะมีสปีชีส์ใดในระบบสมดุลบ้าง สามารถทำได้โดยทำการศึกษาปฏิกิริยานั้นอย่างลึกซึ้งเท่านั้น ในทางปฏิบัติทำได้โดยอาศัย การศึกษาปฏิกิริยาที่ใกล้เคียงและอาศัยหลักทางสถิติเข้าช่วย

2.8 หลักการของโปรแกรม ELECTRODE CALIBRATION (ELE)

โปรแกรม ELE เป็นโปรแกรมที่ใช้ทำ Electrode calibration สมการหลักที่ใช้สำหรับโปรแกรมนี้คือสมการ Extended nernst equation ซึ่งมีดังนี้คือ

$$E = E^0 + S_L \log [H^+] + A [H^+] + B / [H^+] \qquad (2\text{-}23)$$

เมื่อ E คือ ค่าศักย์ไฟฟ้าที่วัดได้ (มิลลิโวลต์)

E^0 คือ ค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของขั้วอิเลกโทรด (มิลลิโวลต์)

S_L คือ ค่าความชัน (มีค่าเท่ากับ RT / nF)

A คือ ค่า Acid correction factor

B คือ ค่า Base correction factor

สำหรับการไทเทรตที่ยังอยู่ในช่วงเป็นกรด (Acidic range) และก่อนถึงจุดยุติ (End point) $[H^+]$ คำนวณได้จาก

$$[H^+] = (C_A V_A - C_B V_B) / (V_A + V_B) \qquad (2\text{-}24)$$

เมื่อผ่านจุดยุติ (End point) ไปแล้วและอยู่ในช่วงที่เป็นด่าง $[H^+]$ คำนวณได้จาก

$$[H^+] = 10^{Kw} / ((C_B V_B - C_A V_A) / (V_A + V_B)) \qquad (2\text{-}25)$$

เมื่อ V_A, V_B คือ ปริมาตรของกรดและเบสที่ใช้

C_A, C_B คือ ความเข้มข้นของกรดและเบสที่ใช้ และ Kw คือค่าคงที่ของการแตกตัวของน้ำตามสมการ $H_2O = 2H^+ + O^-$ ซึ่งมีค่า $pKw = 14$ ที่สภาวะมาตรฐาน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

(Standard state) หรือมีค่า 13.50 ที่สารละลาย KNO_3 0.15 โมลาร์ อุณหภูมิ 37 องศาเซลเซียส ส่วน A และ B คือ Acid correction และ Base correction ในกรณีที่ Electrode ไม่เป็นเชิงเส้นตามสมการของเนิสท์ (Nernst equation)

จากสมการ (2-22) ถึง (2-24) สามารถเขียนออกมาในรูปฟังก์ชันได้ดังนี้

$$E = f(E^0, S_L, C_A, C_B, V_A, V_B, Kw) \qquad (2\text{-}26)$$

ตัวแปรทั้งหมด 8 ตัวจากสมการ (2-) ค่า E และ V_B เราสามารถวัดได้ในขณะทำการไทเทรต C_A, C_B และ V_A เป็นค่าที่หาได้จากการเตรียมสารละลาย ดังนั้นทำให้เราสามารถคำนวณหาค่า E^0 และ Kw ได้ในกรณีที่มีข้อมูลจากการไทเทรตมากพอ เราเพียงแต่วัดค่า E และ V_B ให้มากพอเท่านั้น ก็สามารถคำนวณตัวแปรที่เหลือคือ E^0, S_L, C_A, C_B และ Kw ได้ ในการวัดค่าศักย์ไฟฟ้า E เราจะใช้ Glass electrode เป็นตัววัดเมื่อทำการไทเทรตด้วยสารละลายเบส (เติม V_B) ค่าความเข้มข้นของ H^+ จะเปลี่ยนไปทำให้ค่า E ที่อ่านได้เปลี่ยนแปลง

ข้อดีของการใช้โปรแกรม ELE คือทำให้ได้ค่า E^0, S_L อยู่ในเงื่อนไขที่ใกล้เคียงกับสภาวะการทดลองมากขึ้น (เช่น ค่าความแรงไอออนและอุณหภูมิ) และทำให้สามารถตรวจสอบความเข้มข้นของกรดหรือเบสตัวใดตัวหนึ่งได้ด้วย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 3
การวิจัยและการดำเนินงาน

3.1 สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง

1) ไดออกเซน เกรดวิเคราะห์ , Fluka Chemicals

2) สารตัวอย่าง ได้แก่ สารประกอบกลุ่มไพริดอกซัล คือ ไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน (PIH) , SAG 11 และ SAG 47

3) กรดไนตริก ความเข้มข้น 5 M และ 0.25 M เกรดงานวิเคราะห์ , Merck

4) สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ ความเข้มข้น 0.25 M เกรดงานวิเคราะห์ , Fluka Chemicals

5) น้ำกลั่นเกรดงานวิเคราะห์ , องค์การแบตเตอรี่

6) ก๊าซไนโตรเจน เกรดงานวิเคราะห์ , TIG

3.2 อุปกรณ์และเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง

1) เครื่องชั่งน้ำหนักอย่างละเอียด

2) บีกเกอร์

3) แท่งแก้วคน

4) กระบอกตวง

5) ขวดวัดปริมาตรขนาด 10 25 และ 250 ลบ.ซม.

6) ลูกยาง

7) UV/VIS-Spectrophotometer รุ่น UV-7800 ของบริษัท Jasco

8) คอมพิวเตอร์พร้อมเครื่องพิมพ์

9) เทอร์โมมิเตอร์

10) ขวดสามคอ ขนาด 50 ml

11) ไมโครปิเปต ขนาด 0-50 ไมโครลิตร

12) อ่างน้ำร้อนที่ควบคุมอุณหภูมิได้ พร้อมปั๊มน้ำขนาดเล็ก

13) คอมพิวเตอร์พร้อมเครื่องพิมพ์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

14) เครื่องกวนสารละลายโดยใช้แรงทางแม่เหล็ก พร้อมแท่งแม่เหล็ก

15) ถังก๊าซไนโตรเจนพร้อมมาตรวัดความดัน และวาล์วควบคุมความดัน

16) เครื่องไทเทรตอัตโนมัติ พร้อมเครื่องวัดพีเอชและอิเลคโทรดของ Schott รุ่น TR 600

3.3 การหาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์

วิธีดำเนินงานวิจัย

1) เตรียมสารละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำ อัตราส่วน 50:50 (โดยปริมาตร) ในขวดวัดปริมาตรขนาด 250 ลบ.ซม. (ขวดที่ 1) และในขวดวัดปริมาตรขนาด 25 ลบ.ซม. (ขวดที่ 2) เรียกสารละลายในขวดที่ 1 ว่า Solution 1

2) ใส่สารตัวอย่างลงในสารละลายผสมข้อ 1) ขวดที่ 2 ในปริมาณที่ทำให้เกิดพีกของการดูดกลืนแสงชัดเจน (ประมาณ 0.01-0.02 กรัม) เรียกสารละลายนี้ว่า Solution 2

3) เตรียมสารละลายผสมระหว่างไดออกเซน น้ำ และสารตัวอย่าง ในอัตราส่วนของไดออกเซนต่อน้ำเท่ากับ 10:90, 20:80, 30:70, 40:60, 50:50, 60:40, 70:30, 80:20 และ 90:10 ในขวดวัดปริมาตรขนาด 10 ลบ.ซม. โดยให้มีปริมาณสารตัวอย่างเท่ากันทุกขวด ซึ่งวิธีเตรียมสารละลายนี้ทำโดยปิเปตสารละลายต่างๆในปริมาตรดังตารางที่ 3-1

ตารางที่ 3-1 แสดงการเตรียมสารละลายผสมระหว่างไดออกเซน น้ำ และสารตัวอย่าง

อัตราส่วนระหว่างไดออกเซนกับน้ำ	solution 1 (cm^3)	solution 2 (cm^3)	ไดออกเซน (cm^3)	น้ำ (cm^3)	ปริมาตรรวม (cm^3)
10 : 90	0	2	8	-	10
20 : 80	2	2	6	-	10
30 : 70	4	2	4	-	10
40 : 60	6	2	2	-	10
50 : 50	8	2	-	-	10
60 : 40	6	2	-	2	10
70 : 30	4	2	-	4	10
80 : 20	2	2	-	6	10
90 : 10	0	2	-	8	10

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4) นำสารละลายที่เตรียมได้จากข้อ 3) ไปวัดการดูดกลืนแสงโดยเครื่อง UV-Spectrophotometer (ดูวิธีการใช้เครื่องจากภาคผนวก ค) ซึ่งก่อนทำการวัดต้องทำ Base line correction โดยใช้น้ำกลั่นเป็นแบลงค์ก่อน

เมื่อทำการวัดการดูดกลืนแสง จะพบว่ามีพีกที่น่าสนใจปรากฏขึ้น 2 พีก ได้แก่ พีกที่เกิดจากการดูดกลืนแสงของสารตัวอย่างในไดออกเซน หรือที่เรียกว่า Neutral form และ พีกที่เกิดจากการดูดกลืนแสงของ สารตัวอย่างในน้ำหรือที่เรียกว่า Dipolar form

5) ทำการอินทิเกรตพีก เพื่อหาพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง

พื้นที่ใต้พีกของสปีชีส์ที่เป็นกลาง แทนด้วย a_n

พื้นที่ใต้พีกของสปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์ แทนด้วย a_z

6) ทำการพลอตกราฟระหว่าง a_n (แกน x) กับ a_z (แกน y)

7) คำนวณค่าความชันของกราฟ (slope) จากสมการ (2-9)

$$a_z = a^0_z - (a^0_z / a^0_n) a_n$$

ได้

$$\text{ความชัน} = (-a^0_z / a^0_n)$$

8) นำค่าความชันที่คำนวณได้จากข้อ 7) มาหาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ในแต่ละอัตราส่วนของตัวทำละลายผสม

จากสมการ (2-10)

$$K_z = (a_z / a_n) / (-\text{slope})$$

3.4 การหาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชัน

3.4.1 การเตรียมสารละลายที่ใช้ในการทดลอง

1) สารละลายกรดไนตริก ความเข้มข้น 0.25 M

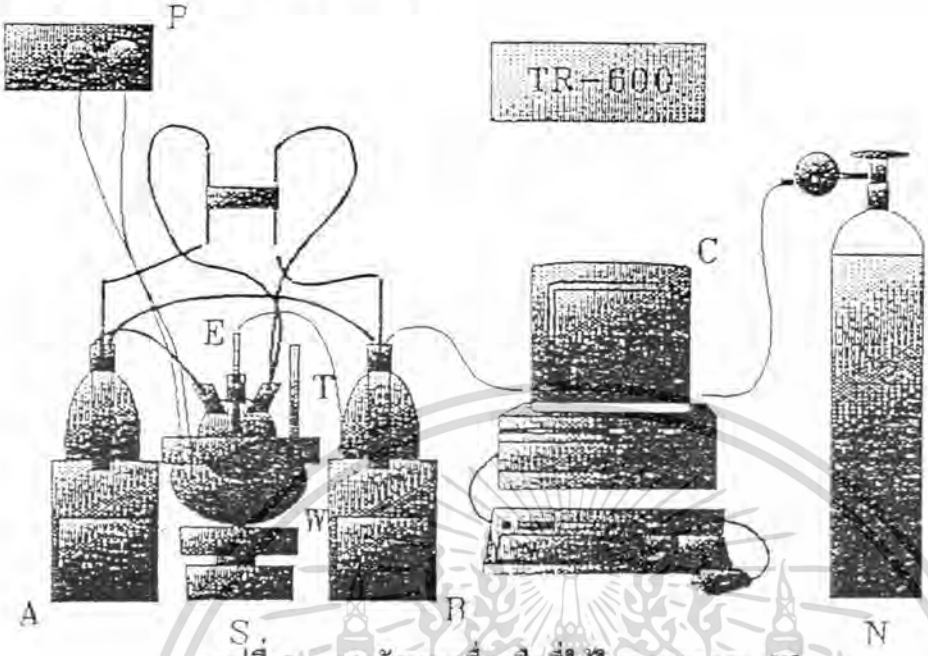
นำกรดไนตริกเข้มข้น 69 % มาจำนวน 16.08 ml เจือจางด้วยน้ำกลั่นจนมีปริมาตร 1 ลิตร

2) สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ ความเข้มข้น 0.25 M

ชั่งผงโซเดียมไฮดรอกไซด์ เกรดงานวิเคราะห์ ด้วยเครื่องชั่งที่ละเอียดให้ได้น้ำหนัก 10.0 กรัม ละลายด้วยน้ำกลั่นจนมีปริมาตร 1 ลิตร ในขวดวัดปริมาตร

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การจัดชุดเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง



รูปที่ 3-1 การจัดชุดเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง [3]

ส่วนประกอบแต่ละส่วน คือ

A : เครื่องไทเทรตอัตโนมัติ รุ่น TR-200 ที่สามารถให้ค่าละเอียดได้ถึง 0.001 มิลลิลิตร ในการทดลองใช้บรรจุสารละลายกรดไนตริก 0.25 โมลาร์

B : เครื่องไทเทรตอัตโนมัติ ซึ่งใช้บรรจุสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ 0.25 โมลาร์

C : เครื่องคอมพิวเตอร์ ที่ใช้ควบคุมเครื่องไทเทรตอัตโนมัติ TR-200 ด้วยโปรแกรม TR-600

E : อิเลคโทรด

N : ก๊าซไนโตรเจน ซึ่งจะไหลผ่านสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์แล้วส่งต่อไปยังสารละลายกรดไนตริก และท้ายสุดก็จะปล่อยให้ไหลผ่านสารละลายที่อยู่ในขวด 3 คอ ซึ่งขณะทำการทดลองจะทำการปล่อยก๊าซไนโตรเจนตลอดเวลา เพื่อให้อยู่ในบรรยากาศของก๊าซเฉื่อย

P : ปั๊มน้ำพร้อมอ่างน้ำควบคุมอุณหภูมิ โดยการทดลองควบคุมไว้ที่ 37 องศาเซลเซียส

S : Magnetic stirrer ใช้คู่กับ Magnetic bar ในการปั่นกวนสารละลายให้เข้าเป็นเนื้อเดียวกัน

T : เทอร์โมมิเตอร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.4.2 วิธีดำเนินงานวิจัย

1. การแคลิเบรทอิเลคโทรดเพื่อหาค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน (E^o) ของอิเลคโทรดที่ใช้

1) ปิเปตสารละลายโปแทสเซียมไนเตรทเข้มข้น 0.5 M จำนวน 25 ml ลงในขวดสามคอขนาด 50 ml

2) ต่อบิวเรตของสารละลายกรดไนตริก สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ ท่อนำก๊าซไนโตรเจน และอิเลคโทรด โดยให้อุปกรณ์ทั้งหมดจุ่มลงในขวดสามคอ แล้วกวนสารละลายด้วยเครื่องกวนแม่เหล็ก

3) เปิดวาล์วให้ก๊าซไนโตรเจนไหลเข้าสู่ระบบทั้งหมด รอให้ระบบสมดุลประมาณ 5 นาที

4) ทำการไทเทรตโดยใช้โปรแกรม TR 600 เลือกคำสั่ง Ecal และใส่ Sample Identification และ Comment ดังต่อไปนี้

SAMPLE IDENTIFICATION : e01a9801

COMMENTS : ves[wat=25.0,aco0=0.25,acv=2.0],
bur[bco1=-0.25],ele[eze1=-400.00]

5) โปรแกรมจะทำการเติมกรดไนตริก 2 ml แล้วไทเทรตด้วยสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ จนปริมาณของโซเดียมไฮดรอกไซด์เป็น 4 ml เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์กราฟของการไทเทรตออกมาทางเครื่องพิมพ์โดยอัตโนมัติ

โดยจากการทดลองนี้ สามารถคำนวณหาค่าความเข้มข้นที่แน่นอนของกรดไนตริก และค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของอิเลคโทรดที่ใช้

2. การโปรโตเนชันของสารละลายตัวอย่าง (PIH, SAG 11 และ SAG 47)

1) ปิเปตสารละลายตัวอย่างจำนวน 25 ml ลงในขวดสามคอขนาด 50 ml

2) ต่อบิวเรตของสารละลายกรดไนตริก สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ ท่อนำก๊าซไนโตรเจน และอิเลคโทรด โดยให้อุปกรณ์ทั้งหมดจุ่มลงในขวดสามคอ แล้วกวนสารละลายด้วยเครื่องกวนแม่เหล็ก

3) เปิดวาล์วให้ก๊าซไนโตรเจนไหลเข้าสู่ระบบทั้งหมด รอให้ระบบสมดุลประมาณ 5 นาที

4) ทำการไทเทรตโดยใช้โปรแกรม TR 600 เลือกคำสั่ง atob และใส่ Sample Identification และ Comment ดังต่อไปนี้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

SAMPLE IDENTIFICATION : d01a9801

COMMENT : ves[wat=25.0,aco0=0.25,acv=2.0,llc1=0.1],

bur[bco1=-0.25],ele[eze1=-400.00]

Protonation of PIH

5) โปรแกรมจะทำการไทเทรต สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์จนถึง pH ประมาณ 11.8 เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์กราฟของการไทเทรตออกมาทางเครื่องพิมพ์

6) เลือกคำสั่ง fill a

7) ทำการทดลองต่อโดยเลือกคำสั่ง atob สลับกับ fill a จนกระทั่งขวดก้นกลมมีปริมาตรของสารละลายประมาณ 30-40 ml

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 4
ผลการวิจัยและดำเนินงาน

ตอนที่ 1 การศึกษาค่าคงที่ทูโทเมอร์ของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำที่มีอัตราส่วนต่างกัน

พีกของการดูดกลืนแสงของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ที่ตัวทำละลายผสมอัตราส่วนต่างๆ แสดงได้ดังรูปที่ 4-1 ถึง 4-3 และภาคผนวก ก จากรูปพบว่า มีพีกเกิดขึ้น 2 ลักษณะ คือ

1. พีกการดูดกลืนแสงของสปีชีส์ที่เป็นกลาง , a_n จะมีความสูงของพีกเพิ่มขึ้น เมื่อปริมาณไดออกเซนเพิ่มขึ้น

2. พีกการดูดกลืนแสงของสปีชีส์ที่เป็นไดโพลาร์ , a_z จะมีความสูงของพีกลดลง เมื่อปริมาณไดออกเซนเพิ่มขึ้น

ทำการอินทิเกรตหาพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสงเพียงครึ่งพีก โดยเลือกช่วงความยาวคลื่นที่แสดงลักษณะของ a_n และ a_z ดังตารางที่ 4-1 และได้ผลดังตารางที่ 4-2 ถึง 4-4 จากนั้นทำการพลอตกราฟระหว่าง a_n (แกน x) กับ a_z (แกน y) โดยใช้โปรแกรม Curve expert 1.3 เพื่อหาความชัน ($-a^0_z / a^0_n$) แสดงดังรูปที่ 4-4 ถึง 4-6 จากรูปพบว่า เมื่อปริมาณไดออกเซนในตัวทำละลายผสมน้อยหรือมากไปจะเกิดการเบี่ยงเบนไปจากกราฟเส้นตรง จึงทำการแก้ไขโดยการตัดค่าที่ผิดพลาดออกเพื่อให้เป็นไปตามสมการเส้นตรง แสดงดังรูปที่ 4-7 ถึง 4-9 ความชันจากกราฟแสดงได้ดังตารางที่ 4-5 แล้วนำไปคำนวณหาค่า K_Z ได้จากสมการ 2-10 แสดงดังตารางที่ 4-6 ซึ่งพบว่า เมื่อปริมาณไดออกเซนในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำเพิ่มขึ้น ค่า K_Z ของ PIH SAG 47 และ SAG 11 มีแนวโน้มลดลง

ตอนที่ 2 การศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11

1. การแคลิเบรทอิเลคโทรด

ข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตประกอบด้วย ปริมาตรไทแทรนต์ที่เติมลงไป ค่า pH และค่าศักย์ไฟฟ้าของสารละลายในแต่ละจุดของการไทเทรต แสดงได้ในภาคผนวก ข นำข้อมูลที่ได้มาแปลงโดยใช้โปรแกรม DCO จะได้ข้อมูลสำหรับอินพุทของโปรแกรมการคำนวณ ELE ผลการคำนวณที่ได้ มีดังนี้

1. ความเข้มข้นของสารละลายกรดไนตริก = 0.2500 โมลาร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2. ความเข้มข้นของสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ = 0.24361 โมลาร์

3. ค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน = 454.24058 มิลลิโวลต์

2. <u>การศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ</u>

ในการศึกษาปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นโดยการไทเทรตสารละลาย PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างๆ แสดงในภาคผนวก ข

สารละลายของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ มีการปลดปล่อยโปรตอน (Deprotonation) 1 ตัว ได้เป็นสปีชีส์ $[LH_3]^+$ และสามารถรับโปรตอน (Protonation) ได้ 1 ตัว กลายเป็นสปีชีส์ $[LH]^-$ ซึ่งสามารถแสดงได้ดังสมการ (4-1) และ (4-2) ตามลำดับ

$$[LH_2] + H^+ \longrightarrow [LH_3]^+ \qquad (4\text{-}1)$$

$$[LH_2] \longrightarrow [LH]^- + H^+ \qquad (4\text{-}2)$$

ค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11 จากผลการคำนวณโดยใช้โปรแกรม SUPERQUAD แสดงในตารางที่ 4-7 ถึง 4-9 และสามารถพลอตกราฟได้ดังรูป 4-10 ถึง 4-12

อัตราส่วนของตัวทำละลายผสมทำให้สปีชีส์ต่างๆ ที่เกิดขึ้น มีปริมาณแตกต่างกันในแต่ละ pH เช่น อัตราส่วนระหว่างไดออกเซน : น้ำ เป็น 50 : 50 ของ PIH พบว่า สปีชีส์ $[LH_3]^+$ ที่ pH < 5 มีปริมาณมากที่สุดคือ 99 % และจะลดลงจนมีปริมาณ 50 % ที่ pH ≈ 5.5 และลดลงจนหมดที่ pH 6 สปีชีส์ $[LH]^-$ จะเริ่มเกิดขึ้น ที่ pH 5.5 และมีปริมาณ ≈ 50 % แล้วเพิ่มขึ้นจนที่ pH ตั้งแต่ 6 จะเพิ่มขึ้นเป็นปริมาณสูงสุดคือ 99 % และสปีชีส์ $[LH_2]$ ไม่เกิดที่ pH ใดๆ โดยแสดงการกระจายตัวของสปีชีส์ดังรูปที่ 4-13 ซึ่ง SAG 47 และ SAG 11 ที่อัตราส่วนใกล้เคียงกันนี้ จะมีสปีชีส์เกิดที่ pH ใกล้เคียงกัน โดยแสดงเส้นโค้งการกระจายตัวของสปีชีส์ต่างๆของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ที่อัตราส่วนต่างๆ ได้ดังรูปที่ 4-14 ถึง 4-21

จากรูป 4-10 , 4-11 และ 4-12 ซึ่งแสดงค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่า เมื่อตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำมีปริมาณไดออกเซนเพิ่มมากขึ้นจะมีค่าคงที่โปรโตเนชันเพิ่มขึ้น แต่ค่าคงที่ดีโปรโตเนชันมีแนวโน้มลดลง สามารถสรุปได้ดังรูปที่ 4-22 แสดงว่าสปีชีส์ $[LH]^-$ มีมากเมื่อมีปริมาณน้ำมาก ส่วนสปีชีส์ $[LH_3]^+$ มีมากเมื่อมีปริมาณไดออกเซนมาก นั่นคือสปีชีส์ [LH] มีความแรงไอออน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

(Ionic strength) มากกว่าสปีชีส์ $[LH_3]^+$ ซึ่งสอดคล้องกับความเป็นจริงที่ว่าพลังงานพันธะของ O-H มากกว่า N-H ดังนั้นสปีชีส์ $[LH]^-$ จะอยู่ในน้ำได้ดีกว่าสปีชีส์ $[LH_3]^+$ ตามหลักของการละลาย (Like dissolve like)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4-1 แสดงช่วงความยาวคลื่นที่เลือกในการอินทิเกรตหาพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสงของ PIH SAG 47 และ SAG 11

สาร	ช่วงความยาวคลื่น	
	a_z	a_n
PIH	448-391	386-345
SAG 47	445-400	365-310
SAG 11	450-405	385-330

ตารางที่ 4-2 แสดงพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง a_z , a_n ของ PIH

อัตราส่วนระหว่างไดออกเซนกับน้ำ	a_z (448-391 nm)	a_n (386-345 nm)
10 : 90	8.283	19.361
20 : 80	8.274	21.347
30 : 70	7.909	23.659
40 : 60	7.031	25.356
50 : 50	4.912	26.938
60 : 40	3.049	27.609
70 : 30	1.837	28.679
80 : 20	1.244	30.024
90 : 10	0.222	35.704

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4-3 แสดงพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง a_z , a_n ของ SAG 47

อัตราส่วนระหว่าง ไดออกเซนกับน้ำ	a_z (445-400 nm)	a_n (365-310 nm)
10 : 90	12.242	63.235
20 : 80	7.252	55.439
30 : 70	6.355	51.253
40 : 60	5.528	64.220
50 : 50	3.894	65.594
60 : 40	2.996	73.036
70 : 30	2.455	79.890
80 : 20	1.520	81.913
90 : 10	1.098	89.875

ตารางที่ 4-4 แสดงพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสง a_z , a_n ของ SAG 11

อัตราส่วนระหว่าง ไดออกเซนกับน้ำ	a_z (450-405 nm)	a_n (385-330 nm)
10 : 90	8.586	70.640
20 : 80	6.680	67.919
30 : 70	5.668	68.657
40 : 60	4.062	71.436
50 : 50	3.274	73.661
60 : 40	2.739	74.309
70 : 30	2.341	72.821
80 : 20	2.104	72.243
90 : 10	1.135	75.130

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4-5 ตารางแสดงค่าความชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11

สาร	ความชัน
PIH	1.268
SAG 47	0.147
SAG 11	0.567

ตารางที่ 4-6 แสดงค่า K_z ของ PIH SAG 47 และ SAG 11

อัตราส่วนระหว่างไดออกเซนกับน้ำ	K_z		
	PIH	SAG 47	SAG 11
10 : 90	-	-	-
20 : 80	-	-	0.173
30 : 70	0.2635	0.844	0.146
40 : 60	0.2185	0.585	0.101
50 : 50	0.1436	0.401	0.078
60 : 40	0.0868	0.279	0.065
70 : 30	0.0505	0.211	-
80 : 20	-	0.129	-
90 : 10	-	0.082	-

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4-7 แสดงค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆ พร้อมทั้ง pH ที่พบของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างกัน

สปีชีส์	อัตราส่วนตัวทำละลาย		pH ที่พบที่			log K
	ไดออกเซน	น้ำ	ปริมาณสูงสุด	ปริมาณที่ 50 %	ปริมาณน้อยสุด	
$[LH_3]^+$	50	50	<5	5.5	>6.0	3.49
	60	40	<2	4.0	>5.0	5.02
	80	20	1	3.0	>3.5	8.08
$[LH]^-$	50	50	>6	5.5	<5.5	-6.48
	60	40	>8	4.5	<4.0	-5.72
	80	20	>8	4.0	<3.5	-2.94

หมายเหตุ : ค่า log K มีเครื่องหมายเป็นบวก หมายถึง Protonation constants

ค่า log K มีเครื่องหมายเป็นลบ หมายถึง Deprotonation constants

ตารางที่ 4-8 แสดงค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆ พร้อมทั้ง pH ที่พบของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างกัน

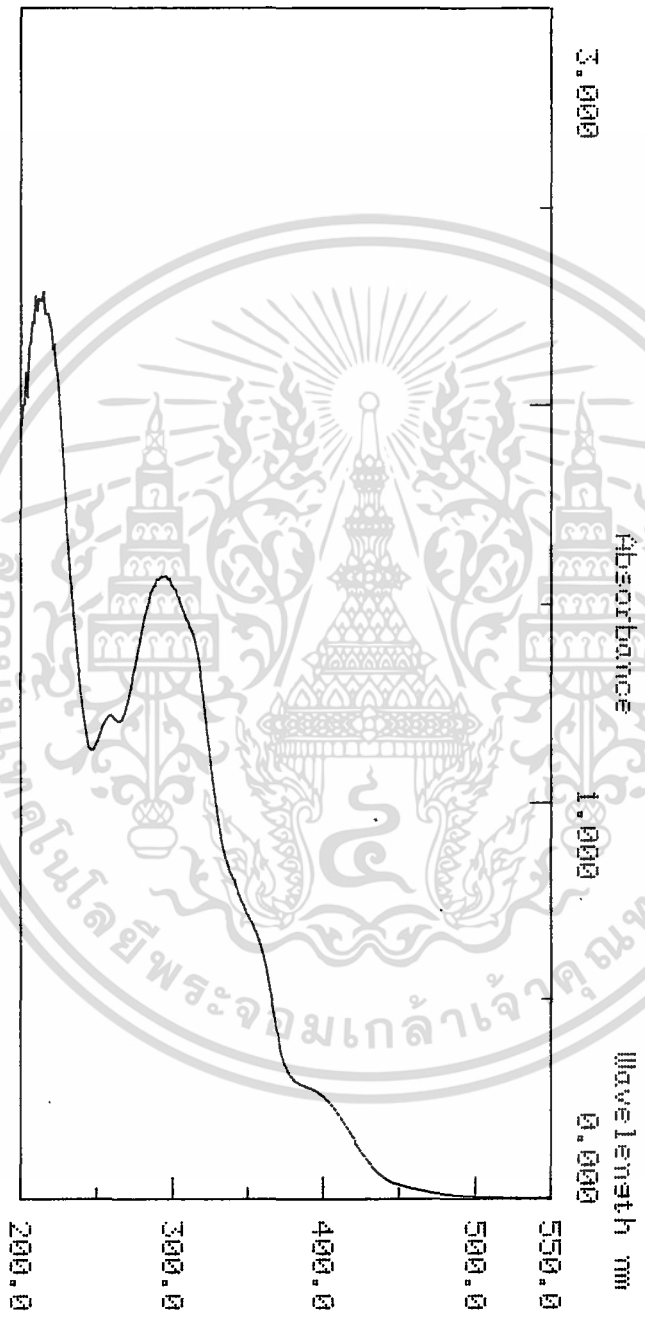
สปีชีส์	อัตราส่วนตัวทำละลาย		pH ที่พบที่			log K
	ไดออกเซน	น้ำ	ปริมาณสูงสุด	ปริมาณที่ 50 %	ปริมาณน้อยสุด	
$[LH_3]^+$	15	85	<3.5	7	>8.5	3.65
	20	80	<2.5	4	>8.0	5.90
	30	70	1.0	2	>5.0	6.85
$[LH]^-$	15	85	>11	9	<8.5	-9.77
	20	80	>11	9	<8.0	-9.76
	30	70	>11	10	<5.0	-9.59

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4-9 แสดงค่าคงที่โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของสปีชีส์ต่างๆพร้อมทั้ง pH ที่พบของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วนต่างกัน

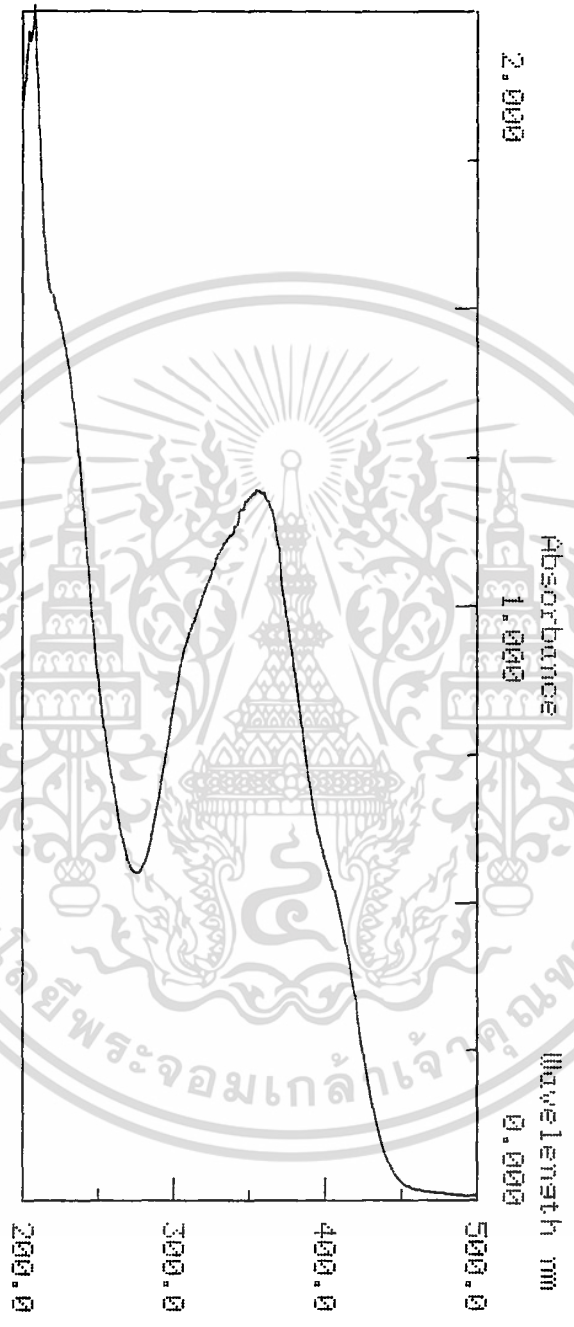
สปีชีส์	อัตราส่วนตัวทำละลาย		pH ที่พบที่			log K
	ไดออกเซน	น้ำ	ปริมาณสูงสุด	ปริมาณที่ 50 %	ปริมาณน้อยสุด	
$[LH_3]^+$	40	60	<5.0	5.0	>8.0	5.16
	50	50	<2.5	5.5	>8.5	5.38
	60	40	<2.0	3.0	>6.0	6.84
$[LH]^-$	40	60	>10.5	8.0	<5.0	-10.19
	50	50	>11.0	9.0	<8.5	-9.08
	60	40	>11.0	10.0	<6.0	-8.08

