



การเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ

1-[N-เมทิลพริดอกซิลดีเนียม]-2-[2'-N-เมทิลพริดีเนียม]ไฮดรารีน
กับไอออนของโลหะทรานซิชัน

นายกานต์

วัชรกิตพงษ์

2/พ.ค.

นายธีรวัฑ

เชษฐารกุล

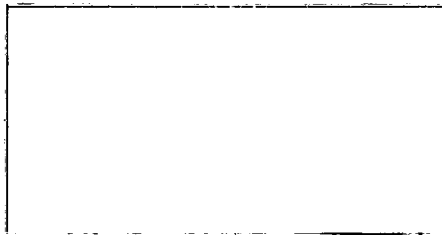
ก4๒2๗

เลขหมู่ 2536

612524904

เลขทะเบียน

วันเดือนปี



โครงการพิเศษนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต

ภาควิชาเคมี

คณะวิทยาศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ปีการศึกษา 2536

THE COMPLEX FORMATION OF
1-[*N*-METHYLPYRIDOKYLIDENIUM]-2-[2'-*N*-METHYLPYRIDINIUM]HYDRAZINE
WITH TRANSITION METAL IONS

Mr. Kant Wacharakitiphong

Mr. Teeravuth Cheowtirakul

The 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

1993

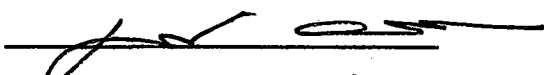
หัวข้อโครงการพิเศษ การเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ 1-[N-เมทิลนิริดอกซิลิดีนีแอม]
-2-[2'-N-เมทิลนิริดีเนียม]ไฮดรอกซีกับไอออนของโลหะทรานซิชัน

นักศึกษา นาย กานต์ วัชรเกียรติพงษ์
นาย กীরวุฒิ เชื้อวชิรกุล

ภาควิชา เคมี

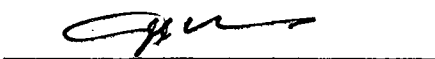
อาจารย์ที่ปรึกษา ผศ.ดร. ประสงค์ ดวงดี

ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
อนุมัติให้ทำโครงการพิเศษฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต

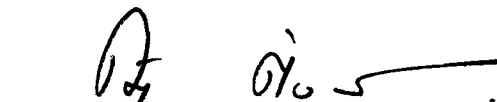

(ผศ. นงนุช เกตรานูวัฒน์)

หัวหน้าภาควิชาเคมี (รักษาการ)

คณะกรรมการตรวจสอบโครงการพิเศษ


(ผศ. อรุณี คงศักดิ์ไพศาล)

ประธานกรรมการ


(อาจารย์ ฉันทา ดั่งคณารักษ์)

กรรมการ

ลิขสิทธิ์ของภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

หัวข้อโครงการพิเศษ	การเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ 1-[N-เมทิลพิริดอกซิลิดีนีเอม] -2-[2'-N-เมทิลพิริดีนีนีเอม]ไฮดรารีนกับไอออนของโลหะทรานซิชัน	
นักศึกษา	นาย กานต์	วัชรเกียรติพงศ์
	นาย ชีรุต	เชียวชีรกุล
อาจารย์ที่ปรึกษา	พศ.ดร. ประสงค์	ดวงดี
ภาควิชา	เคมี	
ปีการศึกษา	2536	

บทคัดย่อ

โครงการพิเศษนี้ เป็นการศึกษาถึงการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนและการหาค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง 1-[N-เมทิลพิริดอกซิลิดีนีเอม]-2-[2'-N-เมทิลพิริดีนีนีเอม]ไฮดรารีน (SAG8) กับ ไอออนของโลหะซิงค์ (II) และ คอปเปอร์ (II) โดยใช้เทคนิคโพเทนชิออสเมตริกไทเทรชันทำการไทเทรตในช่วงพีเอชประมาณ 1.5-12 ที่อุณหภูมิ 37 องศาเซลเซียส ความแรงไอออน 0.5 Mโพแทสเซียมไนเตรต แล้วนำผลที่ได้ไปคำนวณหาค่าคงตัวเสถียรภาพโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ "SUPERQUAD" ทำให้ทราบถึงโครงสร้างโมเลกุลของสารเชิงซ้อนระหว่าง SAG8 กับ ซิงค์(II) และ คอปเปอร์(II) โดยสามารถเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนสปีชีส์ต่างๆ ได้แก่ LH_3^+ , LH^- , $[CuLH]^+$, $Cu(LH)OH$, $Cu(LH)_2$, $[ZnLH]^+$, $Zn(LH)OH$ (เมื่อ LH_2 คือ SAG8 ที่เป็นลิแกนด์อิสระ) ซึ่งค่าคงตัวเสถียรภาพ ($\log \beta$) เท่ากับ 2.56, -8.71, -2.83, -10.56, -6.43, -3.07 และ -10.57 ตามลำดับ โดยจะเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนกับโลหะได้ดีในสภาวะที่เป็นเบส

นอกจากนี้ผลจากการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง UV สเปกโตรโฟโตมิเตอร์ เพื่อยืนยันว่าที่พีเอชเป็นเบสนั้นจะเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง ซิงค์(II) กับ SAG8, คอปเปอร์(II) กับ SAG8 ขึ้น โดยเทียบกับค่าการดูดกลืนแสงเมื่อทำการวัด SAG8 กับโลหะทรานซิชันที่พีเอชเป็นกรด

Special Project Title The Complex Formation of 1-[*N*-methylpyri
doxylidinium]-2-[2'-*N*-methylpyridinium]
hydrazine with Transition Metal Ions

Name Mr. Kant Wacharakitiphong

 Mr. Teeravuth Cheowtirakul

Special Project Advisor Dr. Prayong Doungdee

Department Chemistry

Academic Year 1993

Abstract

The stability constants and the formation of complexes between copper(II) or zinc(II) and 1-[*N*-methylpyridoxylidenium]-2-[2'-*N*-methylpyridinium]hydrazine (SAG8) are determined by using potentiometric titration at 37 celcius with ionic strength (μ) = 0.5 M potassium nitrate. The experiments are carried out in the pH range from 1.5 to 12. Stability constants are calculated by using the computer program, "SUPERQUAD".

By using the "SUPERQUAD" program, the following complex species are founded under the experimental conditions: LH_3^+ , LH^- , $[CuLH]^+$, $Cu(LH)OH$, $Cu(LH)_2$, $[ZnLH]^+$, $Zn(LH)OH$ at the stability constant ($\log \beta$) of 2.56, -8.71, -2.83, -10.56, -6.43, -3.07 and -10.57, respectively (when $LH_2 =$ SAG8 free ligand). The complexes between copper(II) or zinc(II) and SAG8 are formed very well in basic condition.

In otherwise, the spectra of these complexes from UV spectrophotometer confirm that complexes are formed in basic condition.