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



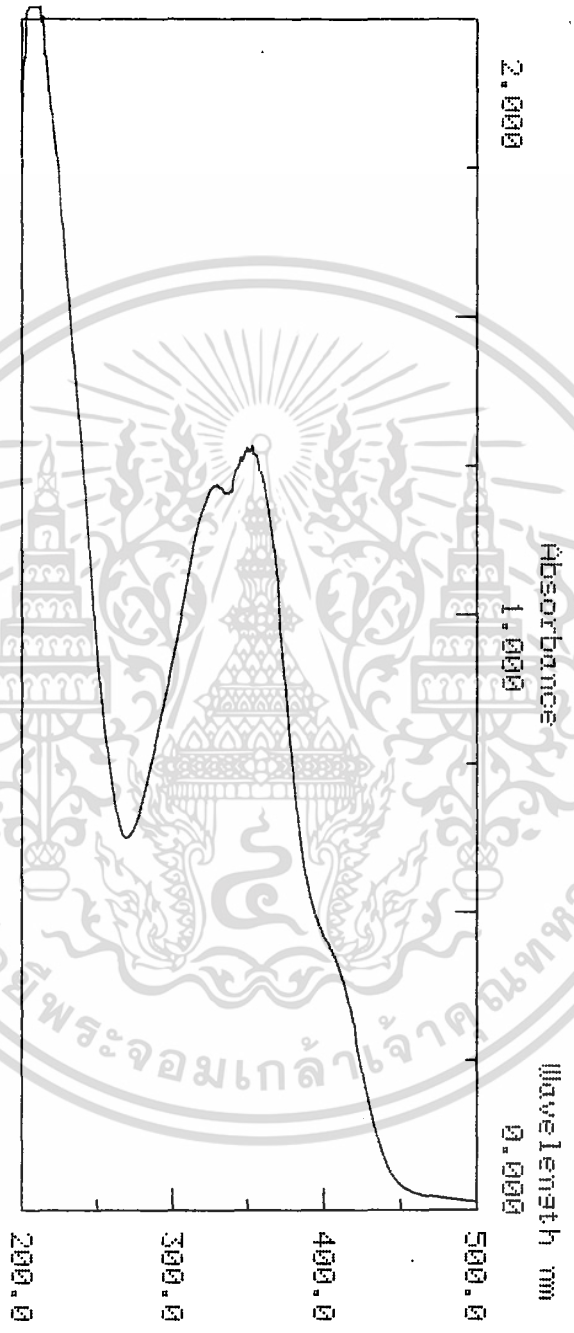
รูปที่ 4-1 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 10 : 90

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



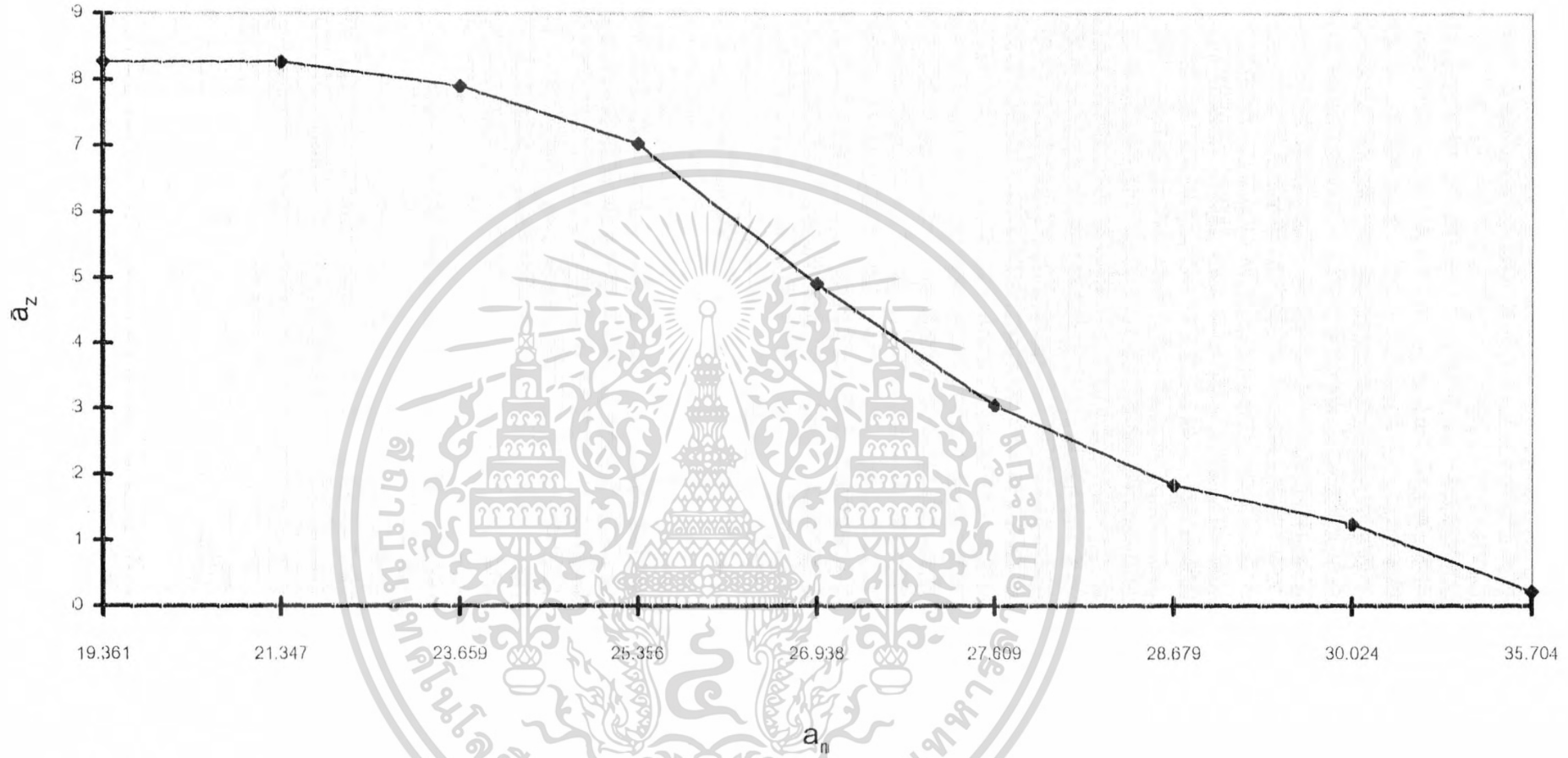
รูปที่ 4-2 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 10 : 90

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

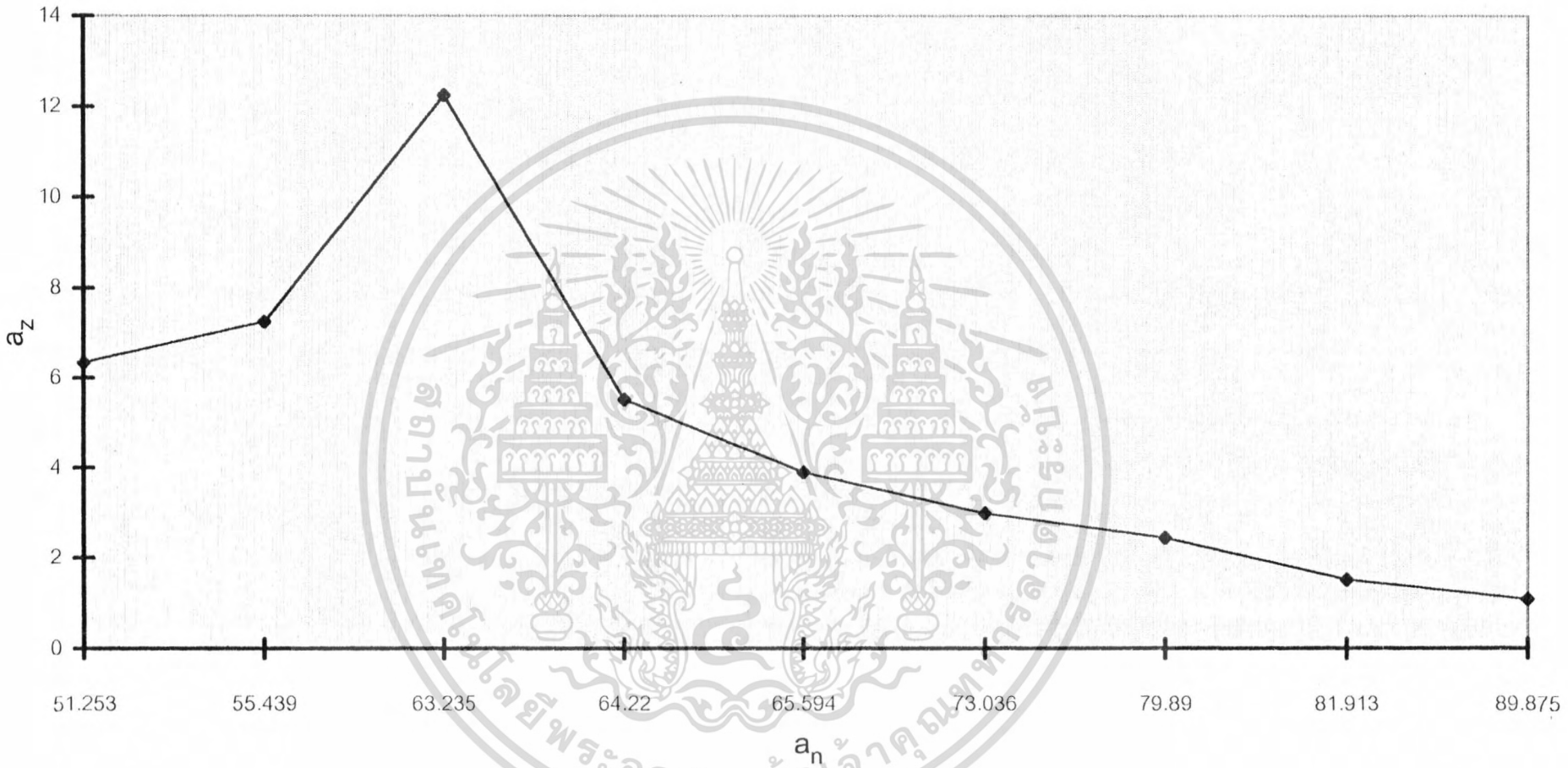


รูปที่ 4-3 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 10 : 90

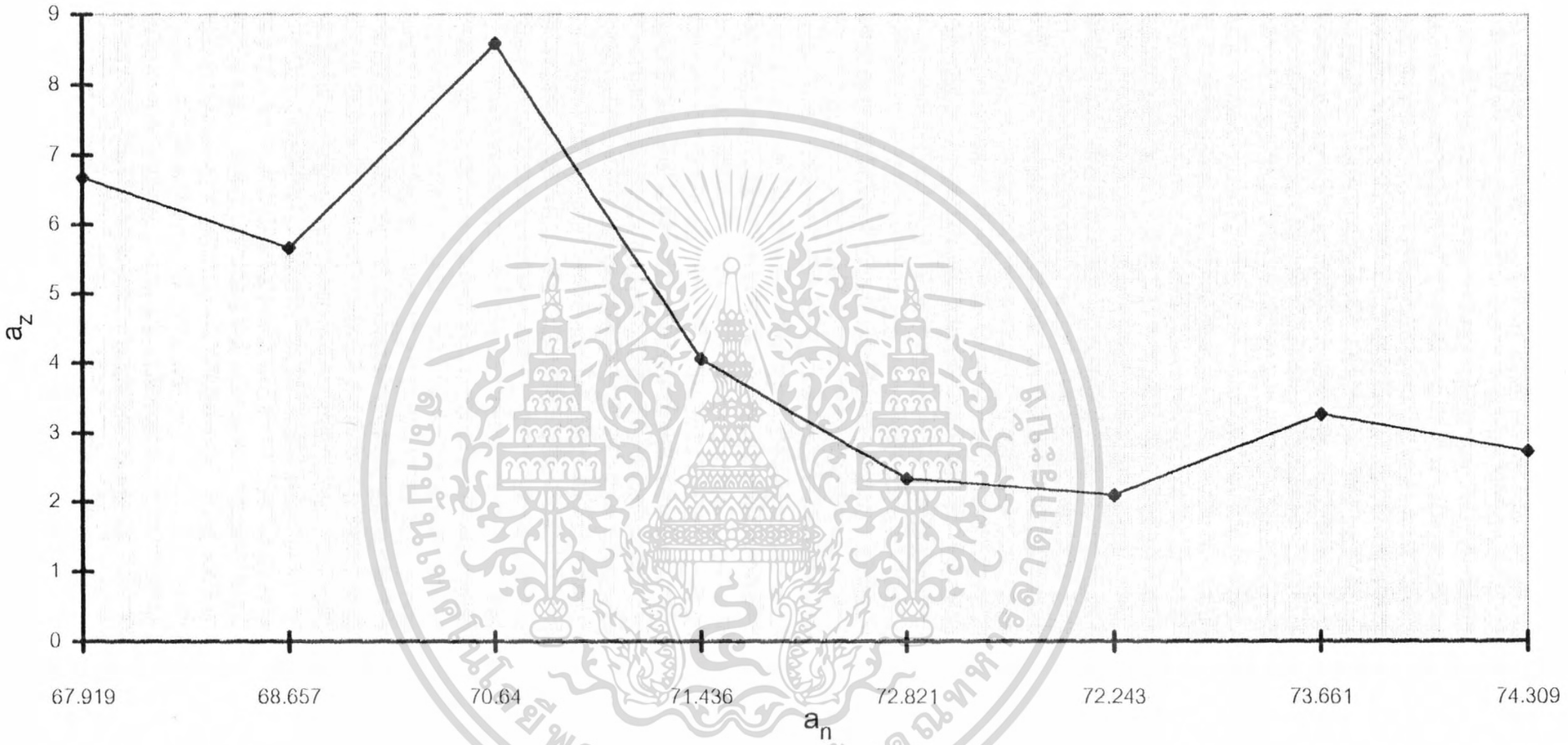
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



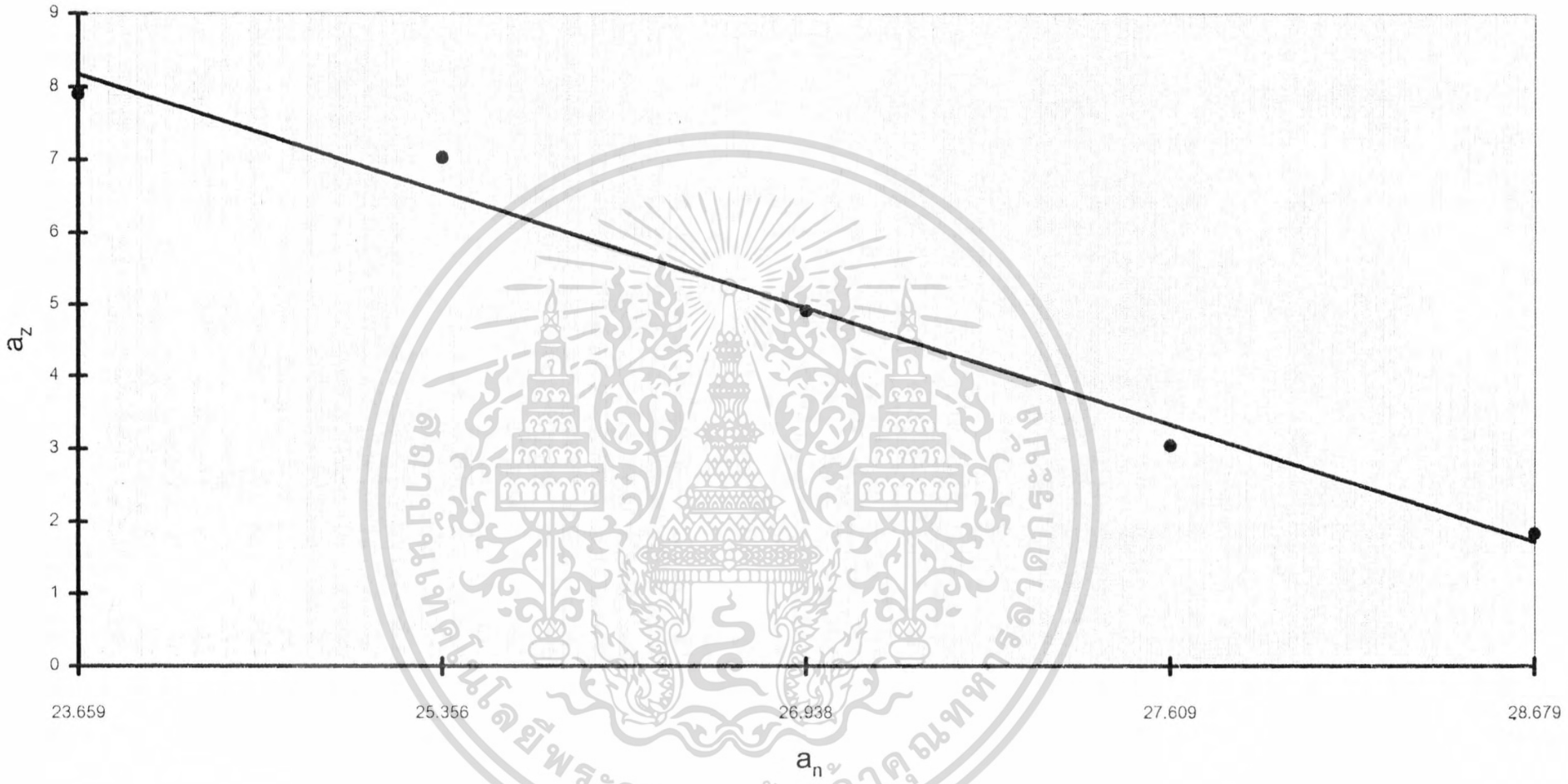
รูปที่ 4-4 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ PIH



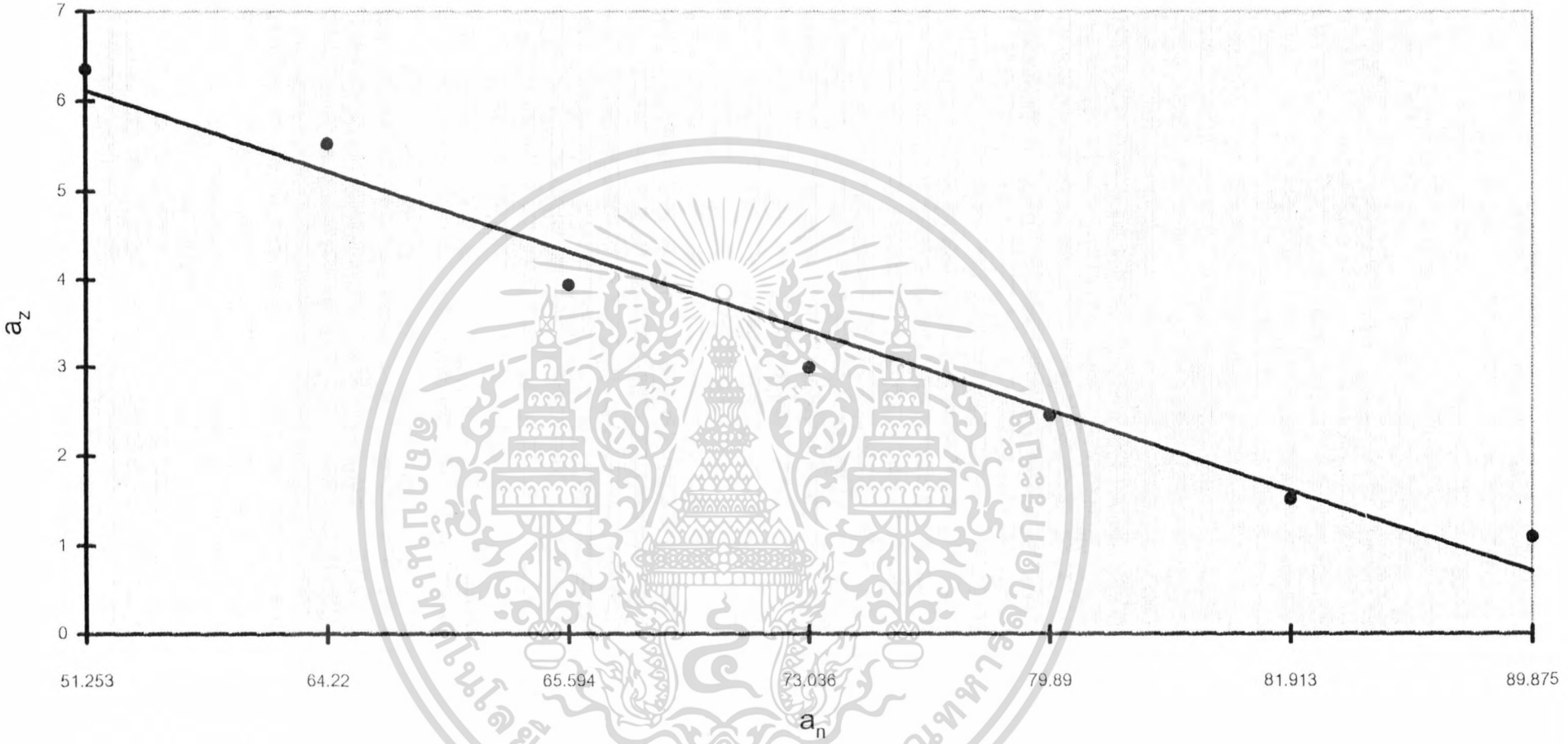
รูปที่ 4-5 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 47



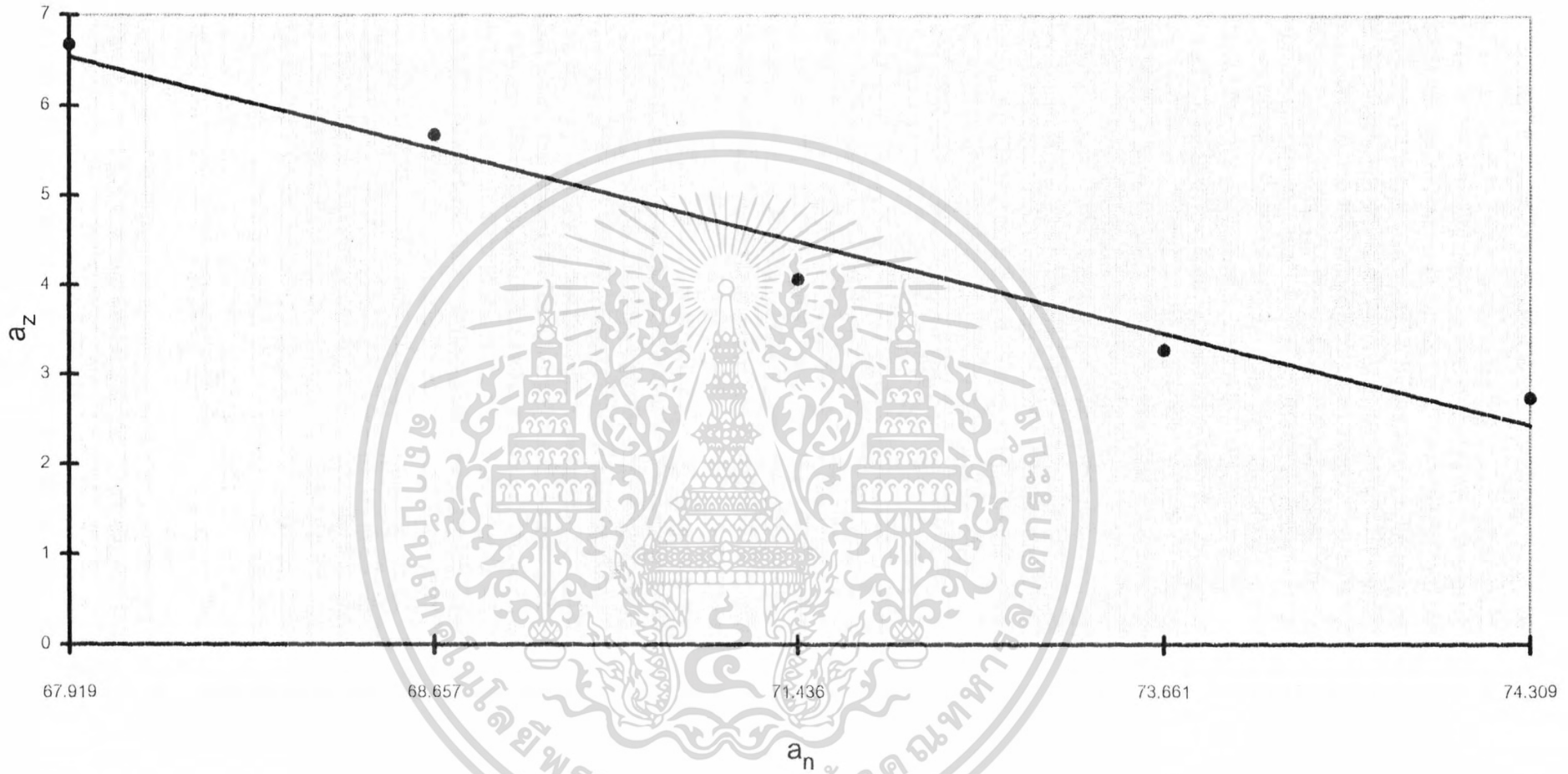
รูปที่ 4-6 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 11



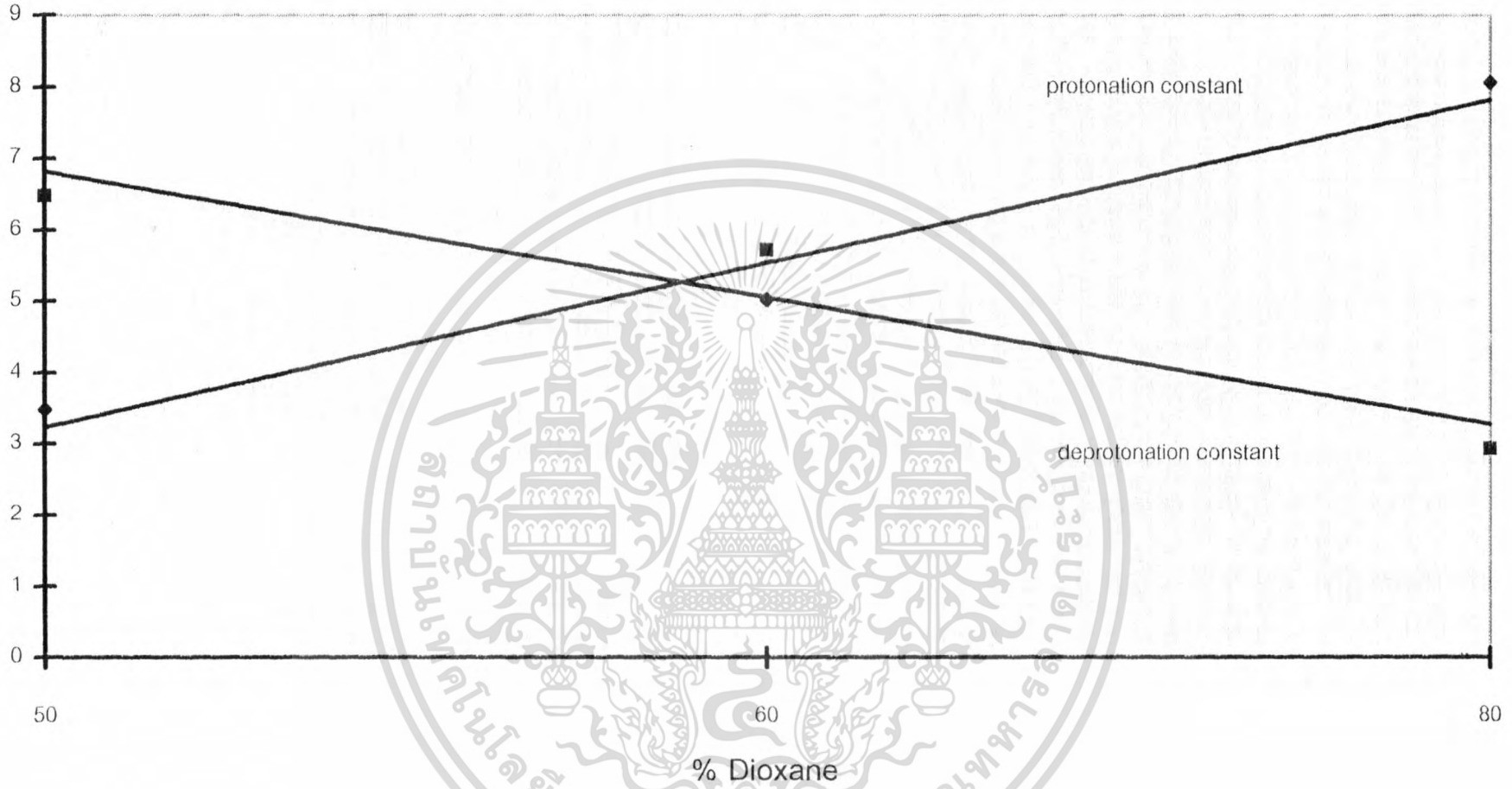
รูปที่ 4-7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ PIH เมื่อทำการแก้ไขโดยการตัดค่าที่ผิดพลาดออก



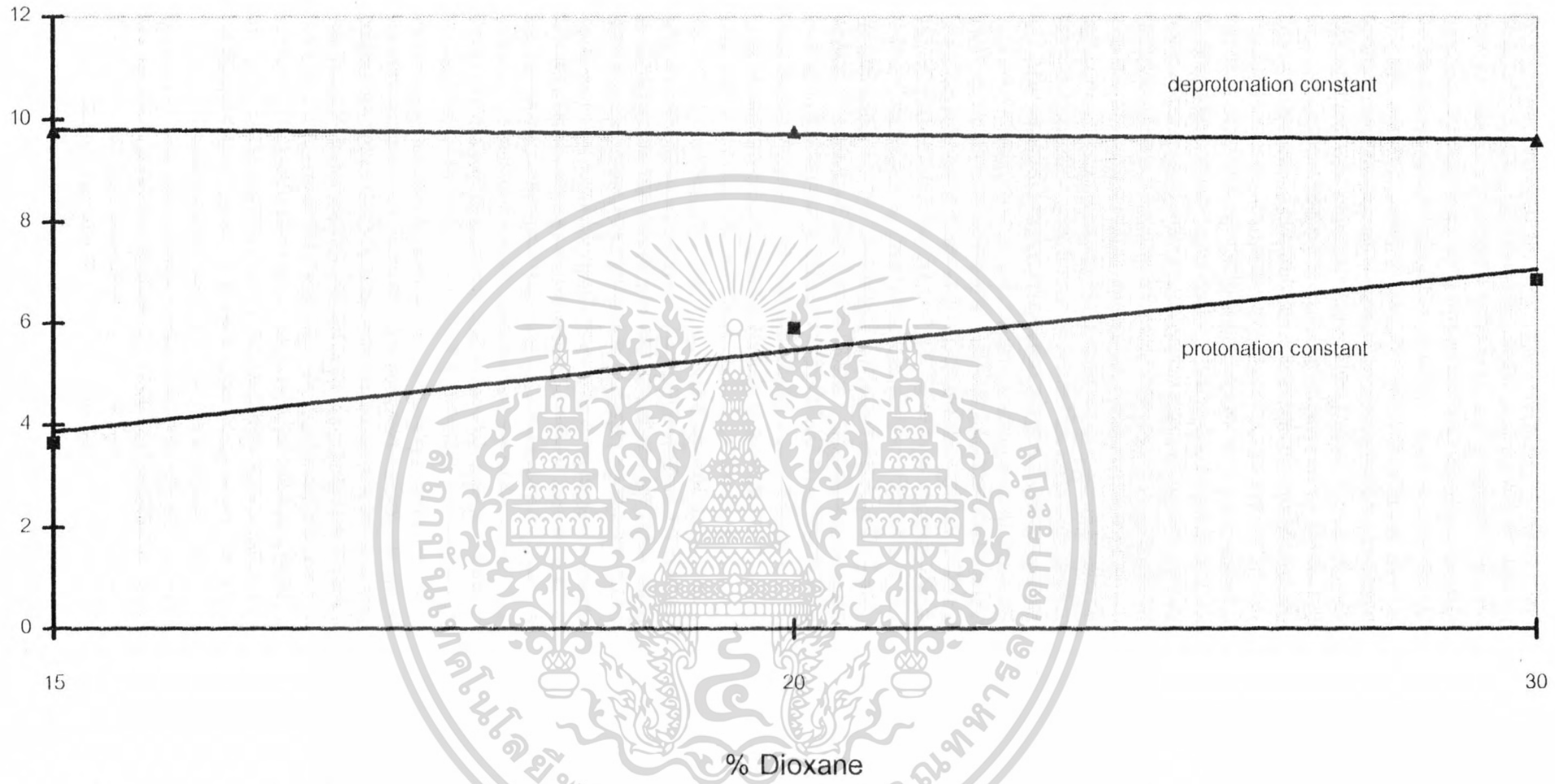
รูปที่ 4-8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 47 เมื่อทำการแก้ไขโดยการตัดค่าที่ผิดพลาดออก



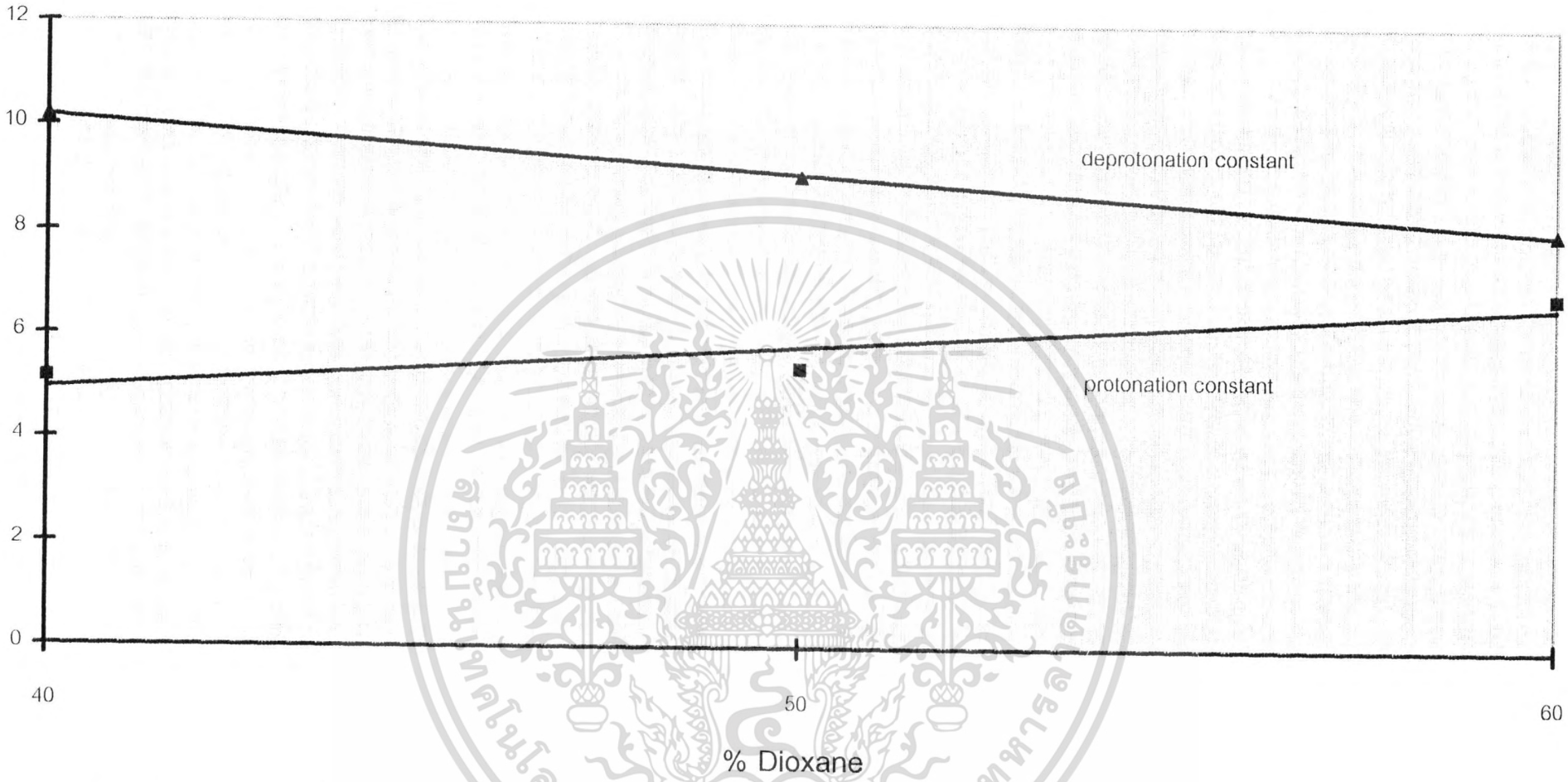
รูปที่ 4-9 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง a_z และ a_n ของ SAG 11 เมื่อทำการแก้ไขโดยการตัดค่าที่ผิดพลาดออก



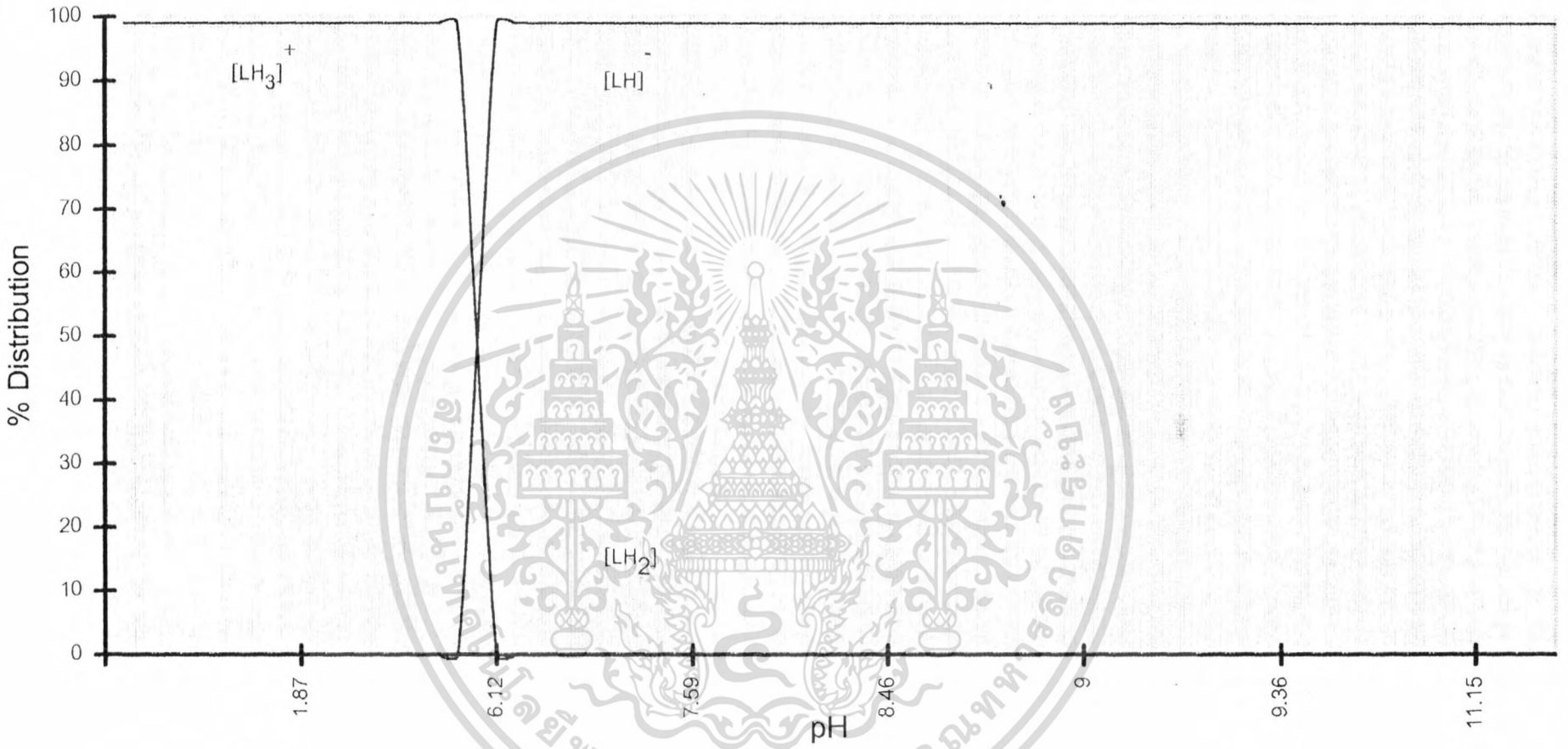
รูปที่ 4-10 แสดงค่าคงที่ Protonation และ Deprotonation ของสปีชีส์ต่างๆ ของ PIH ที่อัตราส่วนต่างๆ ของตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ



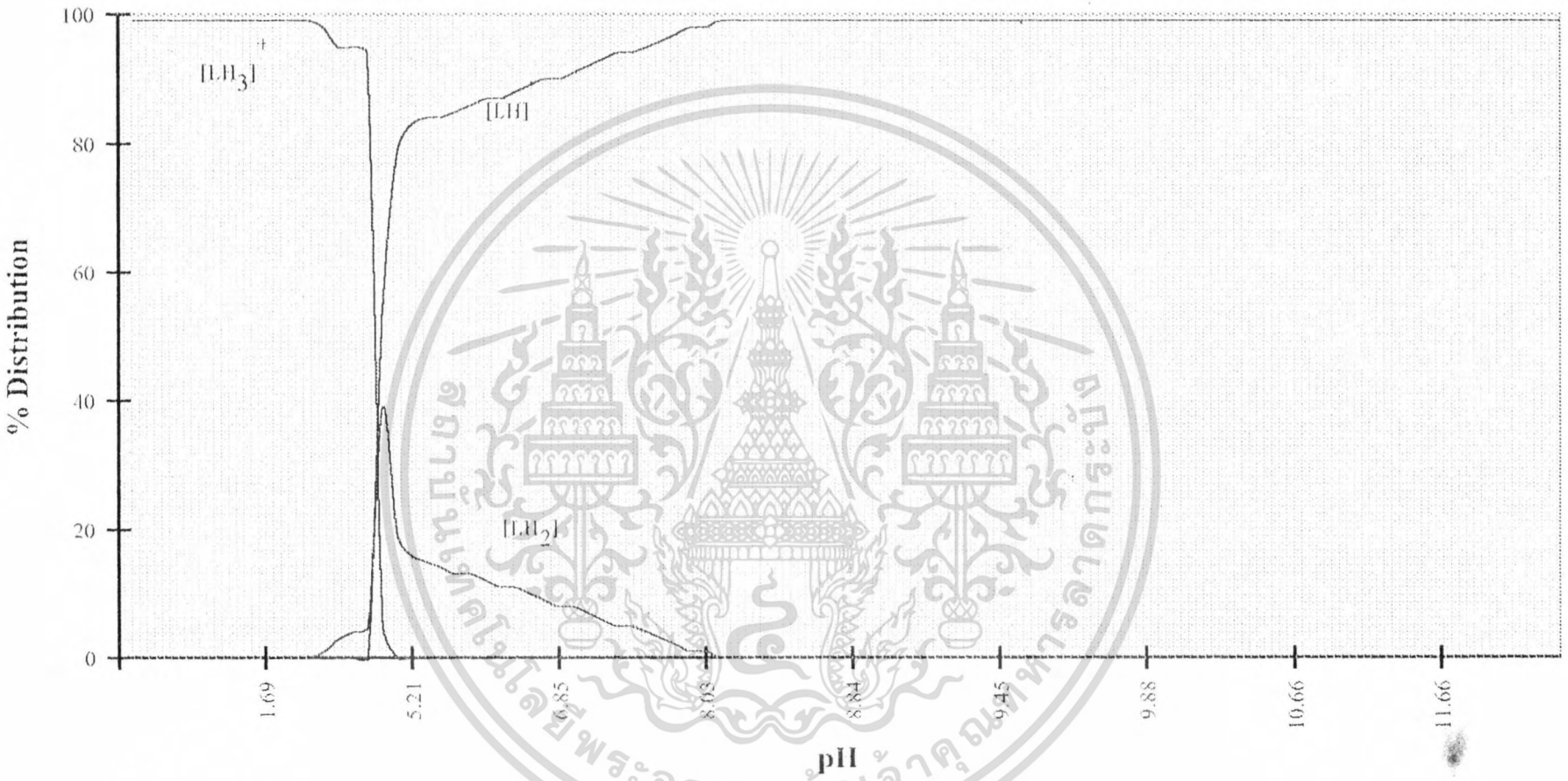
รูปที่ 4-11 แสดงค่าคงที่ Protonation และ Deprotonation ของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 47 ที่อัตราส่วนต่างๆ ของตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ



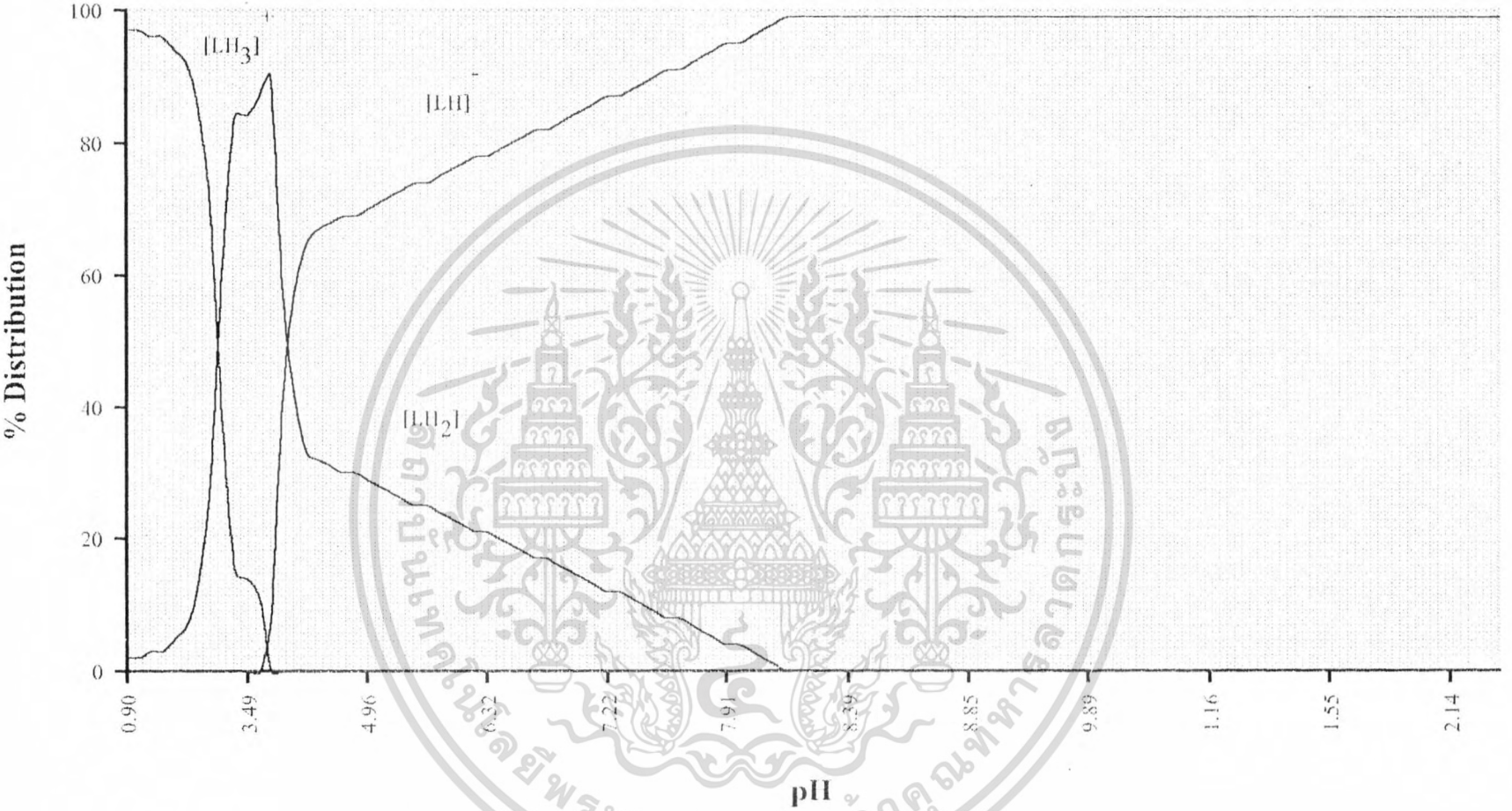
รูปที่ 4-12 แสดงค่าคงที่ Protonation และ Deprotonation ของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 11 ที่อัตราส่วนต่างๆ ของตัวทำละลายผสมไดออกเซนกับน้ำ



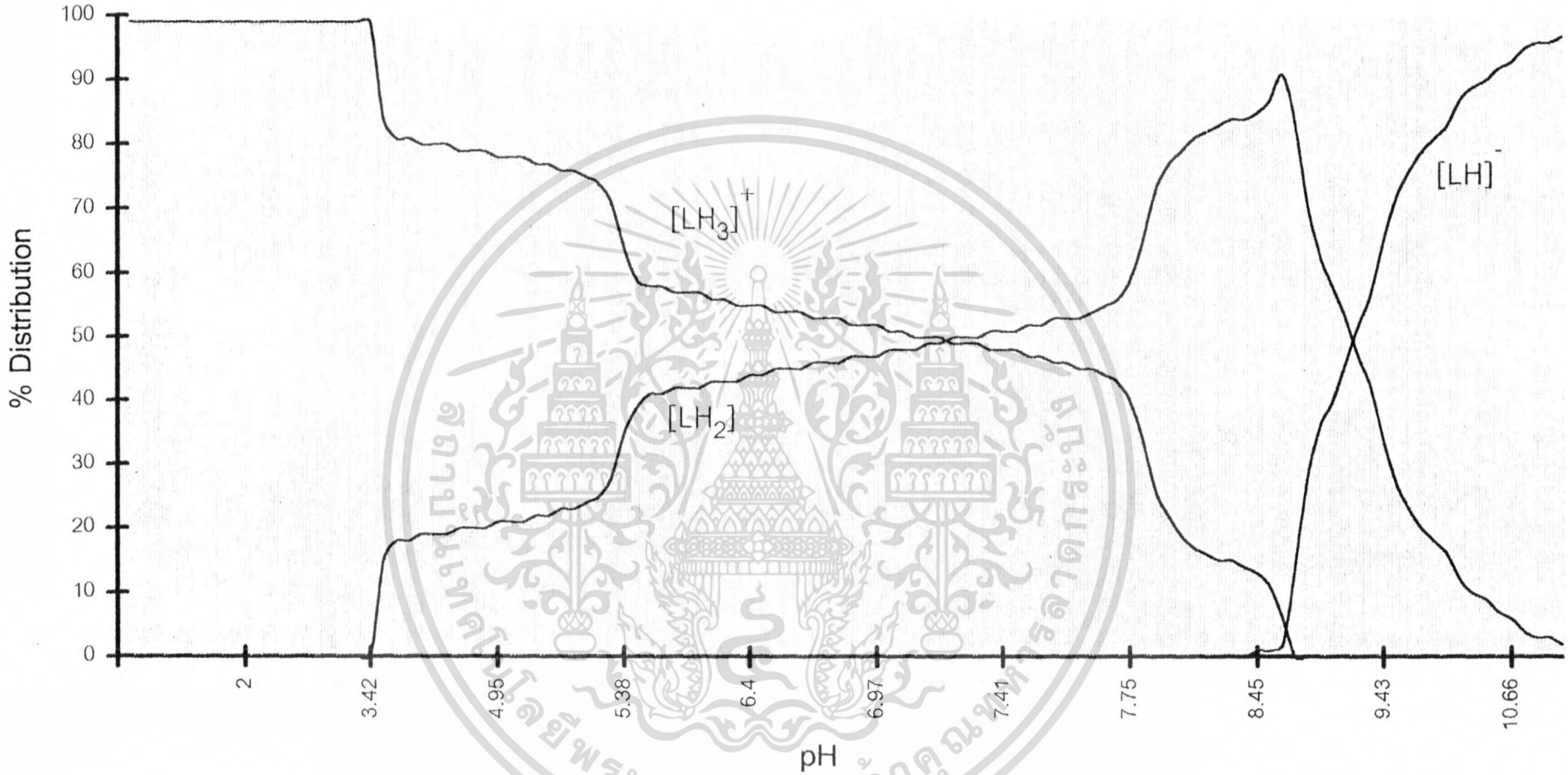
รูปที่ 4-13 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆของ PIH ที่อัตราส่วน 50:50



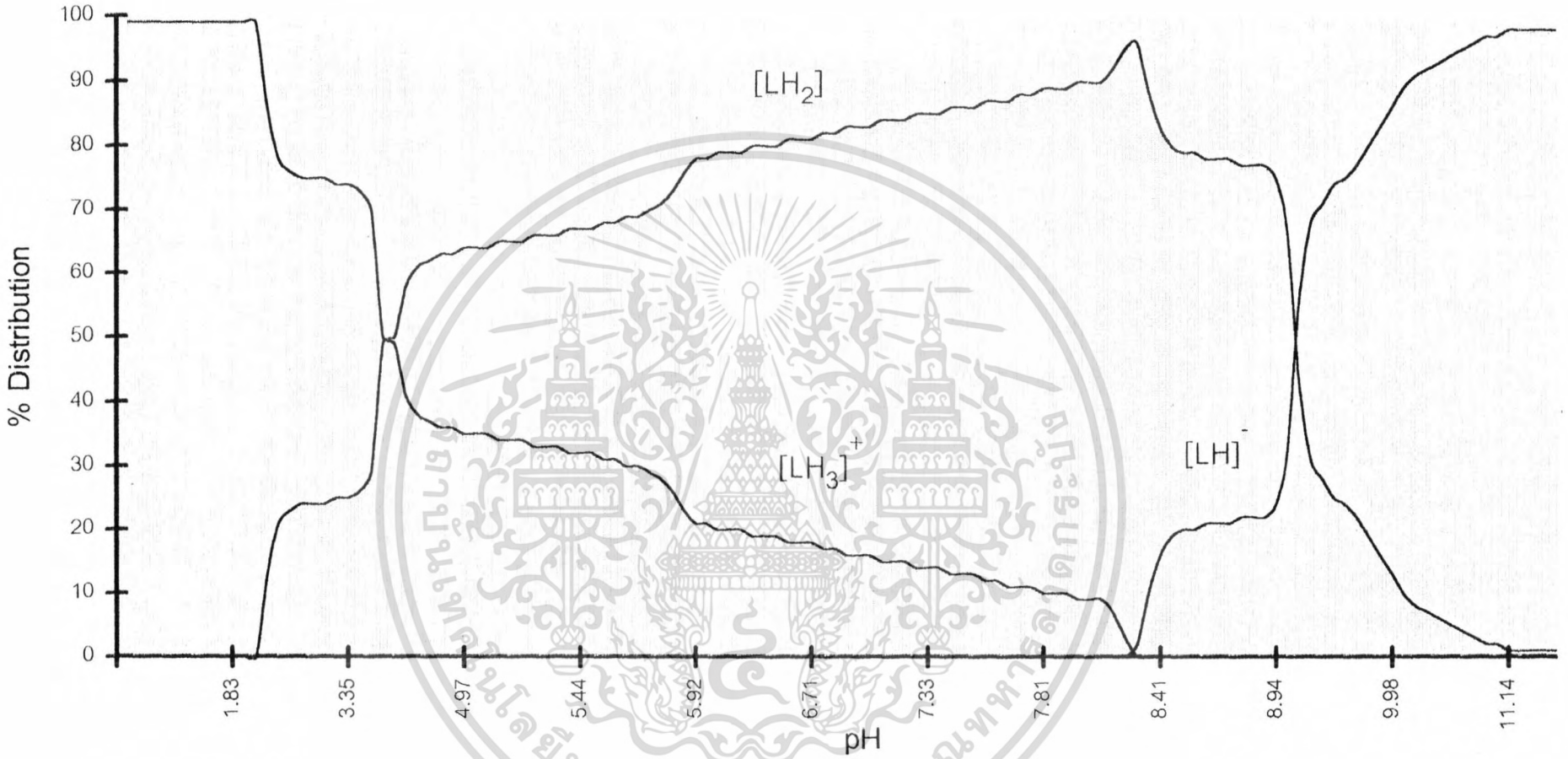
รูปที่ 4-14 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ PHI ที่อัตราส่วน 60:40



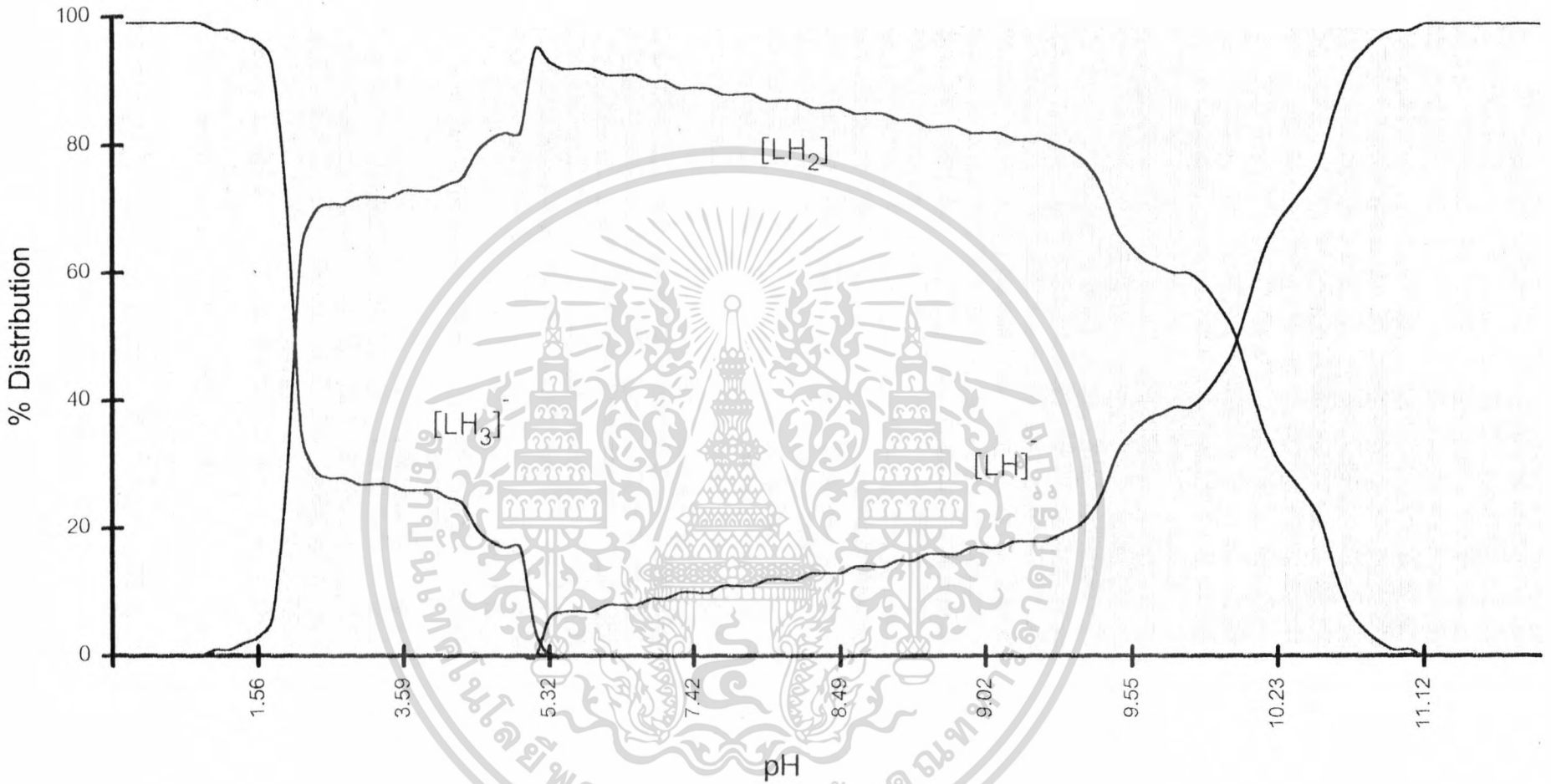
รูปที่ 4-15 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆของ PIH ที่อัตราส่วน 80:20



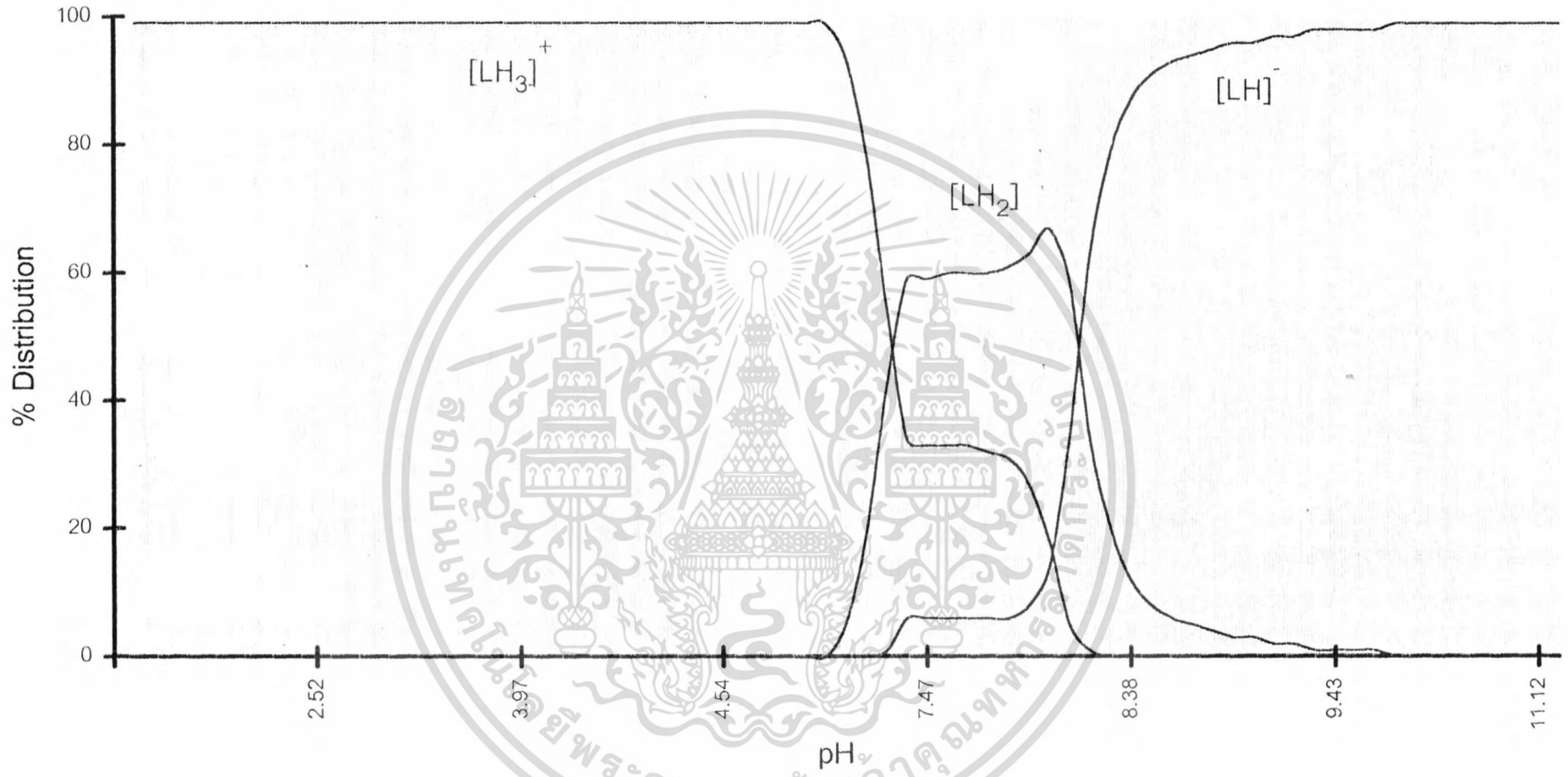
รูปที่ 4-16 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 47 ที่อัตราส่วน 15:85