กิตติกรรมประกาศ

ขอกราบขอบพระคุณ ดร. ประสงค์ ดวงดี อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการงานพิเศษที่กรุณา
ให้คำแนะนำ ให้ความรู้ ให้ความช่วยเหลือ ชี้แนะแนวทางและให้การสนับสนุนการดำเนินการ
จัดทำโครงการงานพิเศษนี้ด้วยดีมาตลอด

ขอกราบขอบพระคุณ ผศ. อรุณี คงศักดิ์ไพศาล ที่กรุณาเป็นกรรมการตรวจสอบโครง
งานพิเศษนี้

ขอกราบขอบพระคุณ อาจารย์ คณิตา ตั้งคณานุรักษ์ ที่กรุณาเป็นกรรมการตรวจสอบ
โครงการงานพิเศษนี้

ขอขอบพระคุณ เจ้าหน้าที่ห้องทดลองทุกท่านที่ได้ให้ความสะดวกในการจัดทำโครงการ
พิเศษนี้

ขอขอบคุณเพื่อนๆทุกท่านที่คอยให้กำลังใจ ให้คำแนะนำ และมีส่วนช่วยให้การดำเนิน
งานครั้งนี้สำเร็จไปด้วยดี

และขอกราบขอบพระคุณ คุณพ่อ คุณแม่ ที่กรุณาให้กำลังใจแก่ลูกในการทำโครงการงานพิเศษ
นี้

กานต์ วีระกิตติพงษ์
ธีรภูมิ เชี่ยวธีรกุล

สารบัญ

เรื่อง	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย	(ก)
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	(ข)
กิตติกรรมประกาศ	(ค)
สารบัญ	(ง)
สารบัญตาราง	(จ)
สารบัญรูป	(ฉ)
บทที่ 1 บทนำ	1
บทที่ 2 ทฤษฎี	2
- การเกิดสารประกอบเชิงซ้อน	2
- ปัจจัยที่มีผลต่อการเกิดลิแกนด์	3
- ผลของการเกิดลิแกนด์ในทางกายภาพ	3
- ค่าคงตัวของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน	4
- ผลของความแรงไอออนต่อค่าคงตัวการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน	6
- วิธีโพเทนชิอเมตริก	8
- ขั้วกลาสสำหรับวัดพีเอช	8
- ศักย์ไฟฟ้าของขั้ว	12
- โพเทนชิอเมตริกไทเทรชัน	15
- หลักการของโปรแกรม ELECTRODE CALIBRATION	15
- หลักการของโปรแกรม SUPERQUAD	17

เรื่อง	หน้า
บทที่ 3 การทดลอง	19
- สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง	19
- อุปกรณ์และเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง	20
- การเตรียมสารละลายที่ใช้ในการทดลอง	20
- วิธีการทดลอง	26
- การคำนวณ	30
- การจัดวางเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง	32
บทที่ 4 ผลการวิจัยและวิจารณ์	35
- การแคริเบรทอเล็กโทรด	35
- การศึกษาปฏิกิริยาโปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของ SAG8	36
- การไทเทรตระหว่าง SAG8กับซิงค์(II)	36
- การไทเทรตระหว่าง SAG8กับคอปเปอร์(II)	37
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัยและเสนอแนะ	74
ภาคผนวก	79
- ภาคผนวก ก รูปแบบของ DATA INPUT สำหรับโปรแกรม SUPER QUAD และโปรแกรม ELE.	80
- ภาคผนวก ข ตัวอย่างอินพุทของโปรแกรม ELE.	87
- ภาคผนวก ค ตัวอย่างเอาต์พุทของโปรแกรม ELE.	90
- ภาคผนวก ง ตัวอย่างอินพุทของโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับศึกษาค่าคงตัวเสถียรภาพของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง ซิงค์(II) กับ SAG8	93
- ภาคผนวก จ ตัวอย่างเอาต์พุทของโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับศึกษาค่าคงตัวเสถียรภาพของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง ซิงค์(II)กับSAG8	97
- ภาคผนวก ฉ ความหมายต่างๆ ที่ใช้ใน Sample Identification และ Comments	121
บรรณานุกรม	123

สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 4.1 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตเพื่อทำการแคริเบรทอเล็กโทรต.	41
ตารางที่ 4.2 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8 ด้วย NaOH	43
ตารางที่ 4.3 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8กับซิงค์(II)ปริมาตร 0.0196โมล ด้วย HNO_3	45
ตารางที่ 4.4 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8กับซิงค์(II)ปริมาตร 0.0294โมล ด้วย NaOH	47
ตารางที่ 4.5 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)ปริมาตร 0.0100โมล ด้วย NaOH	49
ตารางที่ 4.6 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)ปริมาตร 0.0300โมล ด้วย NaOH	51
ตารางที่ 4.7 แสดงค่าคงที่ของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน	38

สารบัญรูป

	หน้า
รูปที่ 2.1 ขั้วกลาสวัด pH	9
รูปที่ 2.2 Combination electrode	10
รูปที่ 4.1 กราฟการไทเทรต SAG8 ด้วย NaOH	53
รูปที่ 4.2 กราฟการไทเทรต SAG8กับซิงค์(II)ปริมาตร0.0196โมล ด้วย HNO ₃	54
รูปที่ 4.3 กราฟการไทเทรต SAG8กับซิงค์(II)ปริมาตร0.0294โมล ด้วย NaOH	55
รูปที่ 4.4 กราฟการไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)ปริมาตร0.0100โมล ด้วยNaOH	56
รูปที่ 4.5 กราฟการไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)ปริมาตร0.0300โมล ด้วยNaOH	57
รูปที่ 4.6 กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ เมื่อไทเทรต SAG8 ด้วย NaOH	58
รูปที่ 4.7 กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ ซิงค์(II) เมื่อไทเทรต SAG8 กับ ซิงค์(II)0.0196โมล ด้วย HNO ₃	59
รูปที่ 4.8 กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ SAG8 เมื่อไทเทรต SAG8 กับ ซิงค์(II)0.0196โมล ด้วย HNO ₃	60
รูปที่ 4.9 กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ ซิงค์(II) เมื่อไทเทรต SAG8 กับ ซิงค์(II)0.0294โมล ด้วย NaOH	61

รูปที่ 4.10	กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ SAG8 เมื่อไทเทรต SAG8 กับ ซิงค์(II)0.0294โมล ด้วย NaOH	62
รูปที่ 4.11	กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ คอปเปอร์(II) เมื่อไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)0.0100 โมลด้วย NaOH	63
รูปที่ 4.12	กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ SAG8 เมื่อไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)0.0100โมล ด้วย NaOH	64
รูปที่ 4.13	กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ คอปเปอร์(II) เมื่อไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)0.0300 โมลด้วย NaOH	65
รูปที่ 4.14	กราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ วัดที่ความเข้มข้นรวมของ SAG8 เมื่อไทเทรต SAG8กับคอปเปอร์(II)0.0300โมล ด้วย NaOH	66
รูปที่ 4.15	กราฟผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยวัด SAG8 ที่พีเอช 1.8	67
รูปที่ 4.16	กราฟผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยวัด SAG8 ที่พีเอช 5.7	68
รูปที่ 4.17	กราฟผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยวัด SAG8 ที่พีเอช 11.6	69
รูปที่ 4.18	กราฟผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยวัด SAG8กับซิงค์(II) ที่ พีเอช 1.6	70
รูปที่ 4.19	กราฟผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยวัด SAG8กับซิงค์(II) ที่ พีเอช 11.4	71
รูปที่ 4.20	กราฟผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยวัดSAG8กับคอปเปอร์(II) ที่พีเอช 1.9	72
รูปที่ 4.21	กราฟผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยวัดSAG8กับคอปเปอร์(II) ที่พีเอช 12.2	73