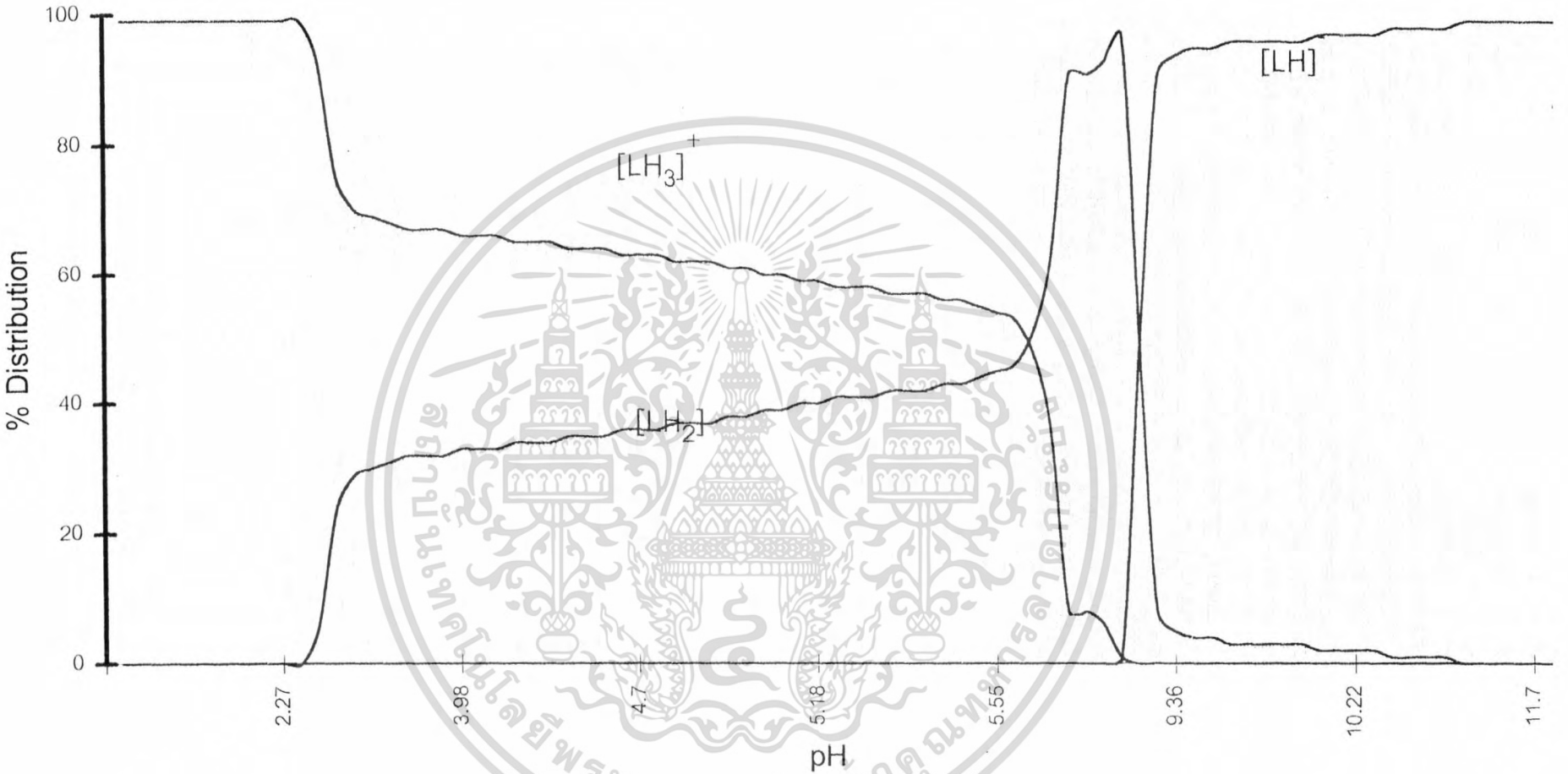
รูปที่ 4-17 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 47 ที่อัตราส่วน 20:80



รูปที่ 4-18 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 47 ที่อัตราส่วน 30:70

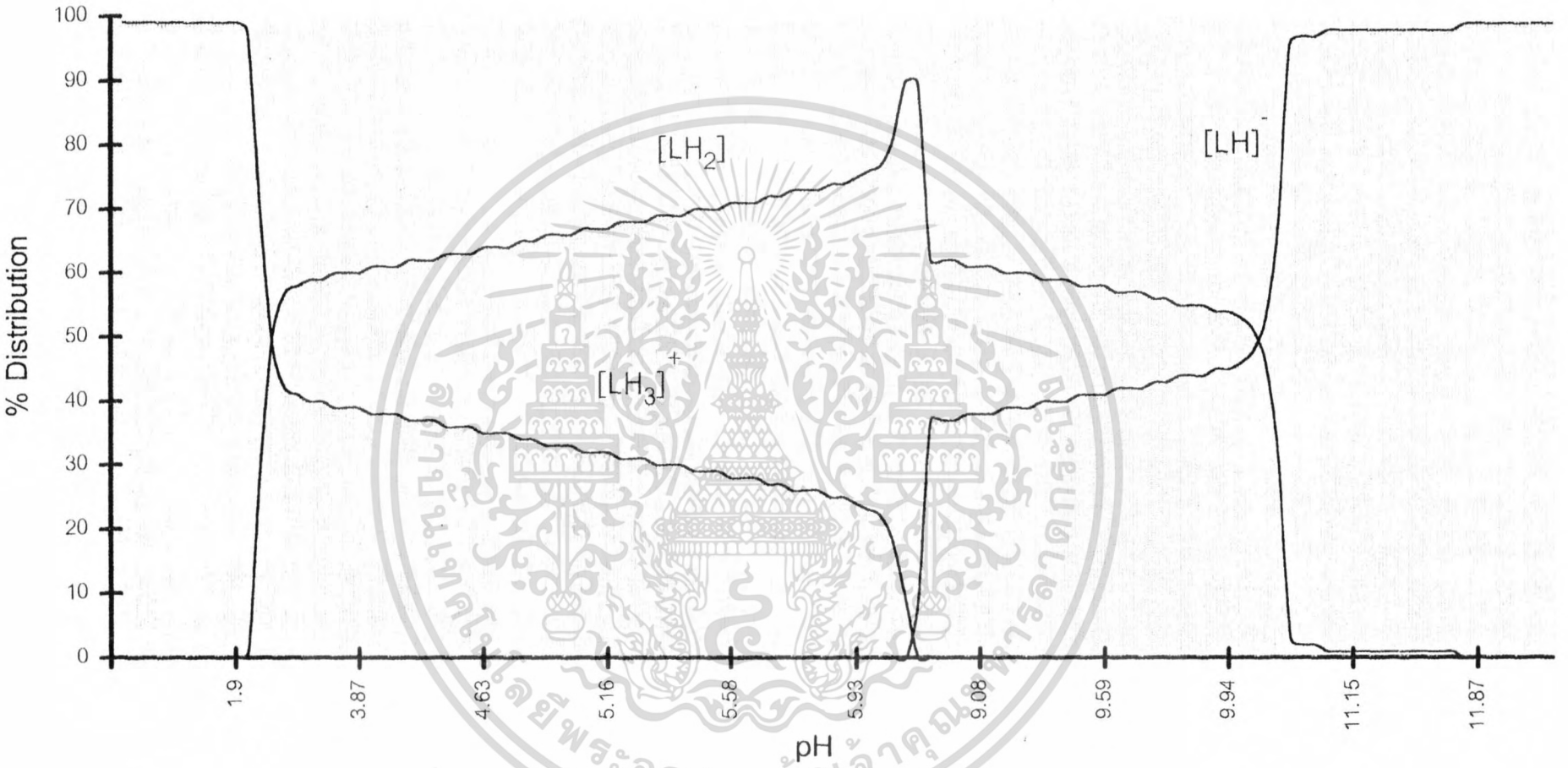


รูปที่ 4-19 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 11 ที่อัตราส่วน 40:60

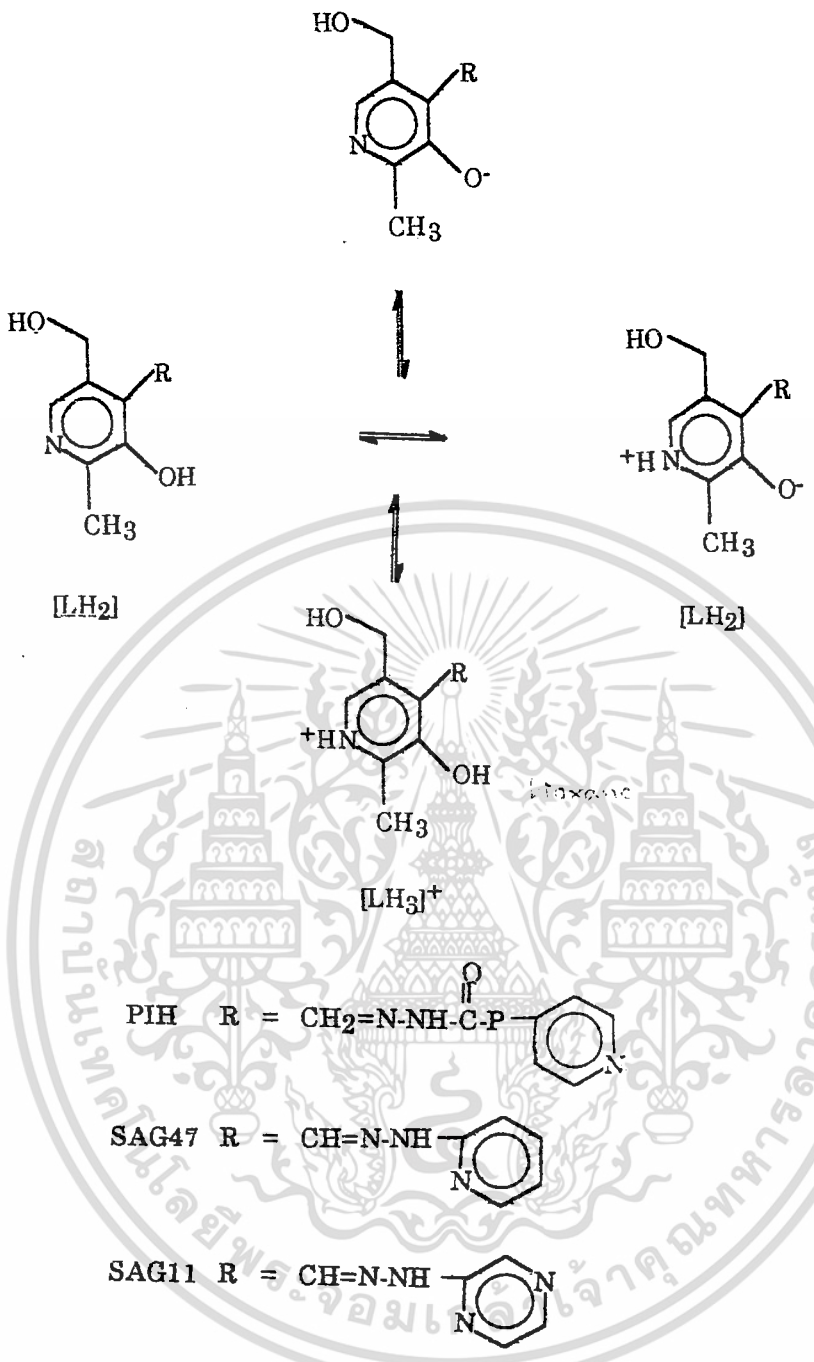


รูปที่ 4-20 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 11 ที่อัตรา

ส่วน 50 : 50



รูปที่ 4-21 แสดงเส้นโค้งการกระจายของสปีชีส์ต่างๆ ของ SAG 11 ที่อัตราส่วน 60:40



รูปที่ 4-22 แสดงสปีชีส์ต่างๆ ที่อยู่ในสภาวะสมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ โปรโตเนชันและดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 5
สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

จากการศึกษาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ (K_T) ของสารประกอบไพริดอกซัลคือ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำที่อัตราส่วน 10 : 90 20 : 80 30 : 70 40 : 60 50 : 50 60 : 40 70 : 30 80 : 20 และ 90 : 10 โดยใช้เครื่องวัดการดูดกลืนแสงแบบอัลตราไวโอเลต / วิสสิเบิล ทำการหาพื้นที่ใต้พีกของการดูดกลืนแสงของสปีชีส์ที่เป็นกลางกับสปีชีส์ที่มีขั้ว เพื่อนำไปคำนวณหาค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์ ซึ่งพบว่า เมื่อปริมาณไดออกเซนในตัวทำละลายผสมระหว่างไดออกเซนกับน้ำเพิ่มขึ้น ค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์มีแนวโน้มลดลง

จากการศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11 โดยใช้เทคนิคโพเทนชิโอเมตริกไทเทรชันในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วนต่างๆ พบว่า เมื่อปริมาณไดออกเซนในตัวทำละลายผสมเพิ่มขึ้น ค่าคงที่โปรโตเนชันของ PIH SAG 47 และ SAG 11 มีแนวโน้มเพิ่มขึ้น ซึ่งมีแนวโน้มตรงข้ามกับค่าคงที่ดีโปรโตเนชัน คือ มีแนวโน้มลดลงเมื่อไดออกเซนในตัวทำละลายผสมน้ำกับไดออกเซนเพิ่มขึ้น

ข้อเสนอแนะ

ไม่ควรเก็บสารละลายที่เตรียมไว้สำหรับวัดการดูดกลืนแสงนานเกินไป เนื่องจากตัวทำละลายที่ใช้ระเหยได้ง่าย หรือสารตัวอย่างอาจเกิดการสลายตัวได้ ทำให้ผลจากการวัดดูดกลืนแสงผิดพลาดได้

แนวทางในการทำวิจัยต่อไป

1. ใช้ตัวทำละลายอินทรีย์ชนิดอื่นแทนไดออกเซนในการทำเป็นตัวทำละลายผสม เพื่อศึกษาผลของตัวทำละลายที่มีต่อค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์
2. ใช้อนุพันธ์ไพริดอกซัลชนิดอื่นๆ เพื่อศึกษาผลของตัวทำละลายที่มีต่อค่าคงที่สมดุลของการเกิดทูโทเมอร์

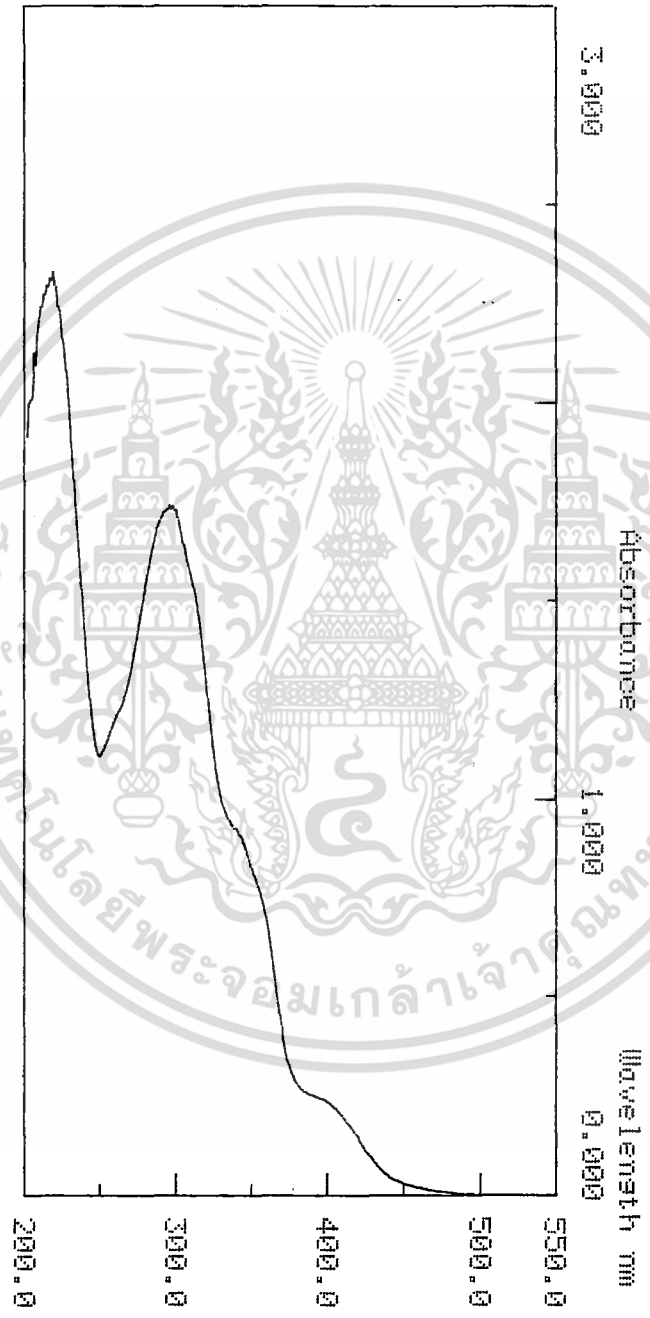
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

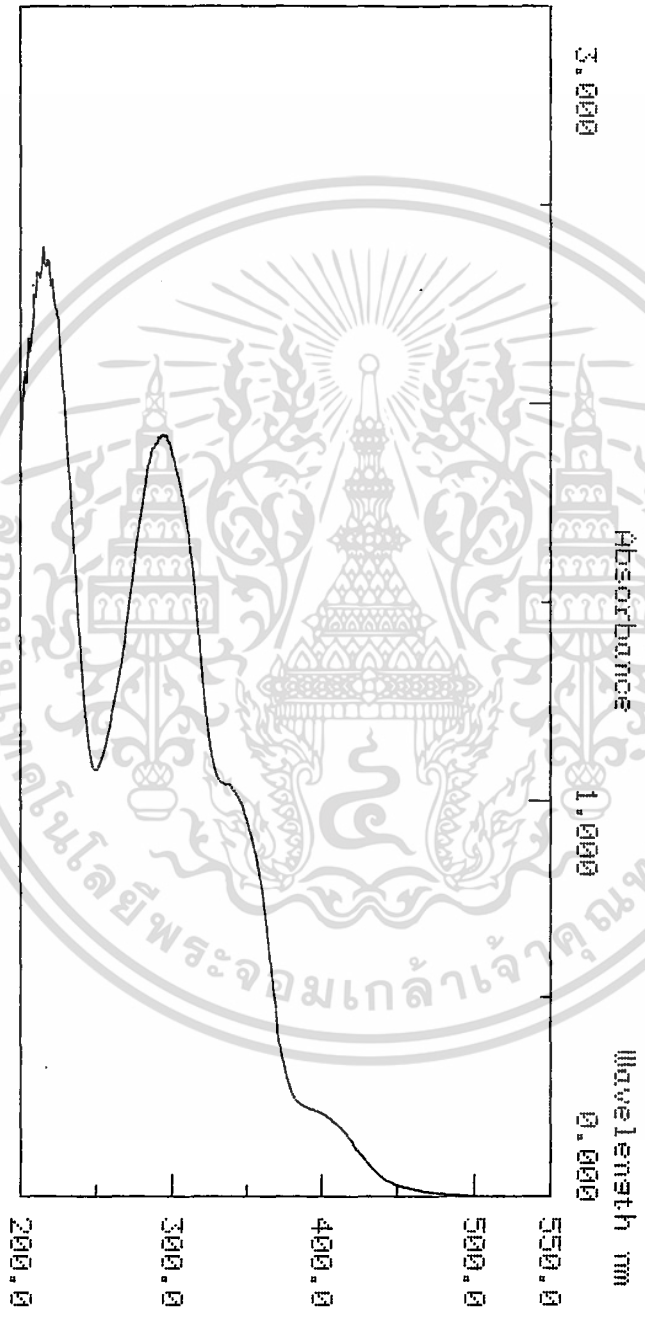
ภาคผนวก ก

รูปแสดงการดูดกลืนแสงของ PIH SAG 47 และ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมที่อัตราส่วนต่างๆ



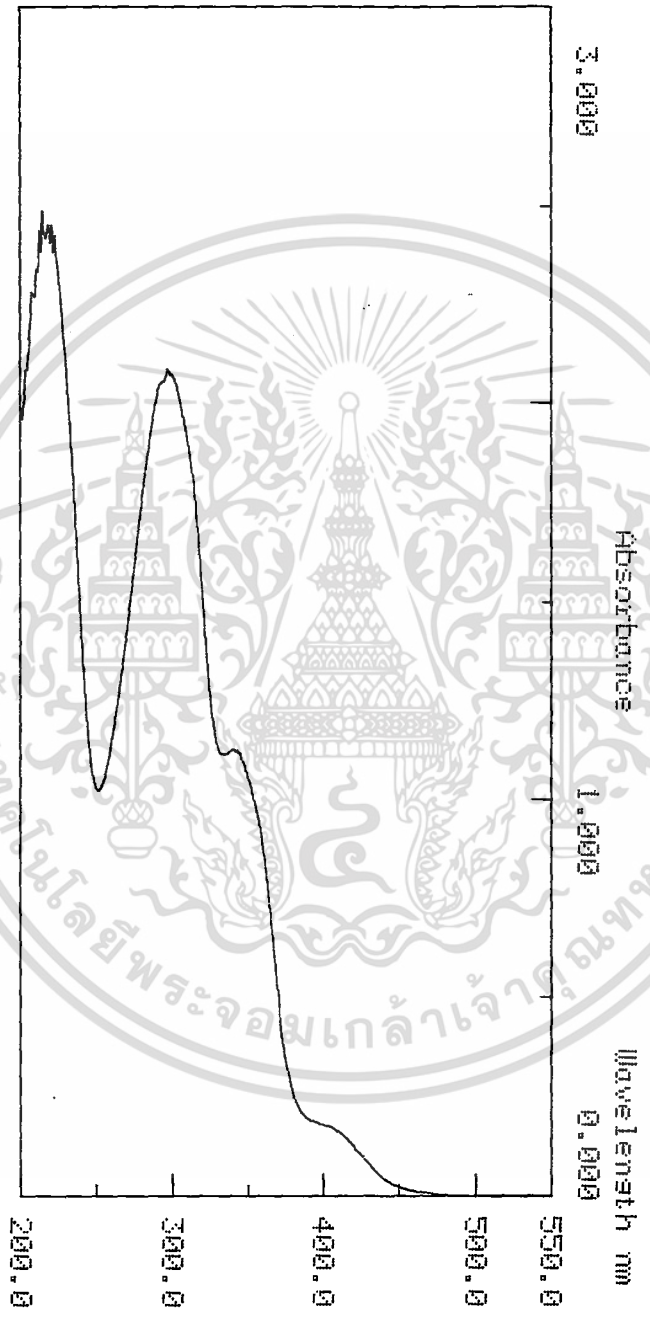
รูปที่ ก-1 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 20 : 80

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



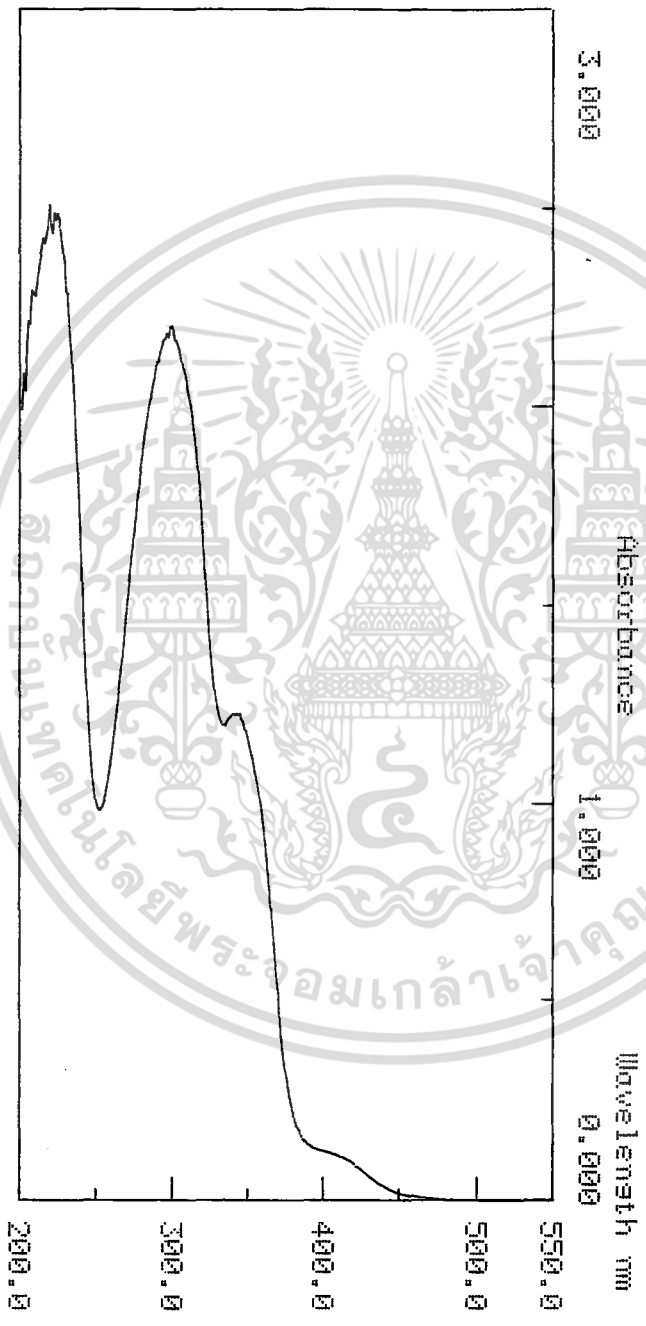
รูปที่ ก-2 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 30 : 70

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



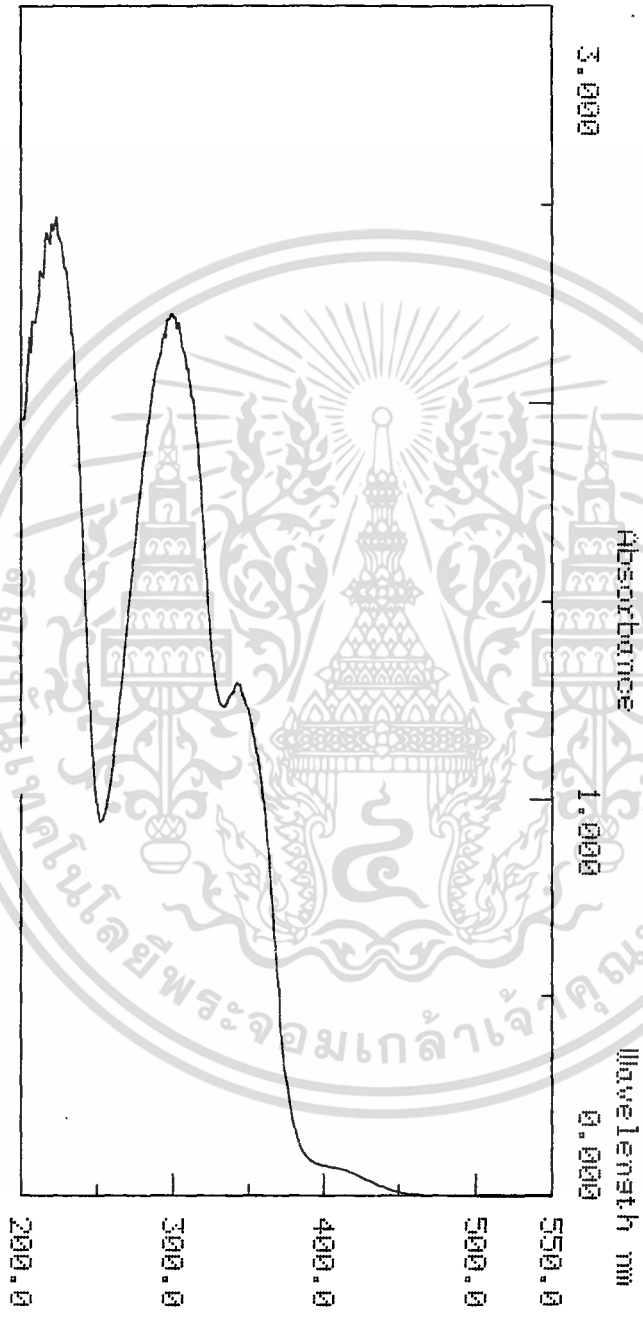
รูปที่ ก-3 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 40 : 60

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



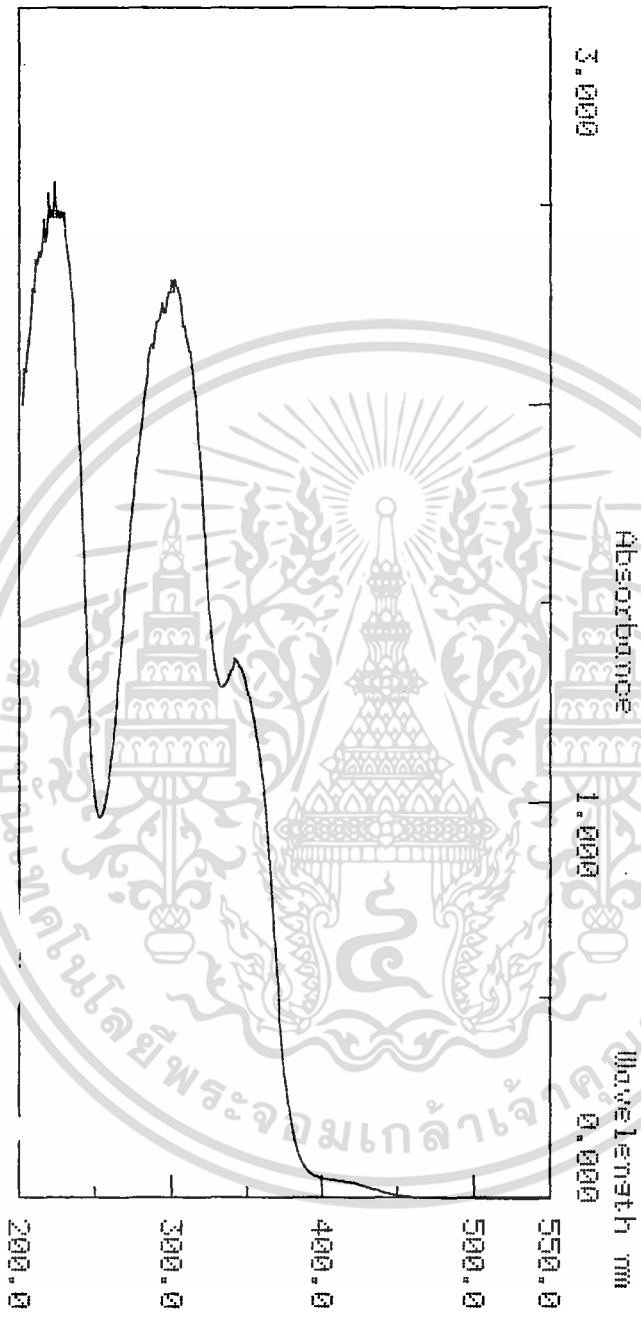
รูปที่ ก-4 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 50 : 50

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



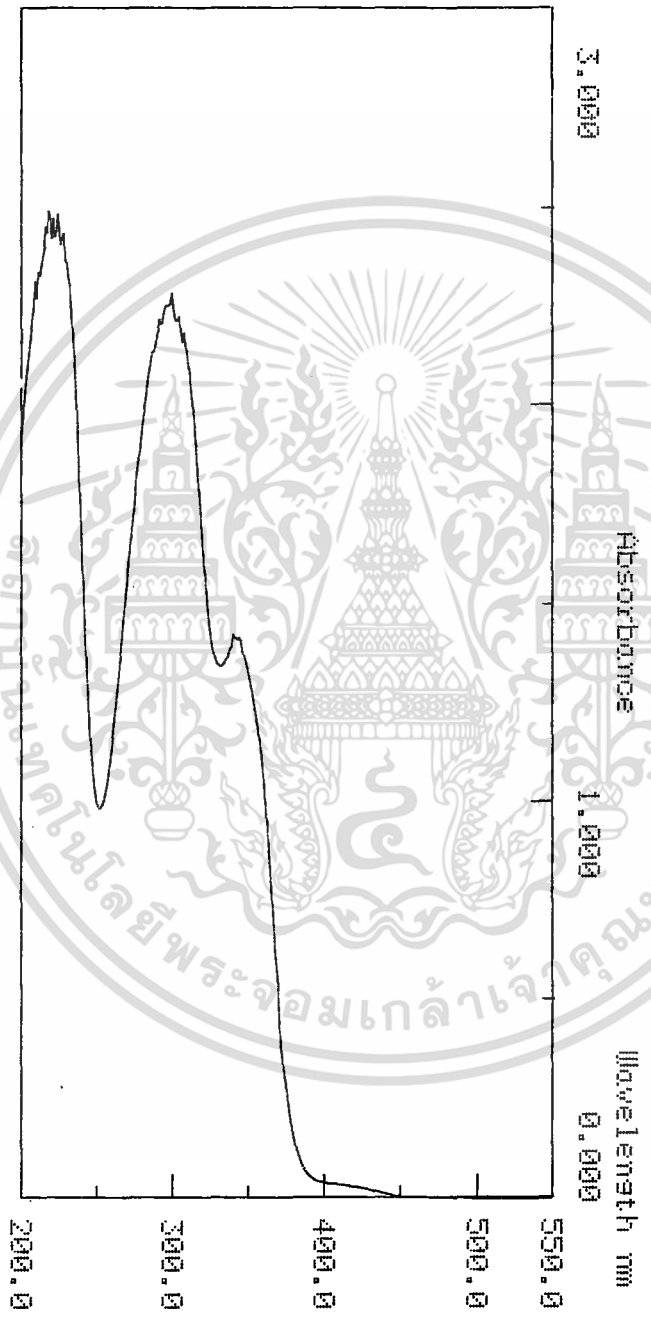
รูปที่ ก-5 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 60 : 40

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



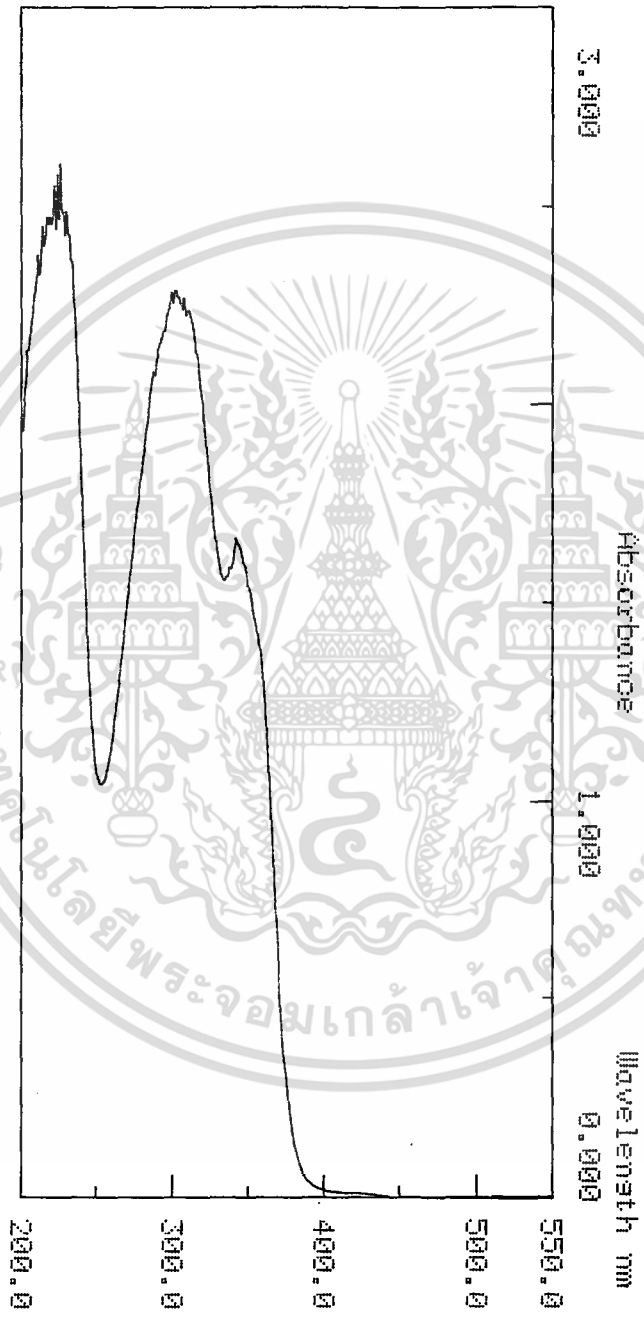
รูปที่ ก-6 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 70 : 30

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



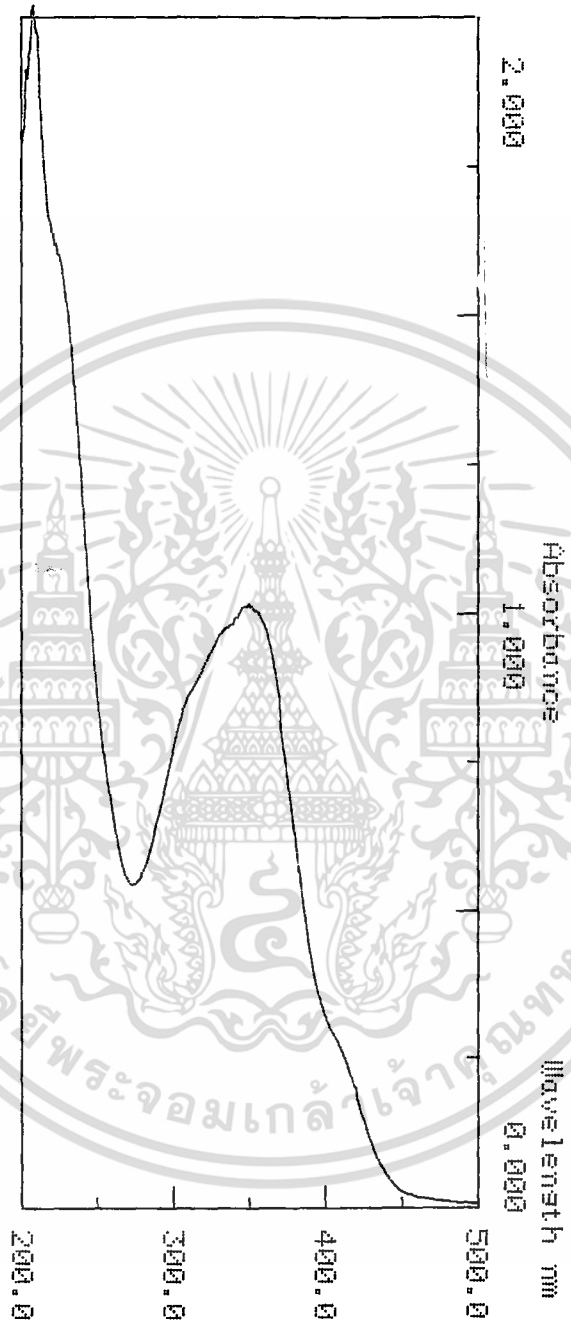
รูปที่ ก-7 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 80 : 20

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



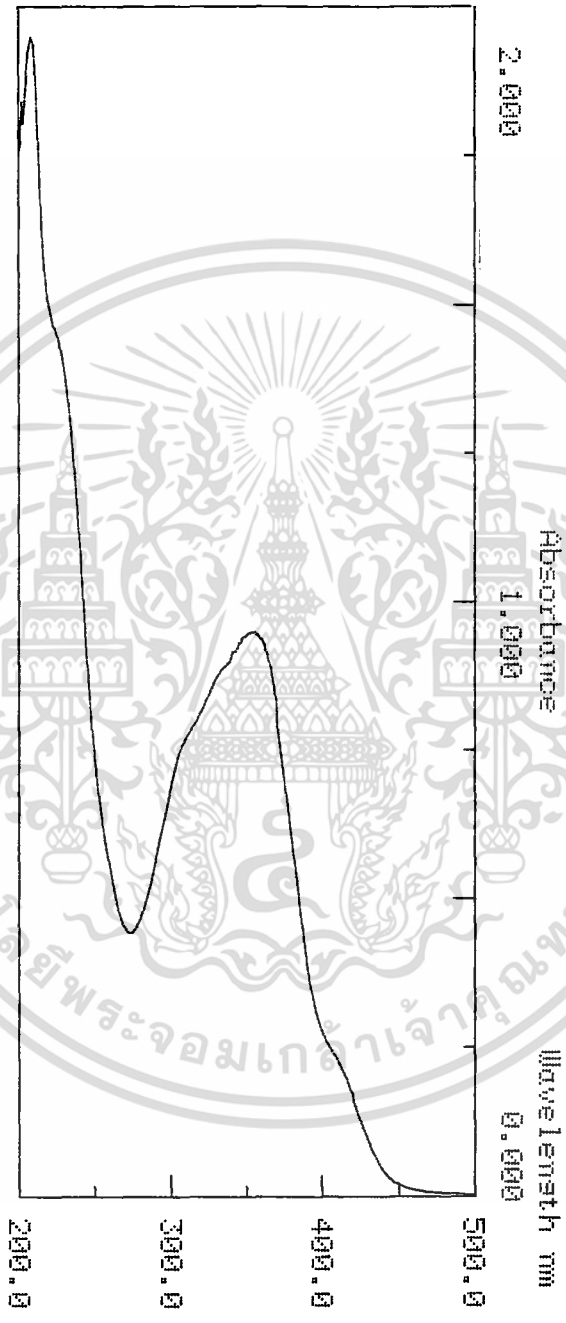
รูปที่ ก-8 แสดงการดูดกลืนแสงของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 90 : 10

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



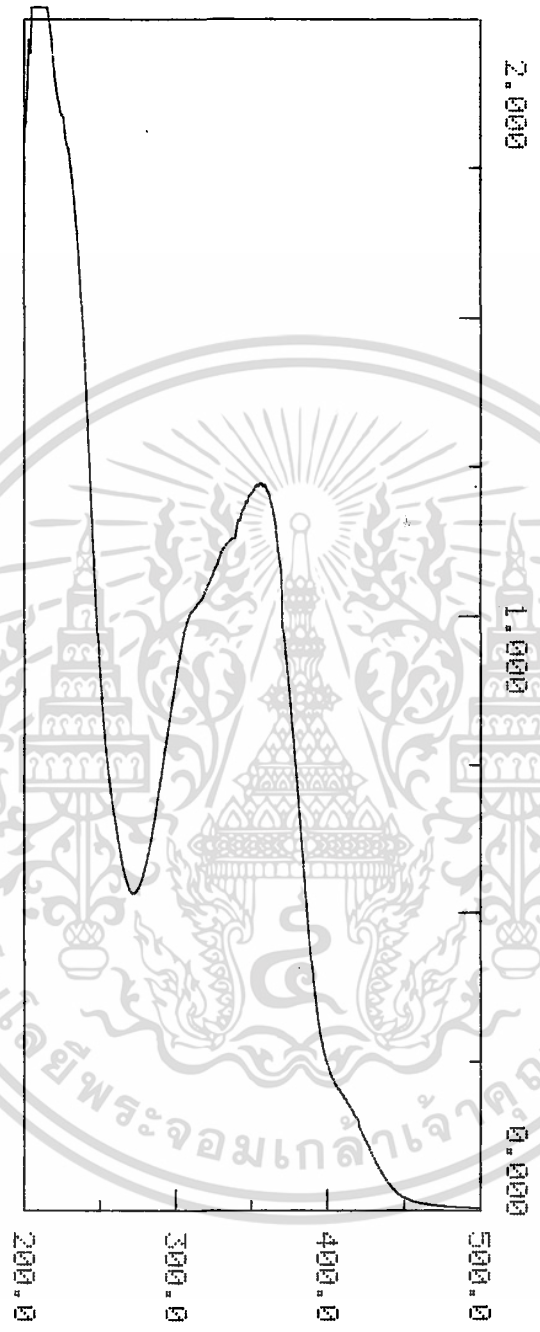
รูปที่ ก-9 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 20 : 80

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



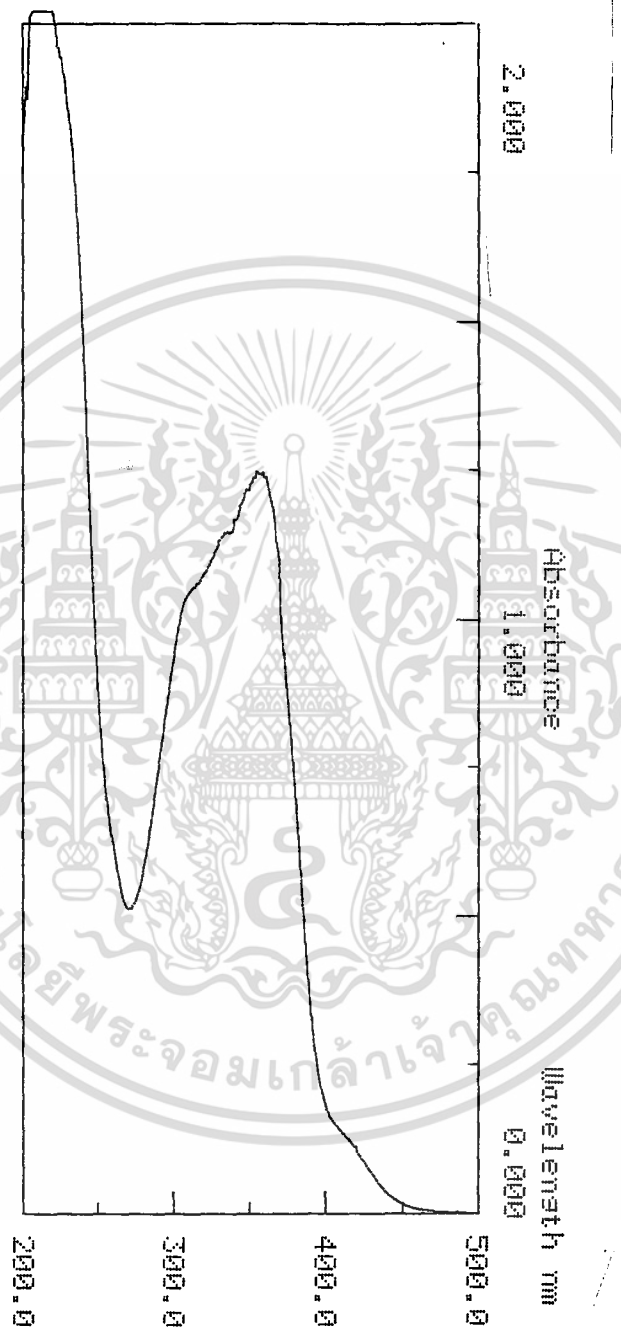
รูปที่ ก-10 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 30 : 70

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



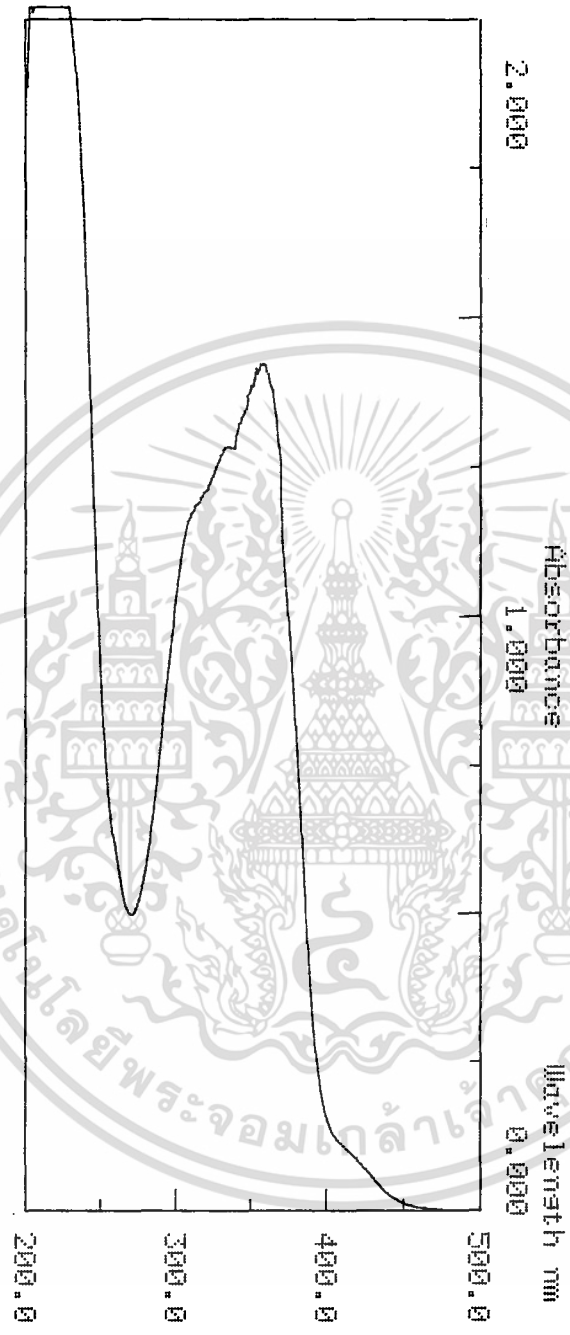
รูปที่ ก-11 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 40 : 60

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



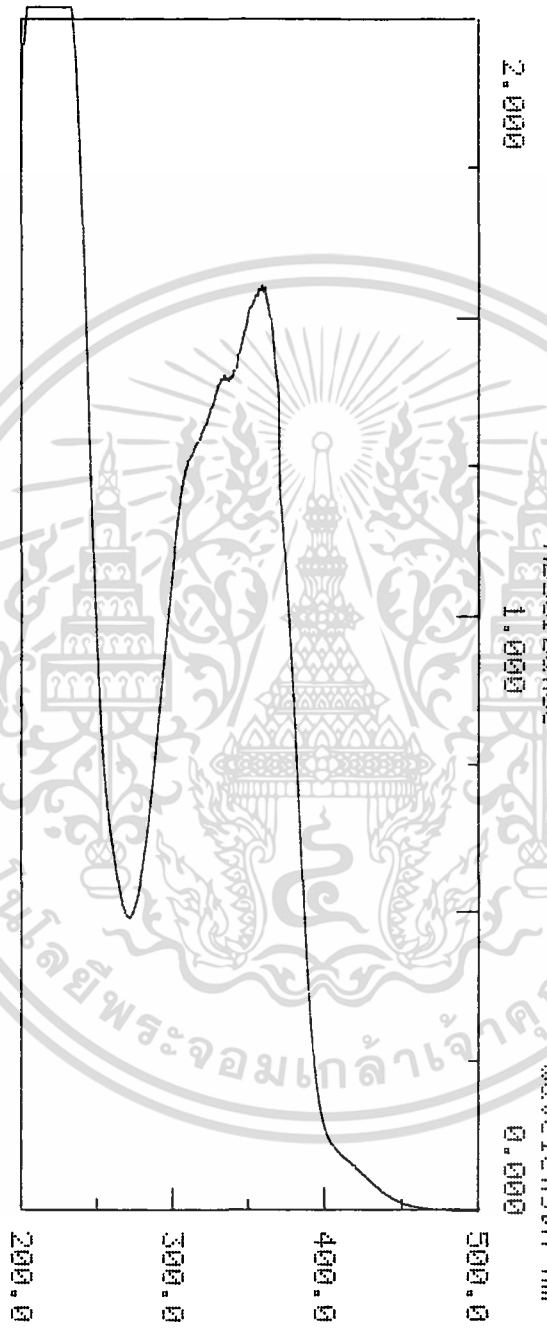
รูปที่ ก-12 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 50 : 50

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



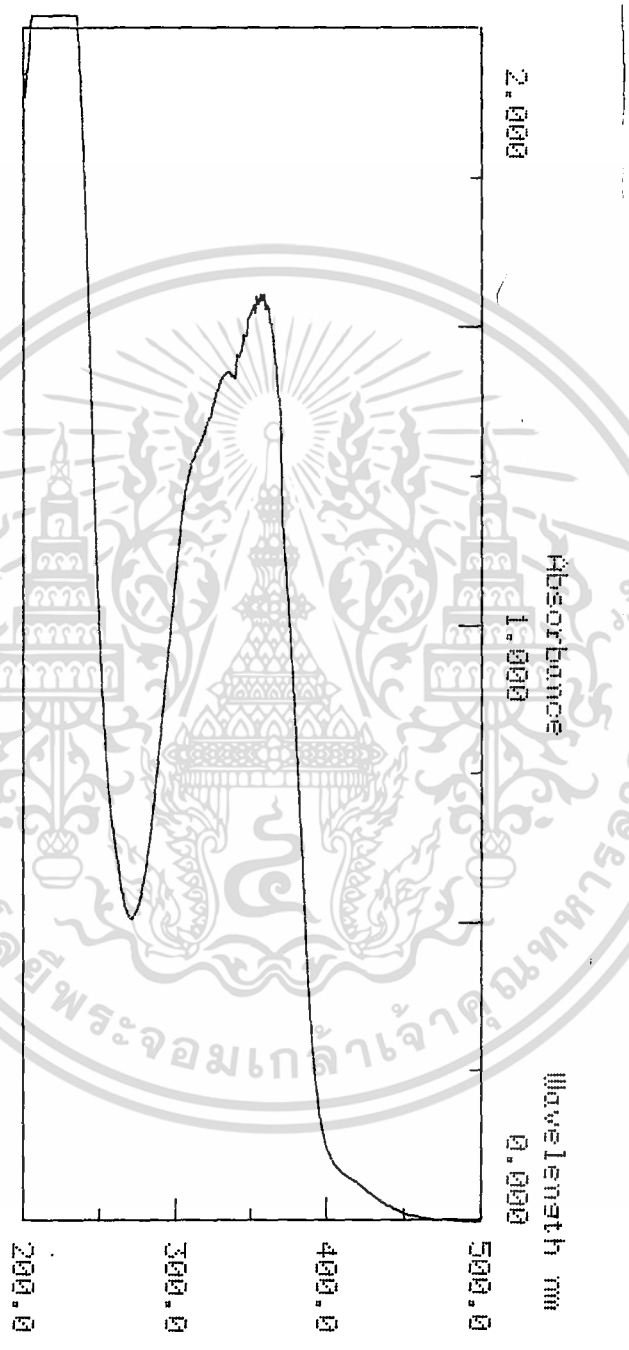
รูปที่ ก-13 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 60 : 40

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



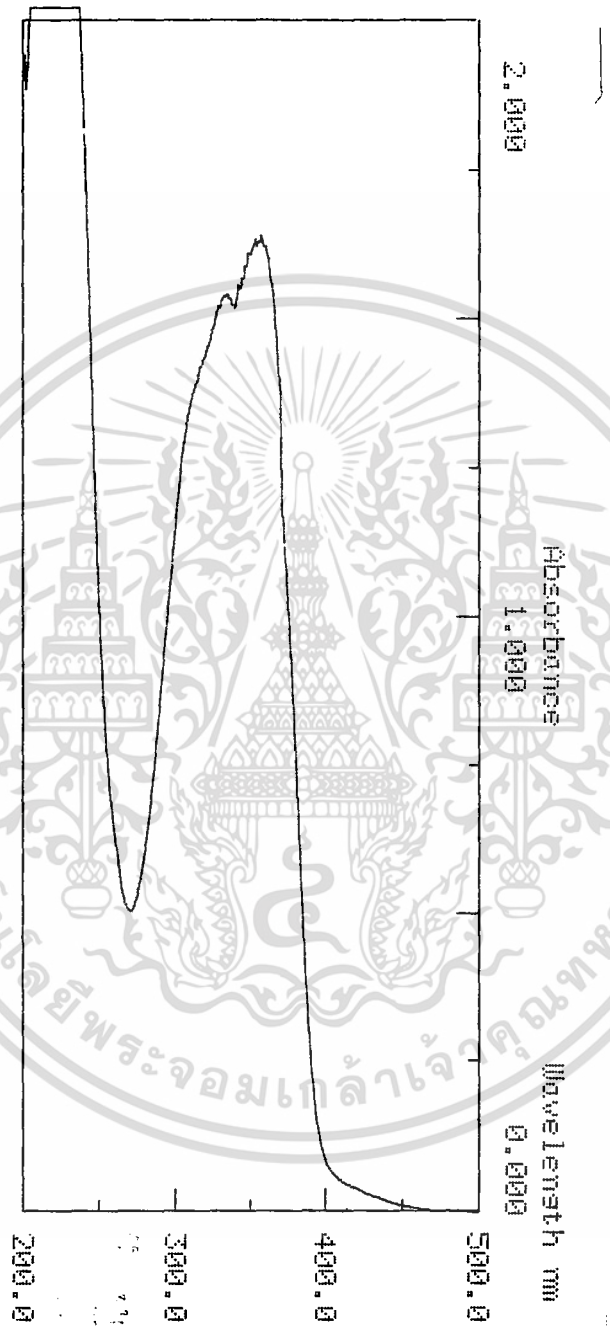
รูปที่ ก-14 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 70 : 30

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



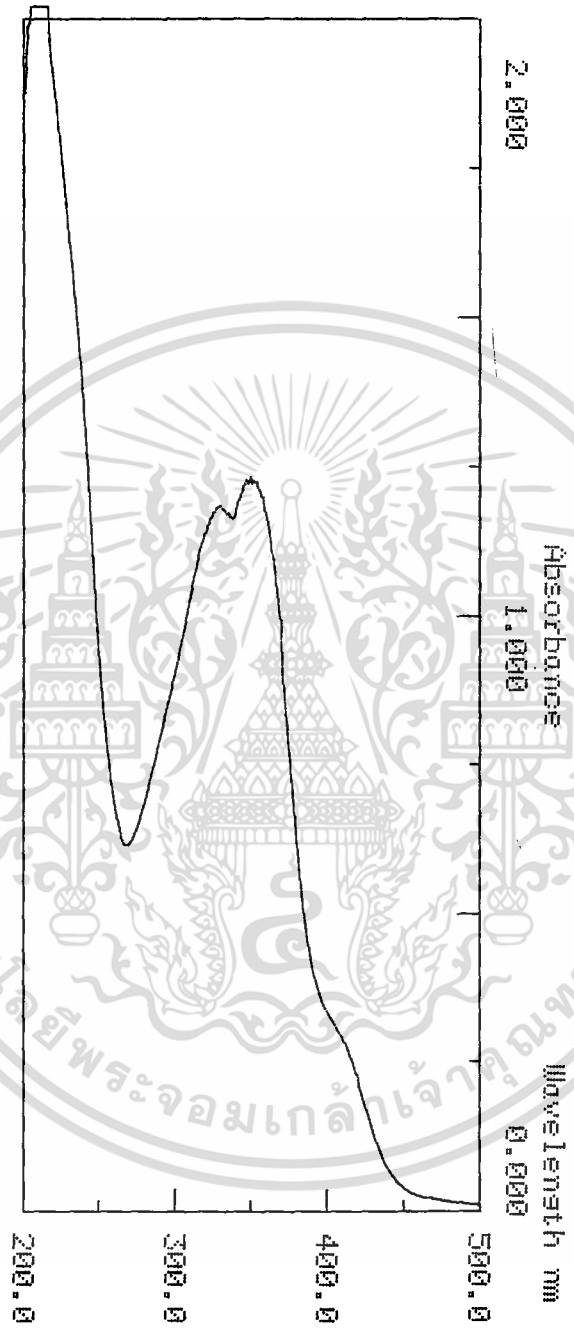
รูปที่ ก-15 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 80 : 20

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



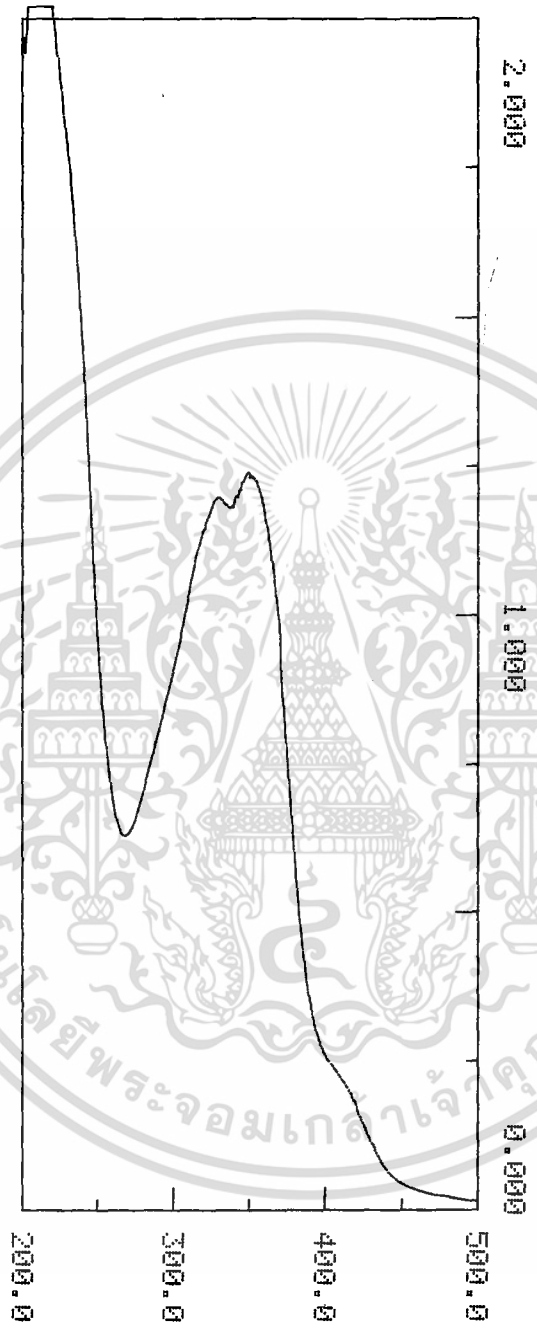
รูปที่ ก-16 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 90 : 10

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



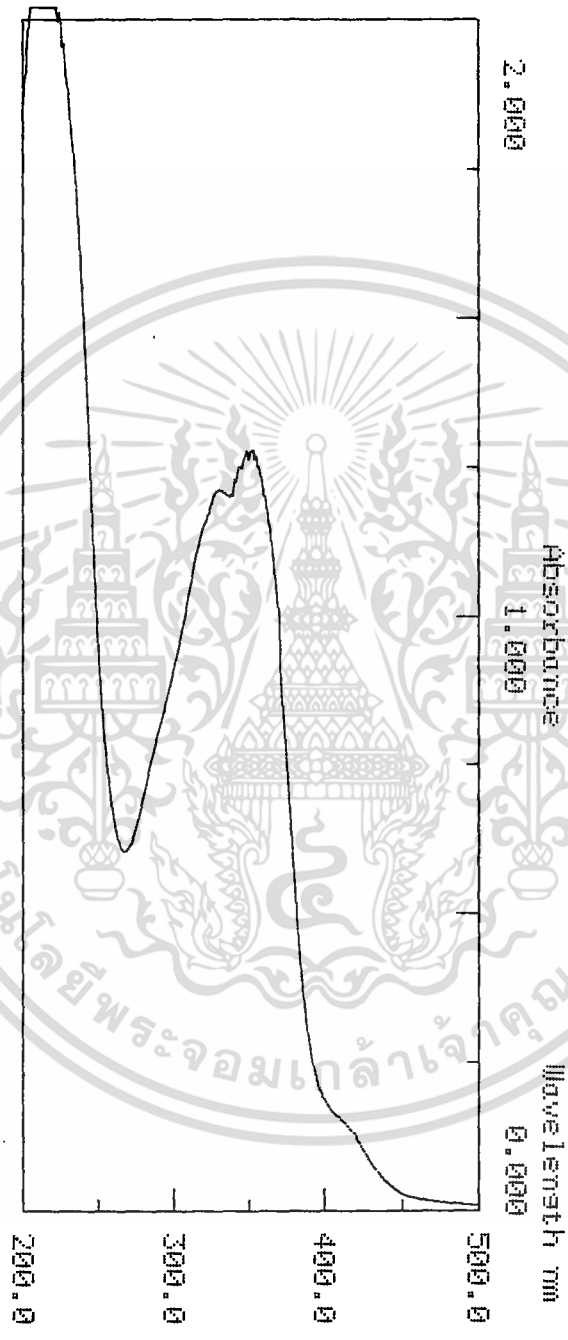
รูปที่ ก-17 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 20 : 80