บทที่ 1
บทนำ

สารประกอบจำพวกฟิวโรนอลที่เป็นไลโปฟิลิกคีเลเตอร์ (Lipophilic Chelators) เป็นสารประกอบที่ชอบทำปฏิกิริยากับเหล็ก มีความปลอดภัยในทางอาชญากรรมและมีประสิทธิภาพในการกำจัดพิษของเหล็กที่สะสมอยู่ในปริมาณที่มากเกินไปเนื่องจากการถ่ายโลหิต สารประกอบจำพวกฟิวโรนอลที่ใช้ศึกษาในโครงการพิเศษนี้คือ 1-[N-เมทิลฟิวโรนอลซัลโฟเนต]-2-[2'-N-เมทิลฟิวโรนอลซัลโฟเนต]ไฮดรอกซี (SAG8) ซึ่งสังเคราะห์มาจาก SAG11 และวิตามิน B₆ เป็นลำดับ

โครงการพิเศษนี้เป็นการศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง SAG8 กับ ไอออนของคอปเปอร์(II)และซิงค์(II)โดย SAG8 จะทำหน้าที่เป็นลิแกนด์ โครงการพิเศษนี้มีวัตถุประสงค์ที่จะหาค่าคงตัวเสถียรภาพในการเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนสปีชีส์ต่าง ๆ โดยใช้เทคนิคโพเทนชิออสแตติกไทเทรชันในการหาค่าศักย์ไฟฟ้าที่เปลี่ยนไปของสารประกอบเชิงซ้อน เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงสภาพความเป็นกรด-เบสของสารละลายของสารประกอบเชิงซ้อนนั้นที่อุณหภูมิ 37 องศาเซลเซียส ความแรงไอออน 0.5 โมลาร์โพแทสเซียมไนเตรต

ข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตจะนำไปใส่ในโปรแกรม SUPERQUAD ซึ่งเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ภาษาฟอร์แทรนที่ได้รับการพัฒนาเพื่อใช้ในการศึกษาเกี่ยวกับสารประกอบเชิงซ้อนของโลหะ-ลิแกนด์โดยเฉพาะ ผลที่ได้จากโปรแกรมจะบ่งถึงค่าปริมาณสัมพันธ์ของสปีชีส์ที่สามารถเกิดขึ้นได้ พร้อมทั้งคำนวณค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนสปีชีส์เหล่านั้นด้วย นอกจากนี้ยังแสดงอัตราส่วนความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่พีเอชต่างๆในรูปแบบของกราฟเส้นทำให้ทราบแนวโน้มการเพิ่มขึ้นหรือลดลง รวมทั้งการกระจายของปริมาณสารประกอบเชิงซ้อนแต่ละสปีชีส์เมื่อค่าความเป็นกรด-เบสเปลี่ยนแปลงไป

บทที่ 2

ทฤษฎี

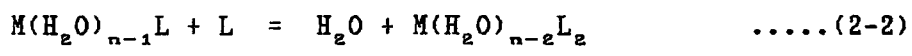
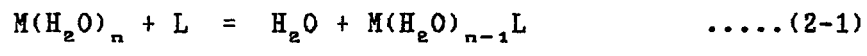
การเกิดสารประกอบเชิงซ้อน

สารประกอบเชิงซ้อน (Complex Compound) บางครั้งเรียกว่าสารประกอบโคออร์ดิเนชัน (Coordination Compound) ทั้งนี้เป็นเพราะว่าสารประกอบชนิดนี้เป็นสารประกอบที่เกิดจากพันธะโควาเลนต์ (Covalent Bond) โดยมีอะตอมของโลหะหรือแคทไอออนที่เรียกว่าอะตอมกลาง (Central Atom) รับคู่อิเล็กตรอน (Lone Pair Electron) จากแอนไอออนหรือโมเลกุลที่เป็นกลางที่เรียกว่า "ลิแกนด์" (Ligand) จำนวนพันธะที่เกิดขึ้นในสารประกอบเรียกว่า "โคออร์ดิเนชันนัมเบอร์" (Coordination number) ถ้าโลหะที่เป็นอะตอมกลางสามารถเกิดสารประกอบเชิงซ้อนได้ โดยรับคู่ของอิเล็กตรอนเพียง 2 คู่จากลิแกนด์ จะเรียกโลหะนั้นว่ามี 2 โคออร์ดิเนชันนัมเบอร์ ถ้าสามารถรับอิเล็กตรอนได้ 4 คู่ก็เรียกโลหะนั้นว่ามี 4 โคออร์ดิเนชันนัมเบอร์ โมเลกุลหรือไอออนที่ทำหน้าที่เป็นลิแกนด์จะต้องมีคู่อิเล็กตรอนอิสระ เช่น :NH_3 หรือเป็นอะตอมที่มีประจุเป็นลบ เช่น Cl^- ลิแกนด์บางตัวอาจมีอิเล็กตรอนคู่ได้มากกว่า 1 คู่ ดังนั้นสารประกอบเชิงซ้อนที่เกิดขึ้นจึงสามารถเป็นได้ทั้งประจุบวก ลบ หรือเป็นกลาง เช่น $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{COO})_2]$, $[\text{CuCl}_4]^{2-}$ ลิแกนด์ที่มีอิเล็กตรอน 1 คู่จะเรียกว่า "ยูนิเดนเทตลิแกนด์" (Unidentate Ligand) ลิแกนด์ที่มีอิเล็กตรอน 2 คู่เรียกว่า "ไบเดนเทตลิแกนด์" (Bidentate Ligand) ลิแกนด์ที่มีอิเล็กตรอนมากกว่า 1 คู่ จะเรียกโดยทั่วไปว่า "โพลีเดนเทตลิแกนด์" (Polydentate Ligand) ซึ่งลิแกนด์ชนิดนี้สามารถเกิดสารประกอบเชิงซ้อนกับโลหะแล้วให้สารประกอบเชิงซ้อนที่เป็นวง เรียกว่าสารประกอบเชิงซ้อนที่เรียกว่า "คีเลตคอมเพล็กซ์" (Chelate Complex) เช่น