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



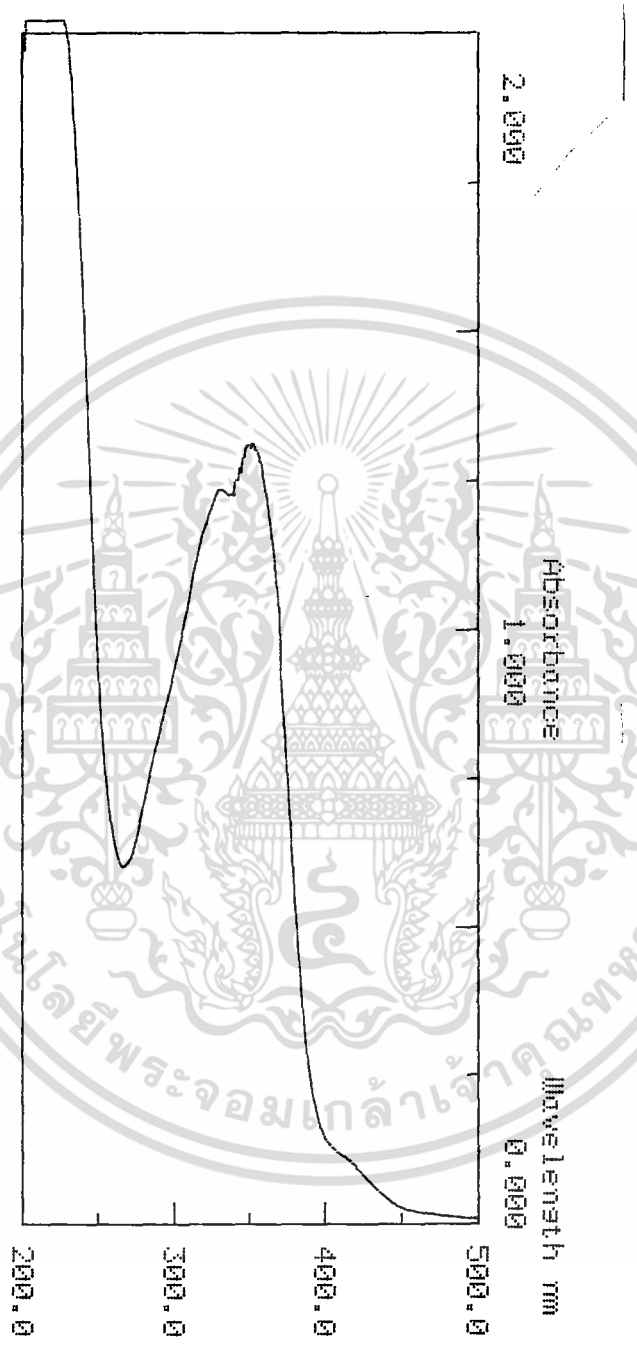
รูปที่ ก-18 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 30 : 70

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



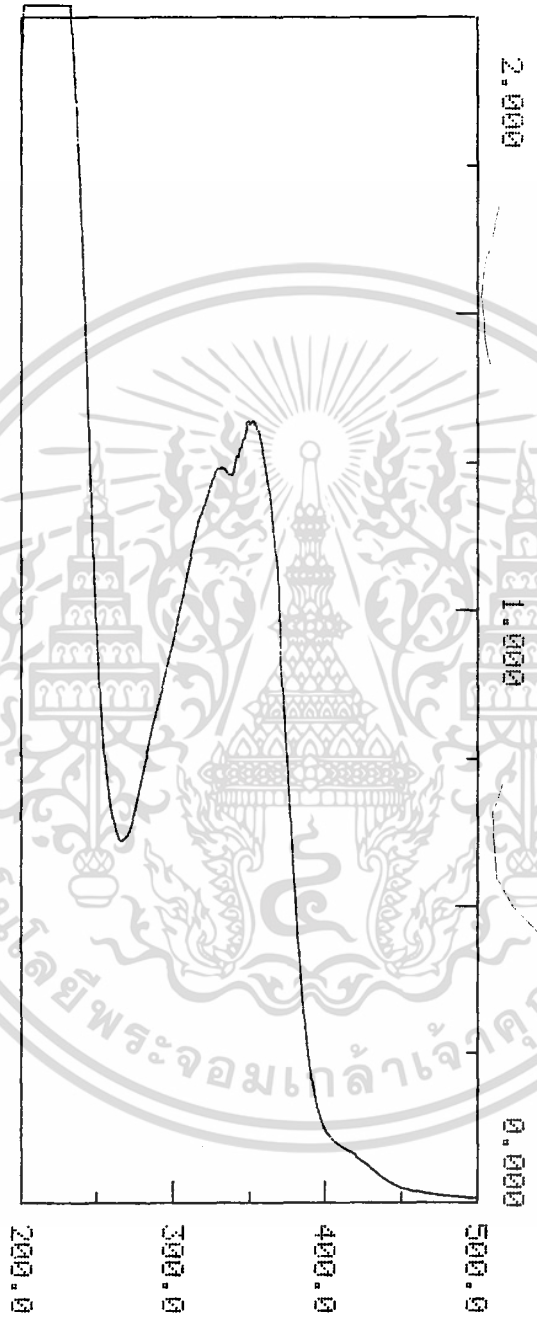
รูปที่ ก-19 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 40 : 60

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



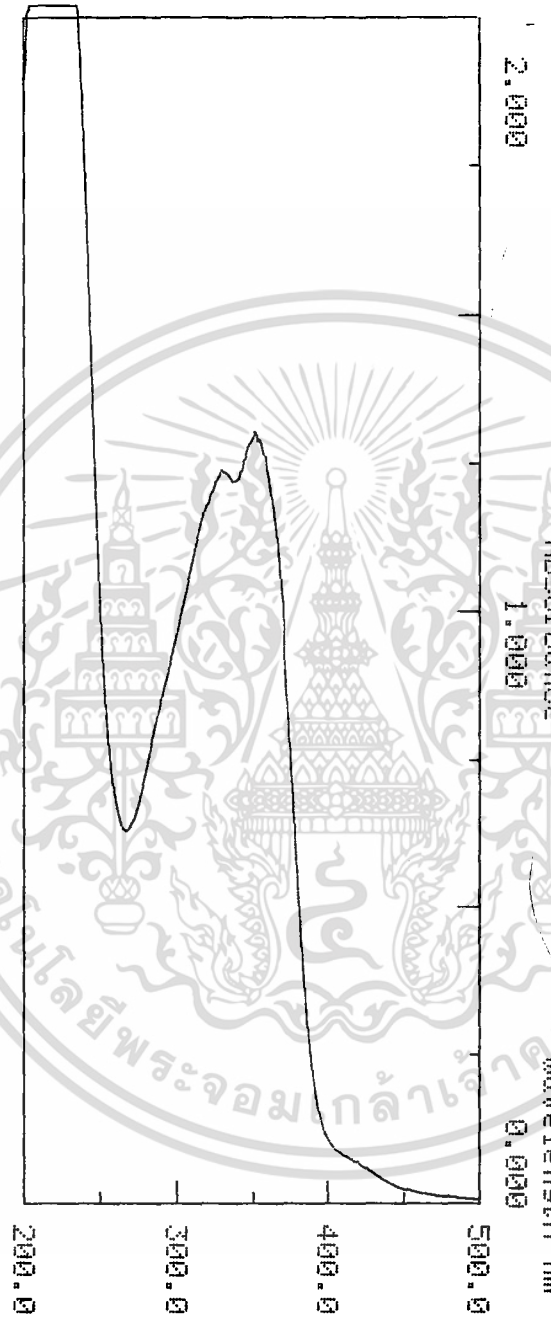
รูปที่ ก-20 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 50 : 50

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



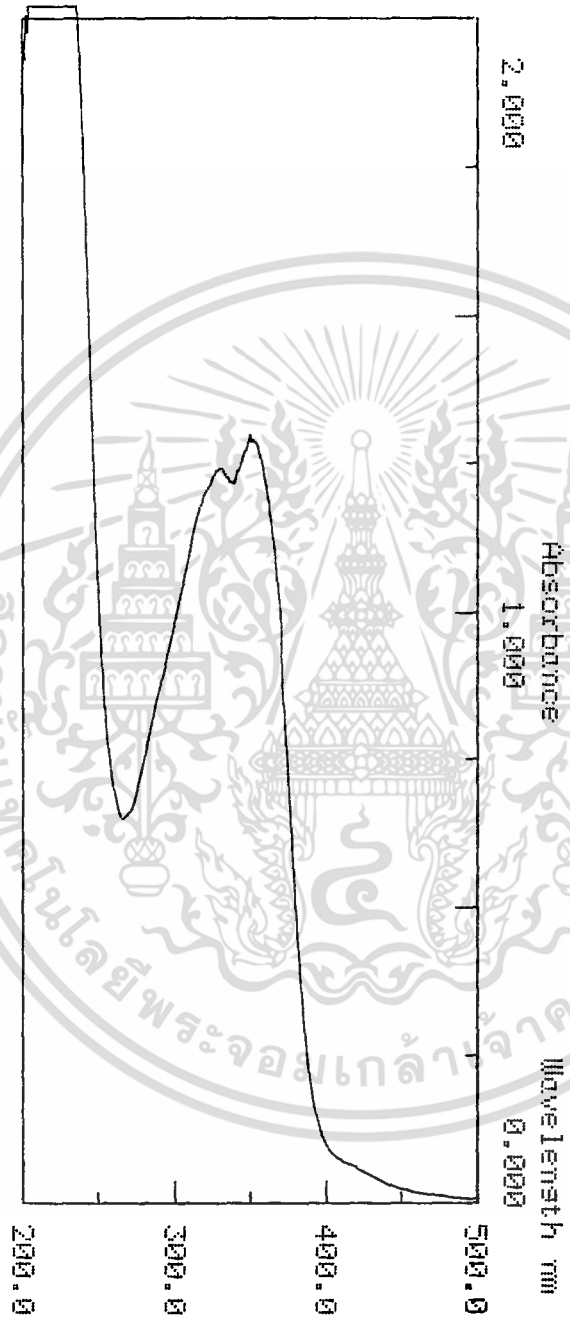
รูปที่ ก-21 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 60 : 40

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



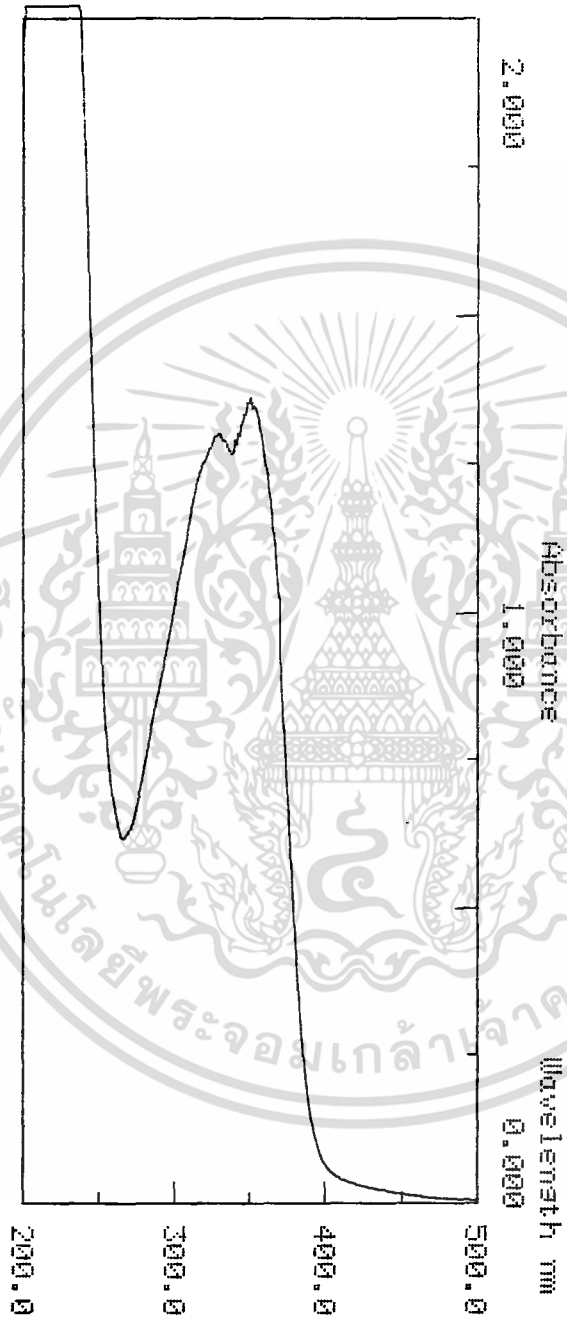
รูปที่ ก-22 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 70 : 30

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ ก-23 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 80 : 20

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ ก-24 แสดงการดูดกลืนแสงของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซน : น้ำ เท่ากับ 90 : 10

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ml	mV	pH	ml	mV	pH	ml	mV	pH
0	391.8764	1.0134	2.5397	152.3498	4.9059	2.5827	-43.8693	8.0945
0.001	392.3185	1.0063	2.5407	150.1946	4.9409	2.5837	-46.5219	8.1376
0.0165	392.5211	1.003	2.5417	146.2341	5.0053	2.5847	-49.5245	8.1864
0.2165	391.5448	1.0188	2.5427	143.0841	5.0564	2.5857	-51.5692	8.2197
0.4165	389.5922	1.0506	2.5437	139.6947	5.1115	2.5867	-53.7613	8.2553
0.6165	387.4738	1.085	2.5447	136.8763	5.1573	2.5877	-55.5113	8.2837
0.8165	384.8028	1.1284	2.5457	133.3395	5.2148	2.5888	-57.4455	8.3151
1.0165	379.2213	1.2191	2.5467	129.3421	5.2798	2.5902	-59.4349	8.3475
1.2165	376.5687	1.2622	2.5477	125.3632	5.3444	2.592	-61.277	8.3774
1.4165	372.8108	1.3233	2.5487	121.0896	5.4139	2.5948	-62.8244	8.4026
1.6165	367.7819	1.405	2.5497	116.8528	5.4827	2.6003	-65.348	8.4436
1.8165	361.0214	1.5149	2.5507	112.4502	5.5543	2.6124	-68.5901	8.4936
2.0165	349.361	1.7043	2.5517	107.6424	5.6324	2.6364	-77.4137	8.6396
2.2165	340.8322	1.8429	2.5527	102.9082	5.7093	2.651	-88.8531	8.8255
2.4165	315.3745	2.2566	2.5537	97.6214	5.7952	2.6551	-99.6661	9.0013
2.4828	291.2063	2.6494	2.5547	92.3715	5.8805	2.6561	-104.787	9.0845
2.5099	272.896	2.9469	2.5557	87.011	5.9677	2.6571	-108.25	9.1407
2.513	250.9752	3.3032	2.5567	81.6321	6.0551	2.6581	-110.406	9.1758
2.514	239.149	3.4953	2.5577	76.2532	6.1425	2.6591	-112.137	9.2039
2.515	231.4859	3.6199	2.5587	70.6533	6.2335	2.6603	-113.242	9.2219
2.516	226.0149	3.7088	2.5597	65.1823	6.3224	2.6627	-114.311	9.2392
2.517	221.0597	3.7893	2.5607	59.3428	6.4173	2.6744	-115.913	9.2653
2.518	216.3808	3.8653	2.5657	53.5034	6.5122	2.7419	-141.426	9.6799
2.519	212.4571	3.9219	2.5627	47.0193	6.6175	2.7569	-152.11	9.8535
2.52	208.9387	3.9863	2.5637	40.922	6.7166	2.7606	-155.26	9.9047
2.521	205.8993	4.0357	2.5647	35.101	6.8112	2.7645	-156.9	9.9313
2.522	202.7862	4.0863	2.5657	29.4642	6.9028	2.7695	-159.258	9.9696
2.523	199.8941	4.1333	2.5667	23.5879	6.9983	2.782	-161.597	10.008
2.524	196.9283	4.1814	2.5677	17.988	7.0893	2.8213	-167.013	10.096
2.525	193.8336	4.2317	2.5687	12.4801	7.1788	2.897	-179.65	10.301
2.526	190.3705	4.288	2.5697	7.3039	7.2629	2.9411	-184.973	10.388
2.527	187.0179	4.3425	2.5707	2.1645	7.3465	3	-196.781	10.579
2.528	183.6837	4.3967	2.5717	-2.6987	7.4255	3.0297	-197.02	10.583
2.529	180.6259	4.4464	2.5727	-7.5986	7.5051	3.2297	-206.912	10.744
2.53	177.2364	4.5015	2.5737	-12.0933	7.5782	3.4297	-214.797	10.872
2.531	174.2154	4.5505	2.5747	-16.7169	7.6533	3.6297	-220.452	10.964
2.532	171.6917	4.5916	2.5757	-20.9722	7.7224	3.8297	-226.402	11.061
2.533	169.0575	4.6344	2.5767	-24.8958	7.7862	4.0297	-229.957	11.1119
2.534	166.2944	4.6793	2.5777	-28.7273	7.8485	4.2297	-232.26	11.156
2.535	163.4576	4.7254	2.5787	-31.9878	7.9014	4.4297	-235.115	11.202
2.536	160.9524	4.7661	2.5797	-35.2299	7.9541	4.6297	-237.215	11.236
2.537	161.3576	4.7595	2.5807	-38.0299	7.9996	4.8297	-239.186	11.269
2.538	155.9603	4.8472	2.5817	-41.1799	8.0508	5.0297	-242.925	11.329

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่อนุญาตให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข-1 แสดงข้อมูลการไทเทรตที่ได้จากการทำแคลิเบรตอิเลกโทรด

ml	pH	mV	ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	1.444	350.48	2.4	7.789	-40.02	2.796	10.006	-176.43
0.001	1.44	350.69	2.401	7.885	-45.91	2.836	10.111	-182.93
0.021	1.437	350.89	2.402	7.974	-51.4	2.866	10.188	-187.64
0.221	1.44	350.69	2.403	8.07	-57.32	2.911	10.286	-193.65
0.421	1.482	348.11	2.404	8.154	-62.46	2.972	10.356	-197.96
0.621	1.553	343.74	2.405	8.235	-67.47	3.126	11.02	-238.84
0.821	1.589	341.55	2.406	8.307	-71.89	3.147	11.028	-239.33
1.021	1.72	333.45	2.407	8.385	-76.68	3.347	11.148	-246.74
1.221	1.753	331.44	2.408	8.457	-81.1	3.547	11.301	-256.13
1.421	1.872	324.09	2.409	8.525	-85.32	3.747	11.425	-263.78
1.621	2.06	312.57	2.41	8.594	-89.55	3.947	11.528	-270.13
1.821	2.34	295.31	2.411	8.647	-92.83	4.147	11.696	-280.41
1.945	2.725	271.64	2.412	8.7	-96.06			
1.984	2.969	256.59	2.413	8.755	-99.46			
1.996	3.12	247.29	2.414	8.806	-102.58			
2	5.208	118.81	2.415	8.866	-106.3			
2.001	5.209	118.79	2.416	8.911	-109.04			
2.039	5.219	118.14	2.417	8.96	-112.04			
2.239	5.52	99.65	2.418	9.003	-114.7			
2.366	6.122	62.58	2.419	9.048	-117.46			
2.385	6.335	49.47	2.42	9.089	-120.02			
2.39	6.515	38.38	2.421	9.129	-122.47			
2.391	6.686	27.86	2.422	9.159	-124.29			
2.392	6.844	18.17	2.423	9.19	-126.21			
2.393	6.982	9.62	2.424	9.217	-127.91			
2.394	7.111	1.72	2.426	9.238	-129.18			
2.395	7.247	-6.68	2.43	9.265	-130.87			
2.396	7.361	-13.7	2.439	9.296	-132.73			
2.397	7.481	-21.03	2.479	9.356	-136.43			
2.398	7.587	-27.55	2.602	9.522	-146.68			
2.399	7.692	-34.07	2.73	9.783	-162.74			

ตารางที่ ข-2 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 50:50

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ml	pH	mV	ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	1.356	370.77	2.279	7.828	-27.46	2.323	10.059	-164.8
0.001	1.262	376.59	2.28	7.93	-33.76	2.329	10.091	-166.74
0.002	1.276	375.74	2.281	8.034	-40.17	2.34	10.114	-168.14
0.046	1.253	377.16	2.282	8.133	-46.28	2.418	10.27	-177.75
0.246	1.384	369.05	2.283	8.21	-51.02	2.497	10.517	-192.97
0.446	1.386	368.96	2.284	8.287	-55.75	2.535	10.664	-202.01
0.646	1.491	362.48	2.285	8.389	-62.03	2.557	10.796	-210.15
0.846	1.545	359.18	2.286	8.483	-67.8	2.571	10.891	-215.98
1.046	1.62	354.57	2.287	8.555	-72.22	2.581	11.041	-225.22
1.246	1.692	350.1	2.288	8.622	-76.33	2.584	11.084	-227.88
1.446	1.813	342.66	2.289	8.694	-80.8	2.6	11.116	-229.81
1.646	1.933	335.31	2.29	8.771	-85.52	2.647	11.247	-237.86
1.846	2.241	316.33	2.291	8.841	-89.81	2.689	11.362	-244.97
1.956	2.538	298.04	2.292	8.899	-93.4	2.728	11.447	-250.2
2.009	3.866	216.31	2.293	8.955	-96.87	2.787	11.576	-258.12
2.011	3.882	215.35	2.294	9.034	-101.69	2.85	11.664	-263.54
2.02	3.881	215.4	2.295	9.104	-106.02	2.97	11.808	-272.38
2.22	4.561	173.59	2.296	9.169	-109.98	3.121	12.124	-291.87
2.256	4.98	147.76	2.297	9.216	-112.87	3.182	12.121	-291.69
2.261	5.21	133.62	2.298	9.278	-116.71	3.382	12.181	-295.35
2.262	5.398	122.07	2.299	9.34	-120.56	3.582	12.259	-300.18
2.263	5.563	111.92	2.3	9.41	-124.87	3.782	12.328	-304.41
2.264	5.747	100.57	2.301	9.449	-127.24	3.982	12.34	-305.13
2.265	5.907	90.75	2.302	9.506	-130.74	4.182	12.462	-312.67
2.266	6.084	79.83	2.303	9.555	-133.74			
2.267	6.263	68.81	2.304	9.6	-136.51			
2.268	6.445	57.65	2.305	9.636	-138.77			
2.269	6.599	48.12	2.306	9.676	-141.19			
2.27	6.737	39.65	2.307	9.723	-144.12			
2.271	6.85	32.67	2.308	9.765	-146.66			
2.272	6.994	23.83	2.309	9.807	-149.26			
2.273	7.145	14.54	2.31	9.852	-152.02			
2.274	7.274	6.62	2.311	9.877	-153.57			
2.275	7.395	-0.84	2.312	9.914	-155.85			
2.276	7.501	-7.38	2.314	9.946	-157.84			
2.277	7.617	-14.49	2.316	9.986	-160.27			
2.278	7.72	-20.84	2.319	10.023	-162.56			

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข-3 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 60:40

ml	pH	mV	ml	pH	mV	ml	pH	mV
0.569	0.899	398.89	2.159	7.139	14.91	2.279	9.301	-118.16
0.759	0.945	396.08	2.16	7.217	10.14	2.314	9.281	-116.91
0.959	0.947	395.98	2.161	7.299	5.09	2.514	9.888	-154.28
1.159	1.046	389.89	2.162	7.365	1.02	2.561	10.181	-172.26
1.359	1.162	382.7	2.163	7.438	-3.49	2.573	10.407	-186.21
1.559	1.33	372.42	2.164	7.515	-8.22	2.575	10.522	-193.28
1.759	1.591	356.34	2.165	7.575	-11.91	2.576	10.682	-203.1
1.889	1.807	343.04	2.166	7.654	-16.77	2.577	10.801	-210.41
1.988	2.086	325.89	2.167	7.705	-19.94	2.578	10.902	-216.68
2.029	3.471	240.66	2.168	7.783	-24.73	2.579	10.902	-216.68
2.03	3.488	239.61	2.169	7.838	-28.1	2.58	10.974	-221.1
2.035	3.517	237.82	2.17	7.915	-32.84	2.581	11.073	-227.16
2.062	3.596	232.92	2.171	7.961	-35.67	2.582	11.161	-232.59
2.104	3.799	220.43	2.172	8.026	-39.65	2.583	11.211	-235.65
2.124	3.986	208.96	2.173	8.08	-42.97	2.584	11.249	-237.99
2.134	4.154	198.6	2.174	8.122	-45.56	2.585	11.282	-240.05
2.136	4.331	187.7	2.175	8.181	-49.23	2.586	11.337	-243.42
2.137	4.496	177.55	2.176	8.226	-51.97	2.587	11.379	-246.02
2.138	4.644	168.47	2.177	8.265	-54.37	2.588	11.386	-246.44
2.139	4.808	158.37	2.178	8.321	-57.81	2.59	11.446	-250.15
2.14	4.958	149.11	2.179	8.366	-60.58	2.592	11.485	-252.56
2.141	5.128	138.64	2.18	8.394	-62.31	2.593	11.529	-255.27
2.142	5.269	129.99	2.181	8.447	-65.61	2.594	11.551	-256.61
2.143	5.403	121.75	2.182	8.497	-68.65	2.596	11.582	-258.49
2.144	5.545	112.98	2.183	8.537	-71.13	2.597	11.606	-260
2.145	5.696	103.72	2.184	8.577	-73.58	2.599	11.596	-259.39
2.146	5.822	95.96	2.185	8.635	-77.14	2.603	11.613	-260.39
2.147	5.977	86.44	2.186	8.693	-80.75	2.621	11.678	-264.42
2.148	6.096	79.13	2.187	8.731	-83.07	2.644	11.673	-264.13
2.149	6.218	71.61	2.188	8.782	-86.18	2.844	11.81	-272.53
2.15	6.324	65.09	2.189	8.804	-87.55	3.044	12.059	-287.84
2.151	6.422	59.03	2.192	8.849	-90.29	3.193	12.037	-286.49
2.152	6.518	53.14	2.194	8.896	-93.18	3.393	12.138	-292.72
2.153	6.633	46.06	2.196	8.94	-95.93	3.593	12.17	-294.71
2.154	6.724	40.42	2.199	8.966	-97.51	3.793	12.25	-299.59
2.155	6.799	35.84	2.203	9	-99.61	3.993	12.321	-303.97
2.156	6.871	31.42	2.216	9.073	-104.09	4.193	12.286	-301.85
2.157	6.961	25.85	2.23	9.143	-108.38			
2.158	7.037	21.17	2.249	9.195	-111.62			

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข-4 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ PIH ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 80:20

ml	pH	mV	ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	1.408	367.6	2.113	5.566	111.73	2.157	7.672	-17.9
0.001	1.404	367.82	2.117	5.723	102.06	2.16	7.7	-19.63
0.065	1.411	367.43	2.118	5.859	93.68	2.169	7.751	-22.78
0.265	1.455	364.69	2.119	5.953	87.91	2.186	7.827	-27.42
0.465	1.499	362	2.12	6.056	81.56	2.208	7.974	-36.45
0.665	1.568	357.76	2.121	6.137	76.58	2.219	8.083	-43.17
0.865	1.641	353.27	2.122	6.217	71.65	2.227	8.165	-48.2
1.065	1.741	347.11	2.123	6.281	67.74	2.232	8.237	-52.64
1.265	1.84	341.02	2.124	6.343	63.91	2.236	8.297	-56.32
1.465	2.002	331.01	2.125	6.4	60.37	2.239	8.346	-59.36
1.665	2.222	317.51	2.126	6.467	56.25	2.241	8.386	-61.85
1.842	2.679	289.36	2.127	6.53	52.36	2.243	8.419	-63.87
1.899	2.904	275.51	2.128	6.606	47.7	2.247	8.447	-65.61
1.917	3.06	265.95	2.129	6.659	44.44	2.253	8.476	-67.39
1.925	3.138	261.14	2.13	6.719	40.74	2.27	8.52	-70.08
1.934	3.216	256.32	2.131	6.763	38.07	2.324	8.66	-78.67
1.94	3.302	251.07	2.132	6.821	34.51	2.376	8.845	-90.05
1.943	3.348	248.21	2.133	6.867	31.64	2.405	8.986	-98.75
1.947	3.408	244.53	2.134	6.921	28.36	2.424	9.056	-103.07
1.949	3.416	244.05	2.135	6.968	25.43	2.445	9.143	-108.43
2.043	4.185	196.73	2.136	7.03	21.64	2.473	9.24	-114.4
2.052	4.397	183.65	2.137	7.078	18.69	2.499	9.31	-118.66
2.054	4.504	177.09	2.138	7.131	15.43	2.543	9.432	-126.19
2.055	4.606	170.77	2.139	7.194	11.5	2.594	9.572	-134.81
2.056	4.695	165.3	2.14	7.179	12.48	2.634	9.695	-142.4
2.057	4.775	160.36	2.142	7.236	8.92	2.669	9.819	-150.03
2.058	4.831	156.92	2.143	7.278	6.35	2.694	9.897	-154.84
2.059	4.875	154.27	2.144	7.326	3.42	2.729	9.973	-159.5
2.06	4.922	151.34	2.145	7.362	1.17	2.813	10.129	-169.06
2.061	4.952	149.51	2.146	7.411	-1.83	2.893	10.276	-178.14
2.062	4.992	147.03	2.147	7.44	-3.62	2.96	10.358	-183.15
2.063	5.02	145.31	2.148	7.48	-6.07	3.109	10.586	-197.22
2.064	5.054	143.21	2.149	7.511	-8	3.209	10.656	-201.52
2.065	5.096	140.62	2.15	7.543	-9.94	3.409	10.813	-211.15
2.067	5.132	138.44	2.151	7.576	-11.96	3.609	10.913	-217.32
2.068	5.16	136.71	2.153	7.61	-14.08	3.809	10.993	-222.26
2.07	5.186	135.07	2.154	7.636	-15.67	4.009	11.08	-227.62

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข-5 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 15:85

ml	pH	mV	ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	1.302	374.12	2.076	5.538	113.46	2.138	7.959	-35.52
0.001	1.3	374.23	2.077	5.57	111.46	2.143	8.006	-38.44
0.065	1.307	373.81	2.079	5.599	109.67	2.153	8.055	-41.47
0.265	1.338	371.93	2.081	5.634	107.53	2.169	8.123	-45.64
0.465	1.383	369.13	2.084	5.673	105.14	2.193	8.248	-53.36
0.665	1.448	365.15	2.09	5.726	101.88	2.213	8.413	-63.47
0.865	1.504	361.67	2.098	5.811	96.66	2.221	8.54	-71.3
1.065	1.611	355.13	2.102	5.924	89.68	2.224	8.623	-76.38
1.265	1.694	349.99	2.104	5.993	85.46	2.225	8.698	-81.04
1.465	1.831	341.55	2.105	6.086	79.73	2.226	8.771	-85.52
1.665	2.041	328.62	2.106	6.17	74.52	2.227	8.811	-87.97
1.846	2.423	305.13	2.107	6.26	69.03	2.228	8.851	-90.46
1.921	2.735	285.9	2.108	6.337	64.24	2.229	8.883	-92.39
1.943	2.977	271.02	2.109	6.419	59.23	2.23	8.907	-93.88
1.948	3.077	264.88	2.11	6.494	54.61	2.231	8.922	-94.8
1.951	3.203	257.11	2.111	6.569	49.99	2.236	8.945	-96.2
1.952	3.27	253.02	2.112	6.635	45.93	2.26	8.988	-98.89
1.953	3.302	251.01	2.113	6.712	41.22	2.339	9.2	-111.92
1.954	3.334	249.1	2.114	6.776	37.26	2.388	9.447	-127.13
1.955	3.352	247.95	2.115	6.845	32.98	2.404	9.554	-133.69
1.957	3.371	246.79	2.116	6.912	28.89	2.417	9.645	-139.29
1.966	3.392	245.52	2.117	6.971	25.26	2.426	9.705	-142.99
2.021	4.111	201.28	2.118	7.064	19.54	2.438	9.772	-147.1
2.025	4.149	198.94	2.119	7.115	16.37	2.452	9.827	-150.51
2.048	4.343	186.96	2.12	7.167	13.16	2.475	9.901	-155.06
2.056	4.494	177.68	2.121	7.219	9.97	2.507	9.979	-159.83
2.059	4.642	168.58	2.122	7.279	6.33	2.558	10.111	-167.99
2.06	4.769	160.73	2.123	7.333	2.99	2.606	10.261	-177.2
2.061	4.88	153.95	2.124	7.391	-0.58	2.641	10.367	-183.74
2.062	4.969	148.46	2.125	7.438	-3.49	2.675	10.443	-188.38
2.063	5.036	144.3	2.126	7.493	-6.84	2.733	10.542	-194.5
2.064	5.096	140.65	2.127	7.539	-9.7	2.829	10.681	-203.04
2.065	5.145	137.59	2.128	7.593	-13.03	2.939	10.832	-212.37
2.066	5.198	134.37	2.129	7.631	-15.37	3.048	10.995	-222.39
2.067	5.24	131.77	2.13	7.674	-18.02	3.152	11.03	-224.5
2.068	5.286	128.96	2.131	7.72	-20.86	3.352	11.135	-231.01
2.069	5.323	126.69	2.132	7.765	-23.61	3.552	11.232	-236.98
2.07	5.363	124.18	2.133	7.808	-26.24	3.752	11.262	-238.78
2.071	5.399	121.97	2.134	7.839	-28.16	3.952	11.348	-244.09
2.072	5.439	119.52	2.135	7.878	-30.59	4.152	11.401	-247.35
2.073	5.471	117.55	2.136	7.915	-32.84			
2.074	5.504	115.51	2.137	7.954	-35.25			

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ซ-6 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 20:80

ml	pH	mV	ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	0.993	393.13	2.077	6.598	48.2	2.144	9.441	-126.73
0.001	0.988	393.46	2.078	6.785	36.7	2.154	9.549	-133.41
0.021	0.988	393.42	2.079	6.958	26.07	2.16	9.655	-139.9
0.221	1.003	392.54	2.08	7.126	15.72	2.162	9.702	-142.83
0.421	1.047	389.81	2.081	7.286	5.87	2.163	9.727	-144.34
0.621	1.109	385.98	2.082	7.423	-2.57	2.165	9.759	-146.29
0.821	1.2	380.4	2.083	7.559	-10.95	2.17	9.797	-148.65
1.021	1.394	368.45	2.084	7.684	-18.61	2.178	9.85	-151.93
1.221	1.445	365.3	2.085	7.813	-26.55	2.189	9.907	-155.44
1.421	1.561	358.17	2.086	7.936	-34.12	2.21	9.993	-160.73
1.621	1.73	347.8	2.087	8.047	-40.94	2.233	10.123	-168.69
1.821	2.01	330.57	2.088	8.142	-46.78	2.249	10.227	-175.12
1.945	2.623	292.85	2.089	8.234	-52.45	2.259	10.3	-179.61
1.964	2.941	273.26	2.09	8.321	-57.85	2.268	10.358	-183.15
1.968	3.182	258.44	2.091	8.415	-63.63	2.282	10.402	-185.89
1.969	3.334	249.1	2.092	8.494	-68.44	2.311	10.502	-192.03
1.97	3.42	243.79	2.093	8.562	-72.64	2.342	10.604	-198.29
1.971	3.478	240.22	2.094	8.624	-76.47	2.375	10.699	-204.19
1.972	3.519	237.71	2.095	8.692	-80.64	2.415	10.802	-210.49
1.973	3.59	233.31	2.096	8.75	-84.21	2.462	10.897	-216.33
1.974	3.598	232.85	2.097	8.802	-87.43	2.529	11.025	-224.23
1.975	3.581	233.88	2.098	8.855	-90.71	2.601	11.124	-230.33
1.977	3.629	230.9	2.099	8.901	-93.51	2.715	11.254	-238.32
1.98	3.659	229.05	2.1	8.947	-96.35	2.891	11.39	-246.66
1.99	3.742	223.93	2.101	8.985	-98.69	3.091	11.64	-262.06
1.998	3.938	211.92	2.102	9.023	-101.03	3.225	11.664	-263.54
2	4.536	175.12	2.103	9.058	-103.2	3.425	11.719	-266.91
2.001	4.537	175.03	2.104	9.093	-105.36	3.625	11.761	-269.53
2.039	4.737	162.7	2.105	9.125	-107.31	3.825	11.798	-271.79
2.07	5.324	126.62	2.106	9.152	-108.99	4.025	11.878	-276.73
2.073	5.686	104.33	2.107	9.177	-110.52			
2.074	5.956	87.73	2.11	9.206	-112.28			
2.075	6.187	73.49	2.115	9.242	-114.53			
2.076	6.409	59.84	2.127	9.311	-118.73			

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข-7 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 47 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 30:70

ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	1.761	345.88	1.893	4.866	154.76
0.001	1.759	345.99	1.966	5.013	145.74
0.201	1.764	345.66	2.039	7.437	-3.4
0.401	1.809	342.91	2.04	7.468	-5.31
0.601	1.874	338.92	2.041	7.499	-7.27
0.801	1.927	335.66	2.042	7.517	-8.35
1.001	2.143	322.36	2.044	7.543	-9.94
1.16	2.146	322.17	2.049	7.573	-11.8
1.36	2.28	313.96	2.063	7.615	-14.36
1.56	2.519	299.24	2.105	7.685	-18.67
1.718	2.862	278.11	2.203	7.836	-27.95
1.779	3.133	261.46	2.305	8.067	-42.19
1.801	3.319	250	2.362	8.241	-52.88
1.809	3.442	242.41	2.401	8.379	-61.41
1.812	3.527	237.18	2.429	8.489	-68.17
1.814	3.613	231.93	2.453	8.59	-74.39
1.815	3.72	225.33	2.476	8.689	-80.49
1.816	3.814	219.53	2.497	8.778	-85.96
1.817	3.896	214.47	2.519	8.857	-90.81
1.818	3.972	209.8	2.547	8.939	-95.83
1.819	4.042	205.53	2.585	9.038	-101.97
1.82	4.104	201.68	2.63	9.133	-107.77
1.821	4.165	197.94	2.693	9.254	-115.23
1.822	4.223	194.37	2.773	9.433	-126.23
1.823	4.282	190.74	2.829	9.553	-133.62
1.824	4.338	187.31	2.891	9.684	-141.7
1.825	4.392	183.94	2.953	9.806	-149.18
1.826	4.441	180.98	3.024	10.628	-199.8
1.827	4.491	177.88	3.029	10.641	-200.61
1.828	4.54	174.84	3.067	10.644	-200.76
1.829	4.582	172.26	3.267	10.736	-206.47
1.83	4.625	169.65	3.467	10.874	-214.96
1.831	4.661	167.42	3.667	11.022	-224.04
1.832	4.73	163.14	3.867	11.122	-230.18
1.833	4.722	163.62	4.067	11.459	-250.92
1.851	4.783	159.88			

ตารางที่ ข-8 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 40:60

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	1.758	346.08	1.859	5.258	130.67
0.001	1.746	346.78	1.86	5.299	128.16
0.009	1.742	347.02	1.861	5.333	126.03
0.209	1.74	347.17	1.862	5.371	123.71
0.409	1.778	344.81	1.863	5.429	120.13
0.609	1.83	341.61	1.864	5.462	118.09
0.809	1.904	337.09	1.865	5.487	116.56
1.009	2.06	327.48	1.867	5.52	114.57
1.209	2.086	325.86	1.87	5.548	112.84
1.409	2.267	314.75	1.875	5.58	110.83
1.609	2.521	299.07	1.888	5.621	108.31
1.751	2.839	279.51	1.921	5.682	104.58
1.811	3.198	257.44	2.002	8.514	-69.71
1.826	3.397	245.21	2.003	8.529	-70.65
1.829	3.457	241.53	2.007	8.551	-71.96
1.831	3.581	233.86	2.025	8.57	-73.16
1.832	3.682	227.64	2.184	8.712	-81.87
1.833	3.827	218.76	2.384	9.141	-108.29
1.834	3.899	214.32	2.448	9.362	-121.88
1.835	3.982	209.22	2.479	9.5	-130.37
1.836	4.077	203.32	2.498	9.607	-136.97
1.837	4.168	197.72	2.512	9.693	-142.24
1.838	4.248	192.82	2.525	9.767	-146.82
1.839	4.325	188.07	2.539	9.847	-151.76
1.84	4.394	183.87	2.552	9.925	-156.51
1.841	4.46	179.78	2.566	9.989	-160.46
1.842	4.525	175.78	2.586	10.069	-165.39
1.843	4.586	172	2.609	10.14	-169.79
1.844	4.646	168.3	2.644	10.222	-174.8
1.845	4.705	164.73	2.698	10.322	-180.96
1.846	4.763	161.14	2.781	10.481	-190.78
1.847	4.816	157.86	2.852	10.608	-198.59
1.848	4.868	154.65	2.935	10.784	-209.38
1.849	4.919	151.56	2.997	10.84	-212.84
1.85	4.969	148.43	3.197	11.384	-246.33
1.851	5.018	145.44	3.239	11.427	-248.97
1.852	5.062	142.73	3.413	11.526	-255.03
1.853	5.08	141.63	3.613	11.613	-260.41
1.855	5.131	138.48	3.813	11.697	-265.6
1.857	5.179	135.51	4.013	11.928	-279.82
1.858	5.216	133.25			

ตารางที่ ซ-9 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 50:50

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ml	pH	mV	ml	pH	mV	ml	pH	mV
0	1.422	366.73	1.879	5.385	122.86	2.091	9.744	-145.41
0.001	1.414	367.23	1.88	5.424	120.43	2.092	9.778	-147.49
0.009	1.412	367.34	1.881	5.466	117.88	2.093	9.817	-149.86
0.209	1.411	367.43	1.882	5.5	115.75	2.094	9.851	-151.98
0.409	1.453	364.82	1.883	5.544	113.09	2.095	9.88	-153.79
0.609	1.513	361.11	1.884	5.581	110.77	2.097	9.906	-155.37
0.809	1.6	355.79	1.885	5.617	108.56	2.098	9.936	-157.19
1.009	1.741	347.08	1.886	5.654	106.28	2.102	9.973	-159.5
1.209	1.768	345.42	1.887	5.694	103.87	2.107	9.998	-161.03
1.409	1.899	337.37	1.888	5.731	101.58	2.122	10.037	-163.4
1.609	2.126	323.42	1.889	5.769	99.22	2.169	10.083	-166.28
1.765	2.463	302.68	1.89	5.793	97.75	2.364	10.47	-190.06
1.827	2.809	281.35	1.891	5.833	95.26	2.437	10.729	-206.03
1.845	3.027	267.96	1.892	5.868	93.13	2.465	10.872	-214.83
1.849	3.21	256.69	1.894	5.899	91.19	2.483	11.001	-222.77
1.85	3.378	246.35	1.895	5.928	89.44	2.493	11.093	-228.41
1.851	3.515	237.95	1.898	5.961	87.43	2.499	11.153	-232.11
1.852	3.635	230.53	1.903	5.993	85.45	2.506	11.226	-236.61
1.853	3.753	223.31	1.914	6.033	82.98	2.512	11.289	-240.46
1.854	3.867	216.29	1.937	6.088	79.59	2.517	11.342	-243.74
1.855	3.96	210.54	1.993	6.187	73.49	2.522	11.386	-246.44
1.856	4.052	204.9	2.073	8.909	-93.99	2.532	11.432	-249.24
1.857	4.148	198.95	2.074	8.94	-95.95	2.545	11.491	-252.93
1.858	4.238	193.45	2.075	8.984	-98.65	2.566	11.55	-256.52
1.859	4.312	188.88	2.076	9.034	-101.71	2.609	11.603	-259.8
1.86	4.382	184.59	2.077	9.081	-104.62	2.74	11.742	-268.35
1.861	4.446	180.63	2.078	9.141	-108.31	2.924	11.867	-276.03
1.862	4.51	176.68	2.079	9.193	-111.51	3.124	12.142	-292.97
1.863	4.576	172.65	2.08	9.251	-115.03	3.245	12.165	-294.37
1.864	4.633	169.13	2.081	9.301	-118.14	3.445	12.201	-296.62
1.865	4.683	166.05	2.082	9.361	-121.84	3.645	12.295	-302.35
1.866	4.746	162.19	2.083	9.413	-125.01	3.845	12.315	-303.59
1.867	4.799	158.93	2.084	9.469	-128.48	4.045	12.441	-311.36
1.868	4.858	155.28	2.085	9.503	-130.54			
1.874	5.157	136.86	2.086	9.54	-132.86			
1.875	5.203	134.06	2.087	9.589	-135.88			
1.876	5.25	131.17	2.088	9.633	-138.53			
1.877	5.291	128.66	2.089	9.67	-140.86			
1.878	5.34	125.62	2.09	9.71	-143.31			

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข-10 แสดงข้อมูลการไทเทรตของ SAG 11 ในตัวทำละลายผสมไดออกเซนและน้ำที่อัตราส่วน 60:40

ภาคผนวก ค

วิธีการใช้เครื่อง UV Spectrophotometer Jasco 7800

1. เสียบปลั๊ก power supply
2. เปิด **on** ที่ power supply แล้วกด reset
3. เปิด **on** ที่เครื่อง UV Spectrophotometer Jasco 7800, computer และ plotter (ถ้าต้องการ print) ตามลำดับ

   ถึงขั้นตอนนี้หน้าจอจะขึ้น good หมด
4. กด method เครื่องพร้อมที่จะทำการใช้งาน โดยจะขึ้นหน้าจอ menu ต่างๆให้
5. ทำ baseline correction โดยใส่ blank (น้ำกลั่น) ลงในช่องใส่สารทั้งสองช่อง แล้วเลือก menu 23 กด enter หน้าจอจะขึ้น list ดังนี้

   1. Baseline correction
   2. Wavelength correction

   - เลือกหมายเลข 1 แล้วกด enter หน้าจอจะขึ้น

     1. on 2. off 3. measure

   - เลือก 1 กด enter แล้วเลือก 3 กด enter
6. กด method เพื่อกลับมาที่ menu
7. ใส่สารที่ต้องการวัด spectrum ลงในช่องใส่สารด้านนอก แล้วเลือก spectrum measurement โดยกด 4 แล้ว enter

   - หน้าจอจะขึ้น list ดังนี้

     1. Photometric Mode : Abs
     2. Start Wavelength : 1100.0 ~
     3. End Wavelength : 200.0 nm
     4. Wavelength Scale : 50 nm/cm
     5. Scan Speed : 2400 nm/min
     6. Lower Limit : 0.000 ~
     7. Upper Limit : 1.000 Abs
     8. Cycle No. and Time : 1
     9. Draw Axis : On

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

10. Line Mode : Full

11. Printer/Plotter : Off

กำหนดค่าพารามิเตอร์ต่างๆตามที่ต้องการ

- กด measure เพื่อทำการวัด spectrum

(สามารถเปลี่ยนค่าพารามิเตอร์ใหม่ได้เมื่อต้องการเปลี่ยนค่า หรือเปลี่ยนสารตัวใหม่โดยกด display list)

- ทำการ scan ช่วงความยาวคลื่นที่ต้องการอินทิเกรต แล้วบันทึกช่วงความยาวคลื่นที่ต้องการอินทิเกรตไว้

8. กด method เพื่อกลับมาที่ menu

9. เลือก data processing เพื่อทำการอินทิเกรตหาพื้นที่พีก โดยเลือก 11 แล้ว enter หน้าจอ จะขึ้น list ดังนี้

1. Peak Picking
2. Derivative
3. Smoothing
4. % T
5. Peak Integration

- เลือก Peak Picking กด enter เพื่อหา λ_{max} และ λ_{min} เพื่อใช้กับการหาพื้นที่พีกโดยวิธี gaussian
- กด enter 2 ครั้ง
- เลือก Peak max เพื่อหา λ_{max} หรือเลือก Peak min เพื่อหา λ_{min} แล้ว enter
- กด display list เพื่อกลับมาที่ menu ของ data processing
- เลือก memory โดยกด 1
- กำหนดค่า Long Wavelength และ Short Wavelength จากช่วงความยาวคลื่นที่บันทึกไว้ในตอนแรก แล้ว enter

จะได้พื้นที่ 2 ชนิด คือ area 1 และ area 2 โดยพื้นที่ใต้พีกทั้งหมดเท่ากับ area 1 + area 2

10. ปิดเครื่องโดยย้อนจาก plotter, computer, UV Spectrophotometer Jasco 7800 และ .power supply ตามลำดับ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

<u>หมายเหตุ</u> **หลังจากทำการทดลองเสร็จทุกครั้ง ให้ล้าง cuvett ด้วยกรดไนตริกเข้มข้น 5 M แล้วล้างด้วยน้ำกลั่น เช็ดให้แห้ง**

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ง

ตัวอย่างการใช้โปรแกรม CURVE EXPERT 1.3

CURVE EXPERT 1.3 เป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการพลอตกราฟรูปแบบต่างๆ เช่น กราฟเส้นตรง กราฟเอ็กโปเนนเชียล กราฟลอกการิทึม เป็นต้น และยังสามารถหาความสัมพันธ์ของตัวแปรของกราฟได้ สำหรับในการทดลอง จะทำการพลอตกราฟเส้นตรง เพื่อหาความชัน (slope) ของกราฟซึ่งมีวิธีการใช้ดังนี้

1. พิมพ์ค่าที่จะทำเป็นแกน x ลงในคอลัมน์ที่ 1
2. พิมพ์ค่าที่จะทำเป็นแกน y ลงในคอลัมน์ที่ 2
3. คลิกที่ปุ่ม linear fit ที่ toolbar จะได้กราฟเส้นตรง
4. คลิกที่ปุ่ม information เพื่อดูค่าความชันของกราฟเส้นตรงจากสมการ

$$y = ax + b$$

a = ความชัน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก จ

รายละเอียดเกี่ยวกับโปรแกรม TR600

โปรแกรม TR600 เป็นโปรแกรมที่ใช้ควบคุมเครื่องไทเทรตอัตโนมัติของ Schott ซึ่งใช้ในการควบคุมการปล่อยสารละลายของเครื่องไทเทรต , การวัดศักย์ไฟฟ้าโดยอิเลคโทรด รวมทั้งการเชื่อมต่อและส่งผ่านข้อมูลกับคอมพิวเตอร์ ซึ่งรายละเอียดการใช้โปรแกรม TR600 สามารถศึกษาเพิ่มเติมได้จากคู่มือการใช้เครื่องมือไทเทรตอัตโนมัติ

สำหรับการไทเทรตด้วยเครื่องไทเทรตอัตโนมัติ ได้มีโปรแกรมย่อยเพื่อช่วยการควบคุมการไทเทรตให้เป็นไปตามต้องการ โดยแต่ละโปรแกรมมีรายละเอียดดังต่อไปนี้

โปรแกรม ECAL

ใช้ในการไทเทรตเพื่อนำข้อมูลไปคำนวณทำ Electrode Calibration ซึ่งมีรายละเอียดโปรแกรมดังต่อไปนี้

```
Initialize
Parameter
Work Graphic
Dose 2.000 ml. (01/A)
Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH
Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV
WHILE (pH <= 12.0000)
        Titrate from Burette (01/C)
        Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH
        Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV
 ENDWHILE
online Graphics pH vs ml
Documentation
End of Method
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

โปรแกรม ATOB

ใช้ในการไทเทรตเพื่อนำข้อมูลที่ได้ไปคำนวณหาค่าคงที่สมดุล ซึ่งหลักการของโปรแกรมนี้จะทำการไทเทรตสารละลายที่อยู่ในสภาพกรดให้ไปเป็นด่างที่ pH ประมาณ 12.0 ซึ่งมีรายละเอียดโปรแกรมดังนี้

```
Initialize
Parameter
Work Graphic
Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH
Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV
WHILE (pH <= 12.0000)
        Titrate from Burette (01/C)
        Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH
        Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV
 ENDWHILE
online Graphics pH vs ml
Documentation
End of Method
```

โปรแกรม BTOA

ใช้ในการไทเทรตเพื่อนำข้อมูลที่ได้ไปคำนวณหาค่าคงที่สมดุล ซึ่งหลักการของโปรแกรมนี้จะทำการไทเทรตสารละลายที่อยู่ในสภาพด่างให้ไปกรดที่ pH ประมาณ 12.0 ซึ่งมีรายละเอียดโปรแกรมดังนี้

```
Initialize
Parameter
Work Graphic
Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH
Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV
WHILE (pH <= 2.0000)
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Titrate from Burette (01/A)

Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH

Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV

ENDWHILE

online Graphics pH vs ml

Documentation

End of Method

โปรแกรม FILLA

ใช้ในการเติมสารละลายกรดไนตริก ปริมาตร 2.000 มิลลิลิตร

Initialize

Dose 2.000 ml. (01/A)

End of Method

โปรแกรม FILLB

ใช้ในการเติมสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ ปริมาตร 2.000 มิลลิลิตร

Initialize

Dose 2.000 ml. (01/A)

End of Method

โปรแกรม mytoph

ใช้สำหรับบอกค่า pH ของสารละลาย ซึ่งแปลงมาจากค่าต่างศักย์ที่วัดได้จากอิเลคโทรด

Initialize

Parameter

Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH

Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV

WHILE (pH <= 12.0000)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: pH

Get Value Slot: 01A Range: 400 Dim: mV

ENDWHILE

End of Method

ทุกโปรแกรมจะตั้งค่าพารามิเตอร์ที่ใช้ในการไทเทรตเท่ากัน ซึ่งมีค่าดังต่อไปนี้

Titration Parameter

Points for final value	:	0
Points for delay	:	0
Sum of differences	:	1.000
Slope of value	:	0.500
Difference of averages	:	0.100
Linear step value	:	0.200
Smallest step	:	0.001
Largest step	:	0.100
Dynamic curve shape	:	0.150
Dynamic curve ship	:	0.850
Dynamic titration	:	on
Electrode efficiency	:	0.980
Eletrod offset [pH]	:	0.330
Temperature	:	37.000

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ฉ

ความหมายของคำสั่งต่างๆที่ใช้ใน Sample Indentification และ Comments

ใน sample name documentation และ comments documentation ข้างบนจำนวนทั้งหมด 4 บรรทัด จะเป็นกลุ่มคำสั่งที่จะช่วยเปลี่ยนข้อมูลของโปรแกรม TR600 โดยโปรแกรม DCO ให้เป็น input สำหรับโปรแกรม ELE เพื่อคำนวณหา electrode parameters ต่อไป ความหมายของคำสั่งต่างๆดังนี้

1) e01a9801 เป็นชื่อ input ไฟล์ของข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตชุดนี้ สำหรับโปรแกรม ELE จะต้องเป็นอักษรภาษาอังกฤษและตัวเลขรวมกันครบ 8 ตัวพอดี ดังตัวอย่าง

e คือ electrode

01 หมายถึง วันที่ 1

a หมายถึง เดือน มกราคม

98 หมายถึง ปี 1998

01 หมายถึง ข้อมูลชุดที่ 1 (ในกรณีข้อมูลชุดต่อไปก็จะเป็น 01,02,...)

2) ves[wat=25.0,aco1=0.25,acv=2.0],

ves[...] หมายถึง กลุ่มข้อมูลที่เกี่ยวกับสารละลายใน titration vessel มีดังต่อไปนี้

wat=25.0 หมายถึง ปริมาตรสารตั้งต้น คือ สารละลาย KNO_3 0.5 *M* จำนวน 25 ml

aco1=0.25 หมายถึง ความเข้มข้นของกรด HNO_3 เป็นโมลาร์ ที่มีใน titration vessel

acv=2.0 หมายถึง ปริมาตรกรดที่เติมใน titration vessel

aco1 เลข 1 จะเป็น running key (RK) ของตัวแปรใน input ของโปรแกรม ELE ซึ่งจะหมายถึงความเข้มข้นของกรดไนตริก (HNO_3) จะถูกคำนวณใหม่พร้อมกับตัวแปรอื่นเพื่อให้ได้ค่าถูกต้องและละเอียด ถ้าใช้เลข 0 แทนหมายถึง ความเข้มข้นของกรด HNO_3 จะถูกกำหนดให้คงที่เป็น 0.5 ตลอดการคำนวณ

3) bur[bco0=-0.25],

bur[...] หมายถึง กลุ่มข้อมูลที่เกี่ยวกับสารละลายใน buret ซึ่งมีดังต่อไปนี้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

bco0=-0.25 หมายถึง ความเข้มข้นในหน่วยโมลาร์ของโซเดียมไฮดรอกไซด์ (NaOH) เครื่องหมาย - หมายถึง base , ส่วน bco0 เลข 0 คือ running key (RK)

4) ele[eze1=400.0]

ele[...] หมายถึง กลุ่มข้อมูลที่เกี่ยวกับ electrode ซึ่งมีดังต่อไปนี้

eze1 = 400.0 หมายถึง ค่าที่เดาตั้งต้นสำหรับ E° เลข 1 คือ running key (RK)

(eze1 แทนที่จะเป็น eze0 เพราะเราต้องการคำนวณหาค่า E° นั่นเอง)

ใน sample name documentation และ comments documentation พิมพ์คำสั่งแค่บรรทัดที่ 1 (ข้อความ d01a9802, from=d01a9802) บรรทัดอื่นปล่อยว่าง โปรแกรม DCO ที่ใช้ภายหลังจะสร้าง input file สำหรับโปรแกรม SUPER คือ ไฟล์ d01a9802 โดยจะใช้ข้อมูลต่อเนื่องมาจากชุดแรกคือ ไฟล์ d01a9801 โดยอัตโนมัติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ช

Data Input สำหรับโปรแกรม SUPERQUAD และ โปรแกรม ELE

รูปแบบมาตรฐานสำหรับการใส่ข้อมูล

Running Key = RK

Reactant Index = RI

Total Amount of Reactant (mmol) = TMMOL

Reactant Concentration (M) = CONC.

Error in Reading Volume of Burette = ERR.

Error in Millivolt = Emv.

Slope Factor = Sl

COLUMN

MENU

1. [Name 80 col.]
2. [No. of loop] [Print Mode] [No. of Reactants] [Det Reactant]
3. [Name of Reactants]

   ...
4. [Working Temp.] [Initial Voltage] [Final Voltage]
5. [log K] [No. of Reactant] [No. of Ligand] [RK]

   ...
6. Blank Line
7. [Control No.] [RI] [TMMOL] [CONC.] [RK of TMMOL] [RK of CONC.]

   ...
8. Blank Line
9. [Control No.] [RI] [Initial Volume (ml)] [ERR.]
10. [Control No.] [Control No.] [RI] [E°] [Emv] [RK of E°] [Sl Factor]
11. Blank Line
12. [RK of Point] [Titrant Volume] [Reading Voltage (mv)] [Point No.]

    ...

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

13. Blank Line

14. Options

โดยรูปแบบของการใส่ข้อมูล เพื่อนำไปคำนวณโดยใช้โปรแกรม SUPERQUAD และ ELE ในบางรายการอาจมีข้อมูลมากกว่า 1 ได้ เช่น

รายการที่ 3 : สามารถมีข้อมูลได้มากที่สุด 4 บรรทัด แต่ละบรรทัดจะแทนสารตั้งต้นแต่ละตัว

รายการที่ 5 : สามารถมีข้อมูลได้มากที่สุด 18 บรรทัด แต่ละบรรทัดจะแทนค่าคงตัวเสถียรภาพของสารเชิงซ้อนแต่ละตัวที่กำหนดไว้

รายการที่ 7 : สามารถมีจำนวนข้อมูลได้เท่ากับจำนวนของสารตั้งต้น ข้อมูลแต่ละตัวแสดงรายละเอียดของสารตั้งต้นแต่ละชนิดในการไทเทรต

รายการที่ 12 : สามารถมีข้อมูลได้มากที่สุด 401 บรรทัด แต่ละบรรทัดจะแทนค่าของข้อมูลการไทเทรตแต่ละจุด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รายละเอียดของการจัดรูปแบบของข้อมูลในแต่ละรายการมีดังนี้

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการของเนื้อที่	ความหมาย
1	1 - 80	String [80]	Filename (ชื่อชุดข้อมูล)
2	1 - 5	INT	No. of Loops (จำนวนรอบสูงสุดในการทำงาน)
	6 - 10	INT	Print Mode (ตัวเลขควบคุมการพิมพ์) ได้แก่ 1 คือ พิมพ์เฉพาะผลการทดลอง 2 คือ พลอตค่า Residuals 3 คือ พลอตค่าความเข้มข้น 5 คือ พิมพ์เคอร์ฟของการ ไทเทรต 6 คือ พิมพ์ตารางค่า Residuals ในหน่วย emf 7 คือ พิมพ์ตารางค่าความเข้มข้นในหน่วยโมลต่อลิตร 8 คือ พิมพ์ข้อมูลพิเศษของค่า chis-quare 9 คือ พิมพ์ตารางของความเข้มข้นรวมและความเข้มข้นอิสระ ถ้ากำหนด IPRIN เป็น 9 เครื่องจะทำงานให้ตั้งแต่ที่ 1-9
	11-15	INT	No. of Reactant (จำนวนสารตั้งต้นทั้งหมดในระบบ)
	16-20	INT	Det Reaction (การเลือกความสำคัญของข้อมูล) 0 คือ ความสำคัญขึ้นอยู่กับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง 1 คือ ข้อมูลทุกตัวสำคัญเท่ากันหมด
3	1 - 12	String [12]	No. of Reactants (ชื่อของสารตั้งต้นแต่ละตัว)
4	1 - 10	Float - 10.6	Working Temp. (อุณหภูมิที่ทำการทดลอง)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจองเนื้อที่	ความหมาย
	11 - 15	Float - 10.6	Under Voltage Range
	16 -20	Float - 10.6	Lower Voltage Range
5	1 - 10	Float - 10.6	ค่าลอการิทึมฐาน 10 ของค่าคงตัวเสถียรภาพ
	11 - 15	INT	Coefficient-ตัวเลขที่แสดงถึงสัมประสิทธิ์
	16 - 20	INT	ปริมาณสัมพันธ์ของแต่ละสปีชีส์ที่เกิดขึ้น
	21 - 25	INT	
	26 - 30	INT	Running Key (RK) โดยที่ -1 คือ ไม่ต้องสนใจค่า log K ในการทดลอง 0 คือ ให้ค่า log K นั้นคงที่ตลอด 1 คือ ให้คำนวณค่า log K นั้นใหม่
6			เว้น 1 บรรทัด เพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลเกี่ยวกับค่าคงที่การรวมตัว
7	3	INT	Control No. ตัวเลขควบคุมการพิมพ์สำหรับการพล็อตการกระจายของแต่ละสปีชีส์ 0 คือ ไม่ต้องพล็อต 1 คือ พล็อตค่าอัตราส่วนระหว่างความเข้มข้นของสปีชีส์นี้กับความเข้มข้นรวมสำหรับความเข้มข้นอิสระจะปรากฏในรูป (*)
	5	INT	Reactant Index (RI) ดัชนีของสารตั้งต้นจากข้อมูลที่ให้ไว้ในรายการที่ 3 เช่น 1. สำหรับสารตั้งต้นตัวแรก 2. สำหรับสารตั้งต้นตัวที่สอง ฯลฯ
	6 - 15	Float - 10.6	TMMOL ปริมาณรวมเป็นมิลลิโมลของสารตั้งต้นแต่ละตัวในขวดก้นกลมตอนเริ่มต้นการไทเทรตสำหรับโปรแกรม SUPERQUAD หรือความเข้มข้นของสารตั้งต้นในขวดก้นกลมตอนเริ่มต้นการไทเทรต

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจองเนื้อที่	ความหมาย
			สำหรับโปรแกรม ELE
	16 - 25	Float - 10.6	ความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่อยู่ในบิวเรต (Molar)
	26 - 30	INT	Running Key of TMMOL
	31 - 35	INT	Running Key of CONC.
8			เว้นหนึ่งบรรทัดเพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลเกี่ยวกับสารตั้งต้น
9	1 - 5	INT	Control No.
	6 - 15	Float - 10.6	Initial Volume ปริมาตรของสารในขวดก้นกลมตอนเริ่มต้นของการไทเทรตแต่ละครั้ง
	16 - 25	Float - 10.6	Error in Reading Volume of Burette คือค่าที่ผิดพลาดในการอ่านปริมาณสารในบิวเรต
10	1	INT	Control No. ชนิดของอิเลคโทรด 0 คือ ค่าอ่านเป็น mV 1 คือ ค่าอ่านเป็น pH
	3	INT	Control No. จำนวนอิเลคตรอนที่ถูกถ่ายในระบบ ซึ่งขึ้นอยู่กับอิเลคโทรดที่ใช้ 0 คือ มีการถ่ายอิเลคตรอน 1 อิเลคตรอน
	5	INT	Reactant Index ดัชนีของสารตั้งต้นที่มีผลต่ออิเลคโทรด ในที่นี้คือ โปรตอน
	6 - 15	Float - 10.6	E° ค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของอิเลคโทรดที่ใช้ (mV)
	16 - 25	Float - 10.6	Error in Millivolt ค่าผิดพลาดในการอ่านค่า (mV)
	26 - 30	INT	Running Key ในการควบคุมค่า E°
	31 - 40	Float - 10.6	Slope Factor ค่าที่ต้องนำไปคูณกับความชันของ Nerstain เพื่อหาค่าความชันในการทดลอง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจองเนื้อที่	ความหมาย
11			เว้นหนึ่งบรรทัด เพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลเกี่ยวกับอิเลคโทรด
12	1	INT	Running Key of Point ตัวเลขที่ใช้ควบคุมในการนำข้อมูลไปคำนวณ 0 คือ ให้นำค่าข้อมูลที่จุดนั้นไปคำนวณ 1 (หรือจำนวนเต็มบวก) คือ ไม่นำข้อมูลที่จุดนั้นไปทำการคำนวณ
	1 - 10	Float - 10.4	Titrant Volume ปริมาตรของไทแทรนต์ที่ใช้ในการไทเทรตแต่ละจุด (ml)
	11 - 20	Float - 10.4	Reading Voltage ค่า mV หรือ pH ที่อ่านได้จากอิเลคโทรดในการไทเทรตแต่ละจุด
13			เว้นหนึ่งบรรทัด เพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลสำหรับการไทเทรตแต่ละครั้ง
14			ข้อมูลการไทเทรตครั้งต่อไป (ทำซ้ำตั้งแต่รายการที่ 7 - 13) หรือเว้นบรรทัดเพื่อแสดงจุดสิ้นสุดการใส่ข้อมูลในการคำนวณโดยใช้โปรแกรม SUPERQUAD