ของไอออนโลหะมีค่าต่ำๆ การเกิดคีเลชันมักเปลี่ยนแปลงค่าศักย์ไฟฟ้าออกซิเดชันและรีดักชันของโลหะ และทำให้เกิดการจัดเรียงตัวของโครงสร้างทางเคมีใหม่ซึ่งจะมีผลต่อการเร่ง หรือหน่วงความว่องไวต่อปฏิกิริยาของเอนไซม์ ไอออนโลหะทำหน้าที่เป็นตัวเชื่อมโยงลิแกนด์ 2 ตัวหรือมากกว่าเข้าด้วยกันทำให้เกิดโมเลกุลขนาดใหญ่ และสามารถใช้ในการเกิดคีเลชันในการเพิ่มหรือลดอิเล็กตรอนของเอนไซม์ได้

ค่าคงตัวของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน (Complex Formation Constant) ⁽¹⁾

สารประกอบเชิงซ้อนทุกตัวมีโลหะที่สามารถรับคู่ของอิเล็กตรอนได้มากกว่า 1 คู่ ดังนั้นถ้าเป็นลิแกนด์ชนิดโมโนเดนเตตลิแกนด์ การเกิดสารประกอบเชิงซ้อนจะเกิดเป็นขั้น (stepwise) โดยปกติถ้ามีไอออนของโลหะละลายอยู่ในน้ำโลหะเหล่านั้นจะถูกไฮเดรตด้วยโมเลกุลของน้ำ ค่าคงตัวของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน พิจารณาจากปฏิกิริยาการแทนที่ของลิแกนด์ที่แรงกว่ากับน้ำ ดังแสดงในสมการที่ 2-1 และ 2-2 เมื่อ M คือไอออนของโลหะที่มีโคออร์ดิเนชันนัมเบอร์เท่ากับ n และ L คือลิแกนด์ที่แรงกว่าน้ำ



ปฏิกิริยาการแทนที่จะเกิดขึ้นเรื่อยๆจนกระทั่งเกิด ML_n เพื่อเป็นการสะดวกในการเขียนสมการ จึงไม่จำเป็นต้องเขียนโลหะในรูปของสารประกอบเชิงซ้อนที่เกิดกับโมเลกุลของน้ำ โลหะที่เกิดสารประกอบเชิงซ้อนอาจมีประจุเป็น +1 หรือ +2 หรือมากกว่าก็ได้และลิแกนด์อาจจะเป็นกลางหรือเป็นลบก็ได้ ดังนั้นในการเขียนสมการของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนจึงไม่เขียนจำนวนประจุลงไป สามารถเขียนขั้นตอนของการเกิดปฏิกิริยาและค่าคงตัวแทนปฏิกิริยาต่างๆไปได้ดังนี้

$$M + L = ML \quad ; \quad K_1 = \frac{[ML]}{[M][L]}$$



เรียกค่าคงตัวแบบนี้ว่า ค่าคงตัวของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนแบบขั้น (Stepwise Complex Formation Constant ; K)

ค่าคงตัวของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนสามารถแสดงถึงความอยู่ตัว (Stable) ของสารประกอบเชิงซ้อนที่เกิดขึ้น ถ้ามีค่ามากแสดงว่าสารประกอบนั้นมีความอยู่ตัวสูง (High Stability) อีกวิธีหนึ่งคือการหาค่าคงตัวทั้งหมดของแต่ละขั้นที่เกิดปฏิกิริยาโดยให้สัญลักษณ์ว่า β ดังนี้



เรียกค่าคงตัวแบบนี้ว่า ค่าคงตัวของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนแบบรวม (Overall Complex Formation Constant ; β)

ค่าคงตัวของการเกิดทั้ง 2 แบบมีความสัมพันธ์กันดังนี้คือ

$$\beta_n = K_1 K_2 K_3 \dots K_n$$

ผลของความแรงไอออนต่อค่าคงตัวการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน⁽¹⁾⁽²⁾

เพื่อความถูกต้องของค่าคงตัวของสารประกอบเชิงซ้อนที่ได้ค่าความเข้มข้นที่ใช้ควรเป็นค่าแอกทิวิตี (Activity) แทนค่าความเข้มข้นที่แท้จริงของสารละลายเนื่องจากในปฏิกิริยาที่ผันกลับได้จะมีสมดุลของปฏิกิริยาเกิดขึ้น ดังตัวอย่างเช่น



ค่าคงตัวของสารประกอบเชิงซ้อนสามารถแสดงในรูปของอัตราส่วนระหว่างความเข้มข้นของสารผลิตภัณฑ์ต่อสารตั้งต้น คือ

$$K = \frac{a_C a_D}{a_A a_B} \quad \dots\dots (2-4)$$

K คือค่าคงที่ที่เรียกว่าค่าคงตัวทางเทอร์โมไดนามิกส์ ต้องใช้ความเข้มข้นส่วนที่มีความไว (Active Concentration หรือ Activity) ของสารผลิตภัณฑ์ด้วยความเข้มข้นส่วนที่มีความไวของสารตั้งต้น K เป็นค่าคงที่เฉพาะอุณหภูมิที่คงที่ค่าหนึ่งถ้ามีการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิค่าคงที่นี้จะเปลี่ยนไป เราสามารถเปลี่ยนค่าแอกทิวิตีให้มีความเข้มข้นเป็นหน่วยโมลาร์ได้ดังนี้

$$K = \frac{f_C [C] x f_D [D]}{f_A [A] x f_B [B]} = \frac{f_C f_D [C][D]}{f_A f_B [A][B]} \quad \dots\dots (2-5)$$

เมื่อ f_i คือ ค่าสัมประสิทธิ์แอกทิวิตีของสาร i

ในสารละลายที่เจือจางมากๆซึ่งปกติจะใช้ในการวิเคราะห์หาปริมาณ ค่าสัมประสิทธิ์แอกทิวิตีจะมีค่าเข้าใกล้ 1 ทำให้ค่า $f_A f_B / f_C f_D$ มีค่าประมาณ 1 ดังนั้นเราจึงสามารถใช้ค่าความเข้มข้นของสารละลายแทนค่าแอกทิวิตีได้เลยและค่าคงตัวสมดุลจะแสดงได้ในเทอมของความเข้มข้นเป็นโมลาร์ของสารตั้งต้นและสารผลิตภัณฑ์

$$K = \frac{[C][D]}{[A][B]} \dots\dots (2-6)$$

เดบายและฮัคเคิล (Debye and Huckle) ได้แสดงให้เห็นว่าค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีนั้นมีความสัมพันธ์กับประจุของไอออนทั้งหมดในสารละลาย จำนวนประจุของไอออนทั้งหมดในสารละลายสามารถรายงานในเทอมความแรงของไอออน⁽¹⁾ (Ionic Strength ; μ) ซึ่งเปลี่ยนแปลงตามความเข้มข้นโดยที่

$$\mu = 1/2 \times \Sigma(C_i Z_i^2) \dots\dots (2-7)$$

เมื่อ C_i คือความเข้มข้นเป็นโมลาร์ของไอออนที่มีประจุเป็น Z_i ถ้าในสารละลายมีสารประกอบหลายๆชนิดปนกันสามารถคำนวณหาความแรงไอออนได้โดยเอาความเข้มข้นของแต่ละไอออนคูณกับกำลังสองของประจุแล้วนำมาบวกกันทุกๆตัว