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ซ

ตัวอย่างอินพุทของโปรแกรม ELE ที่ได้จากการคำนวณโดยโปรแกรม DCO ในการแคลิเบรทอิเลคโทรด

```
e05a9801   ecal____.001
  99   2   1   3
proton
 37.00  400.00 -400.00      .002
-13.25     -1   0

 1 1   .25000   -.25000   0   1

  0  12.50000   2.50000
0 0 0 450.00000    .10000    1    .000

0     .0000  391.8764          1
0     .0010  392.3185          2
0     .0165  392.5211          3
0     .2165  391.5448          4
0     .4165  389.5922          5
0     .6165  387.4738          6
0     .8165  384.8028          7
0    1.0165  379.2213          8
0    1.2165  376.5687          9
0    1.4165  372.8108         10
0    1.6165  367.7819         11
0    1.8165  361.0214         12
0    2.0165  349.3610         13
0    2.2165  340.8322         14
0    2.4165  315.3745         15
0    2.4828  291.2063         16
0    2.5099  272.8960         17
0    2.5130  250.9752         18
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	2.5140	239.1490	19
0	2.5150	231.4859	20
0	2.5160	226.0149	21
0	2.5170	221.0597	22
0	2.5180	216.3808	23
0	2.5190	212.4571	24
0	2.5200	208.9387	25
0	2.5210	205.8993	26
0	2.5220	202.7862	27
0	2.5230	199.8941	28
0	2.5240	196.9283	29
0	2.5250	193.8336	30
0	2.5260	190.3705	31
0	2.5270	187.0179	32
0	2.5280	183.6837	33
0	2.5290	180.6259	34
0	2.5300	177.2364	35
0	2.5310	174.2154	36
0	2.5320	171.6917	37
0	2.5330	169.0575	38
0	2.5340	166.2944	39
0	2.5350	163.4576	40
0	2.5360	160.9524	41
0	2.5370	161.3576	42
0	2.5380	155.9603	43
0	2.5397	152.3498	44
0	2.5407	150.1946	45
0	2.5417	146.2341	46
0	2.5427	143.0841	47
0	2.5437	139.6947	48
0	2.5447	136.8763	49
0	2.5457	133.3395	50
0	2.5467	129.3421	51
0	2.5477	125.3632	52

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	2.5487	121.0896	53
0	2.5497	116.8528	54
0	2.5507	112.4502	55
0	2.5517	107.6424	56
0	2.5527	102.9082	57
0	2.5537	97.6214	58
0	2.5547	92.3715	59
0	2.5557	87.0110	60
0	2.5567	81.6321	61
0	2.5577	76.2532	62
0	2.5587	70.6533	63
0	2.5597	65.1823	64
0	2.5607	59.3428	65
0	2.5617	53.5034	66
0	2.5627	47.0193	67
0	2.5637	40.9220	68
0	2.5647	35.1010	69
0	2.5657	29.4642	70
0	2.5667	23.5879	71
0	2.5677	17.9880	72
0	2.5687	12.4801	73
0	2.5697	7.3039	74
0	2.5707	2.1645	75
0	2.5717	-2.6987	76
0	2.5727	-7.5986	77
0	2.5737	-12.0933	78
0	2.5747	-16.7169	79
0	2.5757	-20.9722	80
0	2.5767	-24.8958	81
0	2.5777	-28.7273	82
0	2.5787	-31.9878	83
0	2.5797	-35.2299	84
0	2.5807	-38.0299	85
0	2.5817	-41.1799	86

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	2.5827	-43.8693	87
0	2.5837	-46.5219	88
0	2.5847	-49.5245	89
0	2.5857	-51.5692	90
0	2.5867	-53.7613	91
0	2.5877	-55.5113	92
0	2.5888	-57.4455	93
0	2.5902	-59.4349	94
0	2.5920	-61.2770	95
0	2.5948	-62.8244	96
0	2.6003	-65.3480	97
0	2.6124	-68.5901	98
0	2.6364	-77.4137	99
0	2.6510	-88.8531	100
0	2.6551	-99.6661	101
0	2.6561	-104.7871	102
0	2.6571	-108.2502	103
0	2.6581	-110.4055	104
0	2.6591	-112.1371	105
0	2.6603	-113.2423	106
0	2.6627	-114.3107	107
0	2.6744	-115.9133	108
0	2.7419	-141.4262	109
0	2.7569	-152.1103	110
0	2.7606	-155.2603	111
0	2.7645	-156.8998	112
0	2.7695	-159.2576	113
0	2.7820	-161.5971	114
0	2.8213	-167.0128	115
0	2.8970	-179.6495	116
0	2.9411	-184.9732	117
0	3.0000	-196.7810	118
0	3.0297	-197.0204	119
0	3.2297	-206.9124	120

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	3.4297 -214.7966	121
0	3.6297 -220.4518	122
0	3.8297 -226.4017	123
0	4.0297 -229.9569	124
0	4.2297 -232.2596	125
0	4.4297 -235.1148	126
0	4.6297 -237.2148	127
0	4.8297 -239.1858	128
0	5.0297 -242.9252	129

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ฌ

ตัวอย่างเอาท์พุทของโปรแกรม ELE ในการแคลิเบรทอิเลคโทรด

ELECTRODE FITTING PROGRAME

V. 2.0, WINTER 1994

DEPT. OF INDUSTRIAL CHEMISTRY

WRITTEN BY DR. P. DOUNGDEE

KMIT LADKRABANG, BANGKOK 10520

CONVERGENCE SATISFY AFTER 10 LOOPS

PARAMETERS CHANGE NOT MORE THAN .10 %

FINAL VALUES OF THE PARAMETERS :

CHI-SQR = 7094.97081

PARAMETERS AND STANDARD DEV

PARAMETERS 454.24 -.24361

DEVIATION .16583E-05 .15086E-10

% DEVIATION .36507E-06 -.61928E-08

DEPENDENCIES -.19844E+14 -.19844E+14

CORRELATION COEFFICIENTS :

A 1 1.0000

A 2 -.15690E-13 1.0000

DEGREES OF FREEDOM = 127

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

FINAL LAMBDA = .20000E+13

POINTS	EXP. MV	CAL. MV	RESIDUAL	PH
1	391.88	374.18	17.697	1.0134
2	392.32	374.17	18.151	1.0063
3	392.52	373.97	18.549	1.0030
4	391.54	371.36	20.180	1.0188
5	389.59	368.57	21.023	1.0506
6	387.47	365.55	21.926	1.0850
7	384.80	362.25	22.552	1.1284
8	379.22	358.61	20.614	1.2191
9	376.57	354.52	22.049	1.2622
10	372.81	349.84	22.966	1.3233
11	367.78	344.35	23.429	1.4050
12	361.02	337.65	23.368	1.5149
13	349.36	328.98	20.379	1.7043
14	340.83	316.51	24.320	1.8429
15	315.37	293.42	21.959	2.2566
16	291.21	277.58	13.627	2.6494
17	272.90	266.94	5.9592	2.9469
18	250.98	265.40	-14.426	3.3032
19	239.15	264.89	-25.737	3.4953
20	231.49	264.36	-32.876	3.6199
21	226.01	263.83	-37.812	3.7088
22	221.06	263.28	-42.221	3.7893
23	216.38	262.72	-46.342	3.8653
24	212.46	262.15	-49.697	3.9291
25	208.94	261.57	-52.634	3.9863
26	205.90	260.98	-55.079	4.0357
27	202.79	260.37	-57.584	4.0863
28	199.89	259.75	-59.855	4.1333
29	196.93	259.11	-62.184	4.1814
30	193.83	258.46	-64.627	4.2317

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

31	190.37	257.79	-67.422	4.2880
32	187.02	257.11	-70.089	4.3425
33	183.68	256.40	-72.720	4.3967
34	180.63	255.68	-75.056	4.4464
35	177.24	254.94	-77.704	4.5015
36	174.22	254.18	-79.961	4.5505
37	171.69	253.39	-81.700	4.5916
38	169.06	252.58	-83.525	4.6344
39	166.29	251.75	-85.454	4.6793
40	163.46	250.89	-87.430	4.7254
41	160.95	250.00	-89.045	4.7661
42	161.36	249.08	-87.720	4.7595
43	155.96	248.12	-92.165	4.8472
44	152.35	246.42	-94.074	4.9059
45	150.19	245.37	-95.175	4.9409
46	146.23	244.27	-98.039	5.0053
47	143.08	243.13	-100.04	5.0564
48	139.69	241.93	-102.24	5.1115
49	136.88	240.68	-103.81	5.1573
50	133.34	239.37	-106.03	5.2148
51	129.34	237.99	-108.65	5.2798
52	125.36	236.54	-111.18	5.3444
53	121.09	235.00	-113.91	5.4139
54	116.85	233.37	-116.52	5.4827
55	112.45	231.63	-119.18	5.5543
56	107.64	229.78	-122.13	5.6324
57	102.91	227.78	-124.87	5.7093
58	97.621	225.62	-128.00	5.7952
59	92.372	223.28	-130.91	5.8805
60	87.011	220.71	-133.69	5.9677
61	81.632	217.86	-136.23	6.0551
62	76.253	214.68	-138.42	6.1425
63	70.653	211.06	-140.41	6.2335
64	65.182	206.88	-141.70	6.3224

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

65	59.343	201.92	-142.58	6.4173
66	53.503	195.83	-142.32	6.5122
67	47.019	187.93	-140.91	6.6175
68	40.922	176.66	-135.74	6.7166
69	35.101	156.80	-121.70	6.8112
70	29.464	-.91490	30.379	6.9028
71	23.588	-68.499	92.086	6.9983
72	17.988	-85.934	103.92	7.0893
73	12.480	-96.396	108.88	7.1788
74	7.3039	-103.89	111.20	7.2629
75	2.1645	-109.74	111.91	7.3465
76	-2.6987	-114.54	111.84	7.4255
77	-7.5986	-118.60	111.00	7.5051
78	-12.093	-122.13	110.03	7.5782
79	-16.717	-125.24	108.52	7.6533
80	-20.972	-128.03	107.06	7.7224
81	-24.896	-130.55	105.66	7.7862
82	-28.727	-132.86	104.13	7.8485
83	-31.988	-134.98	102.99	7.9014
84	-35.230	-136.95	101.72	7.9541
85	-38.030	-138.78	100.75	7.9996
86	-41.180	-140.49	99.313	8.0508
87	-43.869	-142.10	98.234	8.0945
88	-46.522	-143.62	97.099	8.1376
89	-49.525	-145.06	95.533	8.1864
90	-51.569	-146.42	94.851	8.2197
91	-53.761	-147.72	93.956	8.2553
92	-55.511	-148.95	93.442	8.2837
93	-57.446	-150.25	92.805	8.3151
94	-59.435	-151.81	92.380	8.3475
95	-61.277	-153.70	92.423	8.3774
96	-62.824	-156.39	93.566	8.4026
97	-65.348	-160.99	95.646	8.4436
98	-68.590	-168.97	100.38	8.4963

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

99	-77.414	-179.99	102.58	8.6396
100	-88.853	-184.98	96.127	8.8255
101	-99.666	-186.23	86.560	9.0013
102	-104.79	-186.52	81.734	9.0845
103	-108.25	-186.81	78.563	9.1407
104	-110.41	-187.10	76.696	9.1758
105	-112.14	-187.39	75.250	9.2039
106	-113.24	-187.73	74.484	9.2219
107	-114.31	-188.39	74.080	9.2392
108	-115.91	-191.41	75.498	9.2653
109	-141.43	-204.19	62.767	9.6799
110	-152.11	-206.35	54.239	9.8535
111	-155.26	-206.86	51.595	9.9047
112	-156.90	-207.38	50.478	9.9313
113	-159.26	-208.03	48.775	9.9696
114	-161.60	-209.60	48.004	10.008
115	-167.01	-213.99	46.979	10.096
116	-179.65	-220.79	41.141	10.301
117	-184.97	-224.05	39.080	10.388
118	-196.78	-227.85	31.065	10.579
119	-197.02	-229.56	32.542	10.583
120	-206.91	-238.80	31.885	10.744
121	-214.80	-245.49	30.698	10.872
122	-220.45	-250.73	30.274	10.964
123	-226.40	-255.00	28.597	11.061
124	-229.96	-258.60	28.642	11.119
125	-232.26	-261.70	29.440	11.156
126	-235.11	-264.42	29.301	11.202
127	-237.21	-266.83	29.610	11.236
128	-239.19	-268.99	29.801	11.269
129	-242.93	-270.94	28.017	11.329

THE LAST RESULT OF CALCULATION

CONCENTRATION OF ACID = .25000 SETRUN = 0

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

CONCENTRATION OF BASE = -.24361 SETRUN = 1

FINAL VALUE OF EZER = 454.24058 SETRUN = 1

FINAL VALUE OF SLOP = 61.53664 SETRUN = 0

OR CORRECTED FACTER = 1.00000

FINAL VALUE OF WCON = -13.25000 SETRUN = 0

INITIAL VOLUME = 12.50000

WORKING TEMPERATURE = 37.00000

TOTAL NO. OF PARAMETERS WERE FITED = 2

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ญ

ตัวอย่างอินพุทสำหรับโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับการศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของ PIH

```
d21a9801   atob____.001
  99   5   2   3
ligand1
proton
 37.00  400.00 -400.00   9999.000
  3.65      1   1   1
 -7.59      1  -1   1
-13.25      0  -1   1

 1 1   .03000    .00000   0   0
 1 2   .50000   -.24361   0   0

  0  22.00000    .00200
0 0 2 454.24060  5.00000   1   1.000

0    .0000  408.6762                1
0    .0010  420.9630                2
0    .0031  412.5815                3
0    .0041  411.9920                4
0    .0106  414.4236                5
0    .0318  419.4340                6
0    .0789  416.0630                7
0    .1692  417.2419                8
0    .3692  410.5183                9
0    .5692  398.8947               10
0    .7594  396.0764               11
0    .9594  395.9843               12
0   1.1594  389.8869               13
0   1.3594  382.7028               14
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	1.5594	372.4240	15
0	1.7594	356.3425	16
0	1.8891	343.0427	17
0	1.9876	325.8928	18
0	2.0288	240.6595	19
0	2.0298	239.6095	20
0	2.0351	237.8226	21
0	2.0615	232.9227	22
0	2.1042	220.4333	23
0	2.1241	208.9572	24
0	2.1337	198.6046	25
0	2.1356	187.6995	26
0	2.1366	177.5496	27
0	2.1376	168.4681	28
0	2.1386	158.3734	29
0	2.1396	149.1077	30
0	2.1406	138.6447	31
0	2.1416	129.9869	32
0	2.1426	121.7527	33
0	2.1436	112.9844	34
0	2.1446	103.7187	35
0	2.1456	95.9635	36
0	2.1466	86.4399	37
0	2.1476	79.1269	38
0	2.1486	71.6111	39
0	2.1496	65.0901	40
0	2.1506	59.0297	41
0	2.1516	53.1350	42
0	2.1526	46.0614	43
0	2.1536	40.4246	44
0	2.1546	35.8378	45
0	2.1556	31.4168	46
0	2.1566	25.8537	47
0	2.1576	21.1748	48

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	2.1586	14.9117	49
0	2.1596	10.1407	50
0	2.1606	5.0934	51
0	2.1616	1.0224	52
0	2.1626	-3.4908	53
0	2.1636	-8.2249	54
0	2.1646	-11.9091	55
0	2.1656	-16.7722	56
0	2.1666	-19.9406	57
0	2.1676	-24.7300	58
0	2.1686	-28.1010	59
0	2.1696	-32.8352	60
0	2.1706	-35.6720	61
0	2.1716	-39.6509	62
0	2.1726	-42.9667	63
0	2.1736	-45.5640	64
0	2.1746	-49.2298	65
0	2.1756	-51.9745	66
0	2.1766	-54.3692	67
0	2.1778	-57.8139	68
0	2.1788	-60.5770	69
0	2.1798	-62.3086	70
0	2.1811	-65.6059	71
0	2.1821	-68.6454	72
0	2.1831	-71.1322	73
0	2.1841	-73.5822	74
0	2.1853	-77.1374	75
0	2.1863	-80.7479	76
0	2.1873	-83.0689	77
0	2.1883	-86.1820	78
0	2.1893	-87.5452	79
0	2.1917	-90.2899	80
0	2.1942	-93.1820	81
0	2.1962	-95.9267	82

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	2.1990	-97.5109	83
0	2.2028	-99.6109	84
0	2.2155	-104.0871	85
0	2.2299	-108.3792	86
0	2.2490	-111.6213	87
0	2.2785	-118.1607	88
0	2.3143	-116.9081	89
0	2.5143	-154.2840	90
0	2.5612	-172.2628	91
0	2.5731	-186.2074	92
0	2.5750	-193.2810	93
0	2.5760	-203.0993	94
0	2.5770	-210.4124	95
0	2.5780	-216.6755	96
0	2.5790	-216.6755	97
0	2.5802	-221.0965	98
0	2.5812	-227.1570	99
0	2.5822	-232.5911	100
0	2.5832	-235.6490	101
0	2.5842	-237.9884	102
0	2.5852	-240.0516	103
0	2.5862	-243.4226	104
0	2.5872	-246.0199	105
0	2.5882	-246.4436	106
0	2.5902	-250.1462	107
0	2.5917	-252.5594	108
0	2.5927	-255.2672	109
0	2.5940	-256.6119	110
0	2.5957	-258.4909	111
0	2.5972	-260.0014	112
0	2.5989	-259.3935	113
0	2.6026	-260.3882	114
0	2.6212	-264.4224	115
0	2.6440	-264.1277	116

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

0	2.8440	-272.5276	117
0	3.0440	-287.8353	118
0	3.1927	-286.4906	119
0	3.3927	-292.7169	120
0	3.5927	-294.7063	121
0	3.7927	-299.5878	122
0	3.9927	-303.9720	123
0	4.1927	-301.8536	124

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ฐ

ตัวอย่างเอาท์พุทของโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับการศึกษาค่าคงที่โปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของ PIH

```
                SUPERQUAD PROGRAM
            V 2.0 Winter 1994 adopt from V 1984A
              by Dr. P. Doungdee KMITL
d21a9801   atob____.001

 MAXIT  IPRIN  MODE   TOL     ACCM       RELAC
 99     3      3     .10E-03  .10E-74   .298023E-07

 REACTANT 1- ligand1
 REACTANT 2- proton

THE TEMPERATURE OF SOLUTION(S) IS 37.00 DEGREES CENTIGRADE

THE TITRATIONS ARE IN RANGE  400.0 TO -400.0 ( IN MV )

THE SD-LIMITS =   9999.00

      FORMATION     LOG    REFINEMENT   STOICHIOMETRIC
      CONSTANTS     BETAS    KEYS       COEFFICIENTS

 A   4.4668E 3   3.6500     1        1  1
 B    .2570E -7  -7.5900     1        1 -1
 C    .5623E-13 -13.2500     1        0 -1

3 FORMATION CONSTANTS TO BE REFINED
SLOPE =   61.53891

1 SPECIAL PARAMETERS TO BE REFINED

                CURVE   VALUE
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

EZERO proton 1 4.5424E+02

d21a9801 atob____.001

5 ITERATIONS

REFINEMENT TERMINATED SUCCESSFULLY

CHI-SQUARED = 24.90

CHI SQUARED SHOULD BE LESS THAN 12.60 AT THE 95 PERCENT CONFIDENCE LEVEL

SIGMA = 9.0701

	VALUE	REL STD DEV	LOG BETA STD DEVIATION		
BETA A REFINED	3.38736E 3	1.5098	3.52986	EXCESSIVE	1 1
BETA B REFINED	1.81760E -7	.6856	-6.74050	.50253	1 -1
BETA C REFINED	4.70708E-15	.6739	-14.32725	.48661	0 -1

	CURVE	INITIAL VALUE	FINAL VALUE	STD DEV
EZERO	proton 1	454.24060	520.11311	16.99043

CORRELATION MATRIX - PARAMETERS ORDERED AS ABOVE

	1	2	3
2	-.58		
3	-.60	.87	
4	.63	-.93	-.94

REFINEMENT CONTINUES WITH WEIGHTS OBTAINED FROM THE CALCULATED TITRATION CURVES

d21a9801 atob____.001

3 ITERATIONS

REFINEMENT TERMINATED SUCCESSFULLY

CHI-SQUARED = 16.55

CHI SQUARED SHOULD BE LESS THAN 12.60 AT THE 95 PERCENT CONFIDENCE LEVEL

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

SIGMA = 7.7027

	VALUE	REL STD DEV	LOG BETA STD DEVIATION		
BETA A REFINED	3.12061E 3	1.4248	3.49424	EXCESSIVE	1 1
BETA B REFINED	3.30647E -7	.6078	-6.48063	.40652	1 -1
BETA C REFINED	3.79749E-15	.5808	-14.42050	.37759	0 -1

	CURVE	INITIAL VALUE	FINAL VALUE	STD DEV
EZERO	proton 1	520.11311	519.95838	14.49216

CORRELATION MATRIX - PARAMETERS ORDERED AS ABOVE

	1	2	3
2	-.53		
3	-.56	.83	
4	.60	-.89	-.93

RESIDUALS PLOTS - UNITS OF SD 7.7027

```
 -3       -2       -1        0        1        2        3

++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
+++++
 1 +      +        +      2 +        +        +        +
 2 +      +        +      2 +        +        +        +
 3 +      +        +      2+         +        +        +
 4 +      +        +      2          +        +        +
 5 +      +        +      2          +        +        +
 6 +      +        +      2          +        +        +
 7 +      +        +      +2         +        +        +
 8 +      +        +      + 2       +        +        +
 9 +      +        +      +        2+        +        +
10 +      +        +    2 +         +        +        +
11 +      +        +    2 +         +        +        +
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

12 + + + 2 + + + +
13 + + + + 2+ + +
14 + + + + + + 2 +
15 + + + + + + 2 +
16 + + + + + + 2 +
17 + + + + + +2 +
18 + + + + + 2 + +
19 + + + + + 2 + +
20 + + + + + 2 + +
21 + + + + + 2 + +
22 + + + + 2 + +
23 + + + + 2 + + +
24 + + + + 2 + + +
25 + + + + 2 + + +
26 + + + + 2 + + +
27 + + + +2 + + +
28 + + + 2+ + + +
29 + + + 2 + + + +
30 + + + 2 + + + +
31 + + + 2 + + + +
32 + + + 2 + + + +
33 + + + 2 + + + +
34 + + + 2 + + + +
35 + + + 2 + + + +
36 + + + 2 + + + +
37 + + +2 + + + +
38 + + 2 + + + +
39 + + 2+ + + + +
40 + + 2+ + + + +
41 + + 2 + + + + +
42 + + 2 + + + + +
43 + + 2 + + + + +
44 + + 2 + + + + +
45 + + 2 + + + + +
46 + + 2 + + + + +

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

47 + + 2 + + + + +
48 + + 2+ + + + +
49 + + 2 + + + +
50 + + +2 + + + +
51 + + + 2 + + + +
52 + + + 2 + + + +
53 + + + 2 + + + +
54 + + + 2 + + + +
55 + + + 2 + + + +
56 + + + 2 + + + +
57 + + + 2+ + + +
58 + + + 2 + + +
59 + + + + 2 + + +
60 + + + + 2 + + +
61 + + + + 2 + + +
62 + + + + 2 + + +
63 + + + + 2 + + +
64 + + + + 2 + + +
65 + + + + 2 + + +
66 + + + + 2 + + +
67 + + + + 2 + + +
68 + + + + 2 + + +
69 + + + + 2 + + +
70 + + + + 2 + + +
71 + + + + 2+ + +
72 + + + + 2 + +
73 + + + + 2 + +
74 + + + + +2 + +
75 + + + + + 2 + +
76 + + + + + 2 + +
77 + + + + + 2 + +
78 + + + + + 2 + +
79 + + + + + 2 + +
80 + + + + + 2+ +
81 + + + + + 2 + +

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

82 + + + + + 2 + +
83 + + + + 2 + + +
84 + + + + 2 + + +
85 + + + + 2 + + +
86 + + + + 2 + + +
87 + + + +2 + + +
88 + + + +2 + + +
89 + + + 2 + + +
90 + + + 2 + + + +
91 + + + 2 + + + +
92 + + + 2 + + + +
93 + + + 2 + + + +
94 + + + 2 + + + +
95 + + + 2 + + + +
96 + + + 2 + + + +
97 + + + 2 + + + +
98 + + + 2 + + + +
99 + + + 2 + + + +
100 + + + 2 + + + +
101 + + + 2 + + + +
102 + + +2 + + + +
103 + + +2 + + + +
104 + + +2 + + + +
105 + + +2 + + + +
106 + + 2 + + + +
107 + + 2 + + + +
108 + + +2 + + + +
109 + + 2 + + + + +
110 + + 2 + + + +
111 + + 2+ + + + +
112 + + 2 + + + +
113 + + 2+ + + + +
114 + + 2+ + + + +
115 + + 2 + + + +

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

++
+++++

d21a9801 atob____.001

CURVE 1

PERCENT FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF ligand1

```
  0                   50                  100
  +    +    +    +    +    +    +    +    +    +    +
```

++
+++

```
 .9 +*                                  A+
 .9 + *                                 A +
 .9 + *                                 A +
1.0 + *                                 A +
1.2 +  *                                A +
1.3 +  *                                A +
1.6 +     *                             A +
1.8 +        *                          A +
2.1 +           A                *      +
3.5 +     A                        *     +
3.5 +     A                        *     +
3.5 +    A                         *     +
3.6 +A   B                               *  +
3.8 +            B       *                 +
4.0 +            *       B                 +
4.2 +          *             B            +
4.3 +          *             B            +
4.5 +          *             B            +
4.6 +          *             B            +
4.8 +          *             B            +
5.0 +          *             B            +
5.1 +          *             B            +
5.3 +          *             B            +
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

5.4 + * B +
5.5 + * B +
5.7 + * B +
5.8 + * B +
6.0 + * B +
6.1 + * B +
6.2 + * B +
6.3 + * B +
6.4 + * B +
6.5 + * B +
6.6 + * B +
6.7 + * B +
6.8 + * B +
6.9 + * B +
7.0 + * B +
7.0 + * B +
7.1 + * B +
7.2 + * B +
7.3 + * B +
7.4 + * B +
7.4 + * B +
7.5 + * B +
7.6 + * B +
7.7 + * B +
7.7 + * B +
7.8 + * B +
7.8 + * B +
7.9 + * B +
8.0 + * B +
8.0 + * B +
8.1 + * B +
8.1 +* B+
8.2 +* B+
8.2 + B
8.3 + B

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

8.3 +	B
8.4 +	B
8.4 +	B
8.4 +	B
8.5 +	B
8.5 +	B
8.6 +	B
8.6 +	B
8.7 +	B
8.7 +	B
8.8 +	B
8.8 +	B
8.8 +	B
8.9 +	B
8.9 +	B
9.0 +	B
9.0 +	B
9.1 +	B
9.1 +	B
9.2 +	B
9.3 +	B
9.3 +	B
9.9 +	B
10.2 +	B
10.4 +	B
10.5 +	B
10.7 +	B
10.8 +	B
10.9 +	B
10.9 +	B
11.0 +	B
11.1 +	B
11.2 +	B
11.2 +	B
11.2 +	B

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```
11.3 +                                    B
11.3 +                                    B
11.4 +                                    B
11.4 +                                    B
11.4 +                                    B
11.5 +                                    B
11.5 +                                    B
11.6 +                                    B
11.6 +                                    B
11.6 +                                    B
11.6 +                                    B
11.6 +                                    B
11.7 +                                    B
11.7 +                                    B
11.8 +                                    B
12.1 +                                    B
12.0 +                                    B
12.1 +                                    B
12.2 +                                    B
12.2 +                                    B
12.3 +                                    B
12.3 +                                    B
d21a9801    atob____.001
CURVE  1
PERCENT FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF proton

  0                 50                 100
  +    +    +    +    +    +    +    +    +    +    +

+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
+++
 .9 +    A                              *    +
 .9 +     A                             *    +
 .9 +      A                           *     +
1.0 +       A                          *      +
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```
1.2 +      A                       *       +
1.3 +        A                     *       +
1.6 +           A                  *       +
1.8 +              *  A                     +
2.1 +           *                  A       +
3.5 +           *                     A    +
3.5 +           *                     A    +
3.5 +           *                        A +
3.6 +                                       B
3.8 +                                       B
4.0 +                                       B
4.2 +                                       B
4.3 +                                       B
4.5 +                                       B
4.6 +                                       B
4.8 +                                       B
5.0 +                                       B
5.1 +                                       B
5.3 +                                       B
5.4 +                                       B
5.5 +                                       B
5.7 +                                       B
5.8 +                                       B
6.0 +                                       B
6.1 +                                       B
6.2 +                                       B
6.3 +                                       B
6.4 +                                       B
6.5 +                                       B
6.6 +                                       B
6.7 +                                       B
6.8 +                                       B
6.9 +                                       B
7.0 +                                       B
7.0 +                                       B
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

7.1 + B

7.2 + B

7.3 + B

7.4 + B

7.4 + B

7.5 + B

7.6 + B

7.7 + B

7.7 + B

7.8 + B

7.8 + B

7.9 + B

8.0 + B

8.0 + B

8.1 + B

8.1 + B

8.2 + B

8.2 + B

8.3 +C B+

8.3 +C B+

8.4 + C B +

8.4 + C B +

8.4 + C B +

8.5 + C B +

8.5 + C B +

8.6 + C B +

8.6 + C B +

8.7 + C B +

8.7 + C B +

8.8 + C B +

8.8 + C B +

8.8 + C B +

8.9 + C B +

8.9 + C B +

9.0 + C B +

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

9.0 + C B +
9.1 + C B +
9.1 + C B +
9.2 + C B +
9.3 + C B +
9.3 + B C +
9.9 + B C +
10.2 + B C +
10.4 + B C +
10.5 + B C +
10.7 + B C +
10.8 + B C +
10.9 + B C +
10.9 + B C +
11.0 + B C +
11.1 + B C +
11.2 + B C +
11.2 + B C +
11.2 + B C +
11.3 + B C +
11.3 + B C +
11.4 + B C +
11.4 + B C +
11.4 + B C +
11.5 + B C +
11.5 + B C +
11.6 + B C +
11.6 + B C +
11.6 + B C +
11.6 + B C +
11.6 + B C +
11.7 + B C +
11.7 + B C +
11.8 + B C +
12.1 + B C +

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

12.0 + B C +

12.1 + B C +

12.2 + B C +

12.2 + B C +

12.3 + B C +

12.3 + B C +

Stop - Program terminated.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เอกสารอ้างอิง

1. D.E. Metzler, C.M. Harris, R.J. Johnson, C.B. Siano, and J.A. Thomson, " Spectra of 3-Hydroxypyridines. Band-Shape Analysis and Evaluation of Tautomeric Equilibria ", Biochemistry, 12 (1973) : 5377-5391
2. Jose Manuel Sanchez-Ruiz, Juan Llor, and Manuel Cortijo, " Thermodynamic Constants for Tautomerism and Ionization of Pyridoxine and 3-Hydroxypyridine in Water-Dioxane ", J. Chem. Soc. Perkin Trans. II. , (1984) : 2047-2051
3. ธวัฒน์ชัย เกษสุรินทร์ชัย และ อมร พรหมเกสัชสกุล , " การศึกษาค่าคงที่ทางอุณหพลศาสตร์สำหรับไอออไนเซชันของไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน " วิทยานิพนธ์ระดับปริญญาตรี , ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง , ปีการศึกษา 2537
4. กิติกร ปัญญาเทียม และ ศศิธร เอี่ยมธนะทศ , " สารประกอบเชิงซ้อนระหว่างโลหะยูรานิลและไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน " วิทยานิพนธ์ระดับปริญญาตรี , ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง , ปีการศึกษา 2537
5. บุญเลิศ อึ้งพงษ์พานิช และ สุประภาดา โชติมณี, " สารประกอบเชิงซ้อนระหว่างโลหะ ทรานสิชันกับไพริดอกซัลไอโซนิโคติโนอิลไฮดราโซน " วิทยานิพนธ์ระดับปริญญาตรี, ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง, ปีการศึกษา 2538
6. Rahway, N.J. An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals , 11 th ed. , pp. 521, 1269-1270, U.S.A. , 1989
7. เพ็ญศรี ทองนพเนื้อ , " เคมีวิเคราะห์เชิงไฟฟ้า ", สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย , พ.ศ. 2539
8. ธวัชชัย ศรีวิบูลย์ , " เคมีวิเคราะห์ 2 ", พิมพ์ครั้งที่ 2 สำนักพิมพ์ฝ่ายตำราและอุปกรณ์การศึกษามหาวิทยาลัยรามคำแหง , พ.ศ. 2529

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้