แต่ในกรณีที่สารละลายที่ใช้ในการทดลองมีความเข้มข้นเจือจางเพียงพอ เราสามารถใช้ค่าความเข้มข้นของสารละลายแทนค่าแอคติวิตีได้ และค่าคงตัวที่ได้จะเป็นค่าคงตัวทางเทอร์โมไดนามิกส์ (Thermodynamic Formation constant) เนื่องจากค่าศักย์ไฟฟ้าของสารละลายที่วัดได้นั้นขึ้นอยู่กับแอคติวิตีของไอออน ดังนั้นเพื่อไม่ให้การทดลองผิดพลาดเนื่องจากการเทียบความเข้มข้น สารละลายที่ใช้ควรมีค่าความแรงไอออนเท่ากันซึ่งทำได้โดยการทำสารละลายทุกตัวให้มีส่วนประกอบของอิเล็คโทรไลต์คล้ายคลึงกันมากที่สุดด้วยการเติมอิเล็คโทรไลต์เฉื่อยให้มากเกินไปพอ และเท่ากันลงในสารละลายทุกตัวที่ต้องการทดลองวัดค่าศักย์ไฟฟ้าซึ่งจะทำให้ความแรงไอออนมีค่าคงที่และค่าคงตัวที่วัดได้เมื่อความแรงไอออนคงที่จะเป็นค่าคงตัวของปริมาณสัมพันธ์ (Stoichiometric Formation Constant)

วิธีโพเทนชิอเมตริก (Potentiometric method) ⁽²⁾

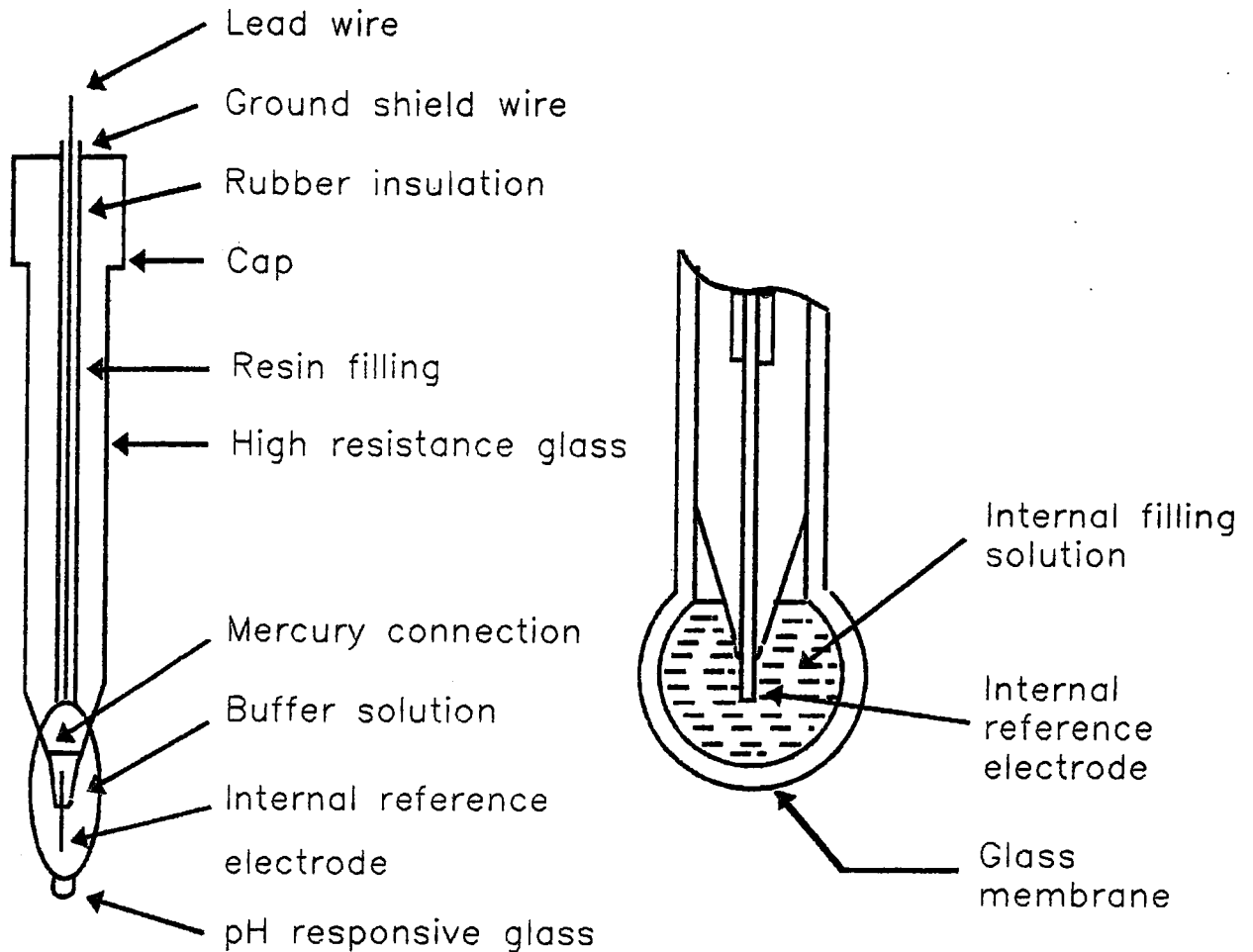
วิธีโพเทนชิอเมตริกคือ วิธีการวัดศักย์ไฟฟ้าของขั้วชี้บอก ที่ไวต่อสปีชีส์ ที่ต้องการวิเคราะห์ปริมาณ ลักษณะของเซลล์ไฟฟ้าเคมีที่ใช้สำหรับวิธีการวิเคราะห์นั้นคือ กัลวานิกเซลล์ การที่ใช้วิธีโพเทนชิอเมตริกควบคู่กับเทคนิคของการไทเทรตเรียกเทคนิคแบบนี้ว่า โพเทนชิอเมตริกไทเทรชัน (Potentiometric Titration)

การวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์แบบกัลวานิกเซลล์ขึ้นอยู่กับแอกทิวิตี (Activity) ของไอออนที่ไวต่อขั้วที่มีอยู่ในสารละลาย ดังนั้นจึงสามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์หาปริมาณสารได้ ถ้าขั้วหนึ่งของเซลล์ที่นำมาใช้เป็นขั้วที่ไวต่อไอออนที่ต้องการวิเคราะห์หาปริมาณขั้วนั้นเรียกว่า "ขั้วชี้บอก" (Indicator Electrode) หรือ "ขั้วทำงาน" (Working Electrode) ส่วนอีกขั้วหนึ่งที่นำมาใช้ต้องเป็นขั้วที่ไม่ขึ้นกับความเข้มข้นของไอออนในสารละลายและต้องมีค่าศักย์ไฟฟ้าคงที่เรียกว่า "ขั้วอ้างอิง" (Reference Electrode) นั่นคือค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่วัดได้จะแปรผันโดยตรงกับศักย์ไฟฟ้าของขั้วชี้บอกหรือความเข้มข้นของไอออนในสารละลาย การวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่ต้องการวิเคราะห์โดยไม่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นสามารถทำได้โดยใช้เครื่องมือที่เรียกว่า "โพเทนชิอมิเตอร์" (Potentiometer)

ขั้วชี้บอกที่ใช้ในงานวิเคราะห์โดยวิธีโพเทนชิอเมตริกแบ่งออกเป็น 2 ชนิดคือขั้วชี้บอกที่เป็นแท่งโลหะและขั้วชี้บอกที่เป็นเมมเบรน สำหรับในการศึกษานี้ใช้ขั้วกลาสเมมเบรนในการประกอบเซลล์เพื่อวัดค่า พีเอช ของสารละลายและเครื่องโพเทนชิอมิเตอร์ที่ใช้วัดค่า พีเอช จะมีชื่อเรียกเฉพาะว่า พีเอชมิเตอร์ (pH meter)

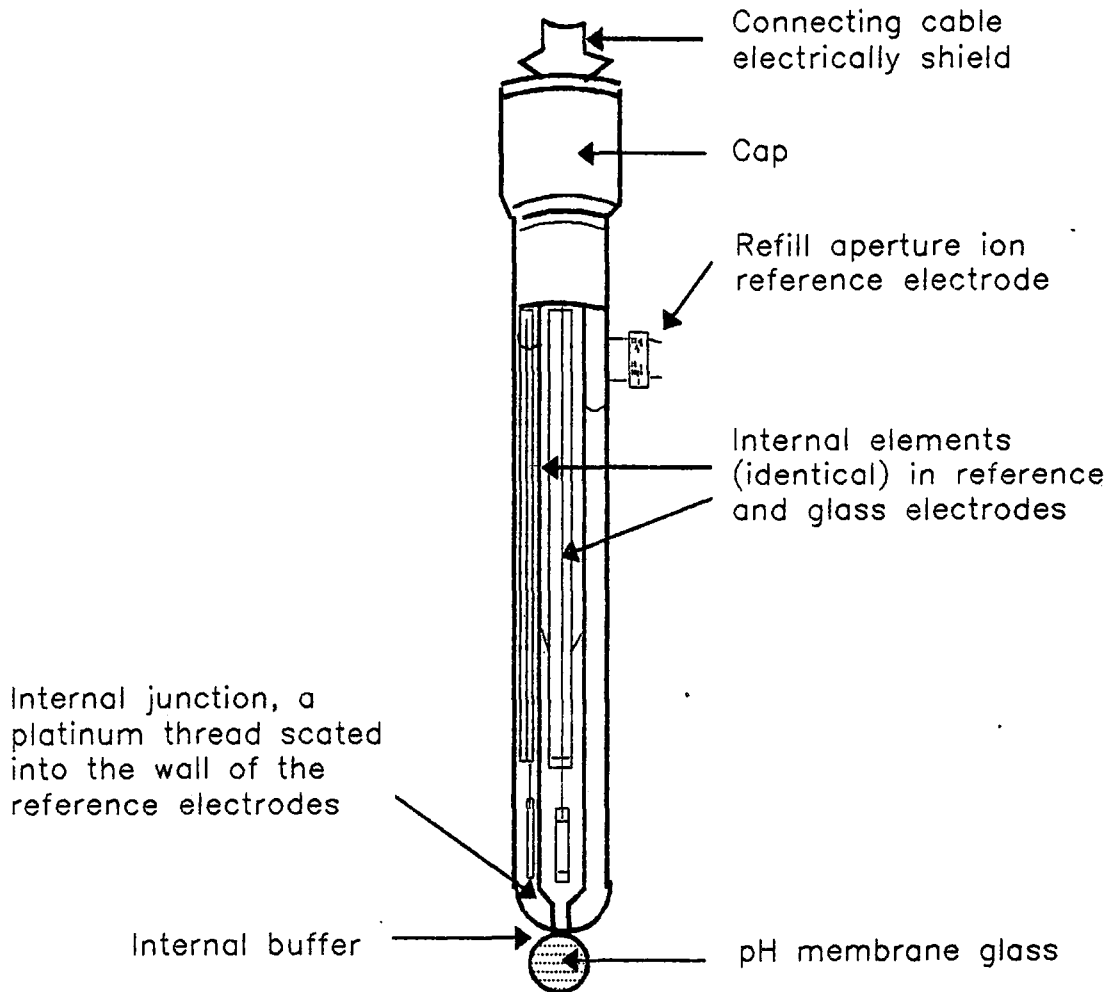
ขั้วกลาสสำหรับวัด พีเอช (Glass Electrode for pH Measurement) ⁽²⁾

ขั้วกลาสที่ใช้วัด พีเอช ของสารละลายมีลักษณะดังแสดงในรูปที่ 2.1 สารละลายอิเล็กโทรไลต์ที่บรรจุอยู่ภายใน คือ กรดไฮโดรคลอริก (HCl) และมีขั้ว Ag/AgCl เป็นขั้วอ้างอิงภายใน เพื่อทำให้สามารถต่อเซลล์ได้ครบวงจร ศักย์ไฟฟ้าของขั้วขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของ HCl ภายนอกและภายใน



รูปที่ 2.1 : ขั้วกลาสวัด pH

เมื่อต้องการวัด พีเอช ของสารละลายต้องใช้ขั้วกลาสเป็นขั้วชี้บอกและขั้วคาโทดเมล
อัมตั่วเป็นขั้วอ้างอิงจุ่มลงในสารละลายที่ต้องการวัดค่า พีเอช แล้วต่อเข้ากับเครื่อง พีเอช มิเตอร์
หรือโพเทนชิออมิเตอร์ ในทางปฏิบัติขั้วกลาสที่ใช้จะเป็นการนำขั้วชี้บอกและขั้วอ้างอิงมาบรรจุ
อยู่ในหลอดแก้วเดียวกันเรียกว่า Combination Electrode มีรูปร่างดังรูปที่ 2.2 ซึ่งสามารถ
ใช้จุ่มในสารละลายแล้วต่อเข้ากับเครื่องพีเอชมิเตอร์ได้เลย



รูปที่ 2.2 : Combination electrode

ขั้วกลาสที่นำมาใช้ในการวัดค่า พีเอช ของสารละลายสามารถรับรู้ลิกต่อสารละลายได้ไวและเปลี่ยนแปลง พีเอช ได้อย่างรวดเร็วเพื่อปรับค่าให้อ่านได้อย่างถูกต้องเมื่อสารละลายเป็นสารละลายบัฟเฟอร์ แต่ถ้าสารละลายนั้นไม่ใช่สารละลายบัฟเฟอร์ขั้วจะรับรู้ลิกต่อค่าพีเอช นั้นได้ช้าต้องให้เวลานานพอสมควรจึงจะอ่านค่า พีเอช ได้ถูกต้อง เมื่อต้องการนำขั้วมาใช้ในการวัดค่า พีเอช แต่ละครั้งต้องล้างขั้วน้ำกลั่นหลายๆครั้งแล้วล้างตามด้วยสารละลายที่ต้องการวัดค่า

พีเอช(Rinse) จากนั้นจึงค่อยอ่านค่า พีเอช เมื่อชั้วกลาสจุ่มอยู่ในสารละลายจนค่าที่อ่านได้คงที่ สารละลายที่ไม่มีสมบัติเป็นสารละลายบัฟเฟอร์เมื่อต้องการวัด พีเอช ควรทำการคนสารละลายนั้น แร่งๆ ชั้วกลาสสำหรับวัดค่า pH สามารถนำมาใช้ได้สะดวกและมีสิ่งรบกวนน้อยกว่าการใช้ชั้วชนิดอื่นและมีราคาไม่แพง สารประเภทที่เป็นตัวออกซิไดซ์หรือตัวรีดิวซ์ โปรตีน และแก๊สไม่สามารถรบกวนการวัดค่า พีเอช โดยใช้ชั้วกลาสได้

ข้อจำกัดบางประการของ pH electrode ที่อาจมีผลต่อการวัดความเข้มข้นของ H^+

1. ศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตร (Asymmetry Potential) ถ้าสารละลายที่ต้องการวัดค่า พีเอช มีคุณสมบัติเหมือนกับสารละลายภายใน พีเอช Electrode ทุกอย่างและผิวของกลาสเมมเบรน (Glass Membrane) ทั้งสองข้างก็มีส่วนประกอบและคุณสมบัติเหมือนกัน ดังนั้นศักย์ไฟฟ้าของ เซลล์ที่วัดได้ควรมีค่าเท่ากับศูนย์ แต่จากการวัดค่าจริงๆพบว่าศักย์ไฟฟ้าที่วัดได้ (E^0) ไม่เป็น ศูนย์ ศักย์ไฟฟ้าที่วัดได้นี้เรียกว่า ศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตร ชั้วกลาส ที่มีอายุการใช้งานนานขึ้นพบว่าศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตรจะมีค่ามากขึ้นแต่อย่างไรก็ตามผลของค่าศักย์ไฟฟ้าที่ไม่สมมาตรที่เกิดขึ้นนี้สามารถขจัดได้ด้วย การ แคริบเรท โดยใช้สารละลายมาตรฐานที่ทราบ พีเอช ที่แน่นอนหรือโดยใช้วิธี Acid-Base Titration ก็ได้
2. ดีไฮเดรชัน (Dehydration) ชั้วกลาสที่ใช้วัดพีเอชของสารละลายไม่ควรปล่อยให้ผิวของ กลาสเมมเบรนแห้งควรต้องถูกไฮเดรตตลอดเวลาด้วยสารละลายเกลือที่เป็นชนิดเดียวกันและ มีความเข้มข้นเท่ากับสารละลายภายในเอง (ในกรณีนี้จะเป็นสารละลาย KCl 3 M) มิฉะนั้น จะทำให้การวัดค่า พีเอช ของสารละลายเกิดข้อผิดพลาดได้
3. Variation in junction potential ค่าศักย์ไฟฟ้าที่เกิดขึ้นที่รอยต่อของสารละลายอาจ เกิดการเปลี่ยนแปลงได้ทำให้ค่า พีเอช ที่วัดได้ไม่แน่นอนโดยอาจเปลี่ยนแปลงได้ถึง 0.1 หน่วยของ พีเอช
4. ข้อผิดพลาดจากค่า พีเอช ของสารละลายบัฟเฟอร์ ในการวัดค่า พีเอช ของสารละลายทุก ครั้งจะต้องมีการทำ แคริบเรท อิเล็กโทรด ด้วยสารละลายบัฟเฟอร์มาตรฐาน ถ้าสารละลาย บัฟเฟอร์ที่ใช้ทำแคริบเรทมีค่า พีเอช เปลี่ยนแปลงไปเนื่องจากการเก็บรักษาไว้ไม่ดีทำให้ส่วน ประกอบเกิดการเปลี่ยนแปลงก็จะเป็นสาเหตุทำให้การวัด พีเอช ของสารละลายตัวอย่างผิด พลาดด้วย ดังนั้นเพื่อขจัดข้อบกพร่องชนิดนี้และในกรณีที่ต้องปรับความแรงไอออน (ionic strength) ของการทำแคริบเรท และความแรงไอออน ของสารละลายในขณะที่ทำการทดลอง

ให้ใกล้เคียงกัน (ความแรงไอออนที่แตกต่างกันมีผลต่อค่าพีเอช และพารามิเตอร์ของอิเล็กโทรด ที่ได้ออกมาแตกต่างกันด้วย) จึงทำแคริเบรท อิเล็กโทรดด้วยวิธี Acid-Base Titration ซึ่งเป็นการวัดค่าศักย์ไฟฟ้า (mV) โดยตรงและใช้ Computer Software คำนวณค่า E° , Electrode Slope และค่าความเข้มข้นของ Acid หรือ Base ค่าใดค่าหนึ่งค่าทั้งหมดเหล่านี้สามารถนำมาคำนวณย้อนกลับเป็นค่า พีเอช ได้

ศักย์ไฟฟ้าของขั้ว (Electrode Potential, E) ⁽¹⁾⁽²⁾

ศักย์ไฟฟ้าของขั้ว หมายถึง พลังงานทางไฟฟ้าที่ต้องใช้ ในการทำให้ประจุลบเคลื่อนที่ จากขั้วหนึ่งไปยังจุด ๆ หนึ่งที่มีระยะทางถึงอนันต์ หรือหมายถึงพลังงานทางไฟฟ้าที่ต้องใช้ในการ ดึงประจุบวกจากจุดอนันต์ให้เคลื่อนที่เข้าหาขั้วนั้น ปกติจะไม่สามารถวัดค่าพลังงานนั้นได้โดยตรง แต่สามารถหาความแตกต่างของพลังงานนั้นระหว่างขั้ว 2 ขั้วได้โดยนำขั้ว 2 ชนิดประกอบเป็น เซลล์ไฟฟ้าเคมีแล้ววัดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ ศักย์ไฟฟ้าของขั้วที่วัดที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียสและ ความเข้มข้นของสารละลายเท่ากับ 1 หน่วยแอกทิวิตี เรียกว่า ศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของขั้ว (Standard Electrode Potential, E°) ถ้ามีการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นและอุณหภูมิ ศักย์ไฟฟ้าของขั้วก็จะเปลี่ยนค่าไปตามสมการของเนิสต์ (Nernst Equation) ดังนี้

พิจารณาปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นคือ



$$E = E^\circ - 2.303[RT/nF]\log[a^{red}/a^{ox}] \quad \dots\dots (2-9)$$

โดย

$$a^{red} = \gamma^{red} [A^{red}]$$

$$a^{ox} = \gamma^{ox} [A^{ox}]$$

แทนค่า a ลงในสมการ (2) จะได้

$$E = E^\circ - 2.303[RT/nF] \log[\chi^{red} A^{red} / \chi^{ox} A^{ox}] \quad \dots\dots(2-10)$$

ปกติในกรณีของไอออนชนิดเดียวกันค่า χ จะไม่ต่างกันมากดังนั้นถือว่า $\chi^{red} = \chi^{ox}$

$$E = E^\circ - 2.303[RT/nF] \log[A^{red} / A^{ox}] \quad \dots\dots(2-11)$$

- เมื่อ E = ศักย์ไฟฟ้า มีหน่วยเป็นมิลลิโวลต์
 E° = ศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของขั้ว มีหน่วยเป็นมิลลิโวลต์
 R = ค่าคงที่ของแก๊สมีค่าเท่ากับ $8.314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
 T = อุณหภูมิ (เคลวิน)
 F = ค่าคงที่ของฟาราเดย์ มีค่าเท่ากับ 96,500 คูลอมบ์
 n = จำนวนอิเล็กตรอนที่ถ่ายเทในปฏิกิริยา
 $[A^{ox}]$ = ค่าความเข้มข้นเป็นโมลาร์ของตัวออกซิไดซ์
 $[A^{red}]$ = ค่าความเข้มข้นเป็นโมลาร์ของตัวรีดิวซ์

จากสมการของเนิสท์ ทำให้สามารถคำนวณหาศักย์ไฟฟ้าของขั้วที่จุ่มอยู่ในสารละลายที่มีความเข้มข้นและอุณหภูมิต่างๆกัน และเมื่อต้องการหาค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จะคำนวณจากสมการ

$$E = E_{\text{cathode}} - E_{\text{anode}} \quad \dots\dots(2-12)$$

สำหรับ Combination Electrode ที่รวมเอาขั้วชี้บอก (Indicator Electrode) และขั้วอ้างอิง (Reference Electrode) เข้าด้วยกัน โดยให้ขั้วที่มีกลาสเมมเบรนเป็นขั้วแอนโอดและขั้ว Ag/AgCl เป็นขั้วแคโทดนั้นศักย์ไฟฟ้าที่เกิดขึ้นภายในเซลล์จะมีค่าดังนี้คือ

$$E = E_{\text{ref}} - E_{\text{Ag/AgCl}} + E_i + (V_2 - V_1) \quad \dots\dots(2-13)$$

E_1 คือ ศักย์ไฟฟ้าที่รอยต่อของสารละลายระหว่างขั้ว E_{ref} กับสารละลายที่ต้องวิเคราะห์

V_1 คือ ศักย์ไฟฟ้าระหว่างรอยต่อ ที่กลาสเมมเบรนกับสารละลาย H^+ ที่ต้องการวิเคราะห์

V_2 คือ ศักย์ไฟฟ้าที่รอยต่อระหว่างกลาสเมมเบรน กับสารละลาย H^+ ที่อยู่ในขั้วกลาส

เนื่องจาก E_{ref} , $E_{AX/AXCl}$ และ E_1 เป็นค่าคงที่ ดังนั้นศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จะมีค่าเท่าไรนั้นขึ้นอยู่กับค่าความต่างศักย์ระหว่าง V_2 กับ V_1 และค่า V_2 กับ V_1 จะมีค่าเท่าไรขึ้นอยู่กับพีเอชของสารละลาย เพราะเกิดการแลกเปลี่ยน H^+ ที่ผิวของกลาสเมมเบรนถ้าความต่างศักย์ของผิวกลาสเมมเบรนทั้งสองข้างมีค่าน้อย จะได้ว่า

$$V_2 - V_1 = Constant + 2.303 [RT/F] \log[1/H^+] \dots\dots(2-14)$$

แทนค่าสมการ (2-14) ลงใน (2-13) จะได้

$$E = E_{ref} - E_{AX/AXCl} + E_1 + Constant + 2.303 [RT/F] \log[1/H^+]..(2-15)$$

จัดสมการใหม่ได้

$$E = k + 2.303 [RT/F] * pH \dots\dots(2-16)$$

ค่า k คือ ค่าคงที่ที่สามารถคำนวณได้จากการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของสารละลายมาตรฐานที่ทราบค่าพีเอชแน่นอน ในกรณีที่ความเข้มข้นของสารละลายเท่ากับ 1 หน่วยแอกทิวิตี ค่าพีเอชจะเท่ากับ 0 ค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่ได้ ก็คือค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน (E°) นั้นเอง ดังนั้นค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานที่อุณหภูมิใดๆก็ตามจะมีค่าเท่ากันเสมอ (ในทางปฏิบัติมักจะอนุโลมถือค่า k ก็คือค่า E° ด้วย)

โพเทนชิอเมตริกไทเทรชัน (Potentiometric titration)

คือ วิธีการวิเคราะห์ที่ใช้การวัดค่าศักย์ไฟฟ้าควบคู่กับเทคนิคของการไทเทรต โดยการวัดค่าศักย์ไฟฟ้าของสารละลายที่ถูกไทเทรตทุกครั้งที่มีการเติมไทเทรนต์ลงไปและนำข้อมูลที่วัดได้อันประกอบด้วยค่าศักย์ไฟฟ้าที่อ่านได้และปริมาณไทเทรนต์ที่เติมลงไป พร้อมทั้งความเข้มข้นตั้งต้นของสารที่ใช้ทั้งหมด และชุดแบบจำลองค่าคงตัวของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนนำมาคำนวณโดยวิธี Numerical Method ก็จะสามารถหาสารประกอบเชิงซ้อนที่เกิดขึ้นพร้อมค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาได้โดยมีหลักการกว้างๆที่จะอธิบายพร้อมโปรแกรม SUPERQUAD และ ELE ดังต่อไปนี้

หลักการของโปรแกรม ELECTRODE CALIBRATION (ELE)

โปรแกรม ELE เป็นโปรแกรมที่ใช้ทำการ แคลิเบรต อิเล็กโทรด สมการหลักที่ใช้สำหรับโปรแกรมนี้คือ Extended Nernst Equation ซึ่งมีดังนี้คือ

$$E = E^\circ + S_L \log[CH^+] + A[CH^+] + B/[CH^+] \quad \dots (2-17)$$

เมื่อ E คือ ค่าศักย์ไฟฟ้าที่วัดได้ (มิลลิโวลต์)

E° คือ ค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของขั้วอิเล็กโทรด (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

$$[H^+] = (C_A V_A - C_B V_B) / (V_A + V_B) \quad \dots (2-18)$$

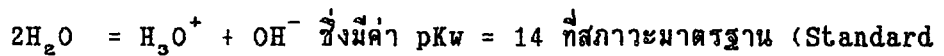
เมื่อผ่านจุดยุติ (End Point) ไปแล้วและอยู่ในช่วงที่เป็นด่าง $[H^+]$ คำนวณได้จาก

$$[H^+] = 10^{Kw} / ((C_B V_B - C_A V_A) / (V_A + V_B)) \quad \dots\dots(2-19)$$

เมื่อ V_A, V_B คือ ปริมาตรของกรดและเบสที่ใช้

C_A, C_B คือ ความเข้มข้นของกรดและเบสที่ใช้ และ

Kw คือ ค่าคงที่ของการแตกตัวของน้ำตามสมการ



State) หรือมีค่า 13.50 ที่สารละลายโพแทสเซียม 0.15 โมลาร์ อุณหภูมิ 37 องศาเซลเซียส ส่วน A และ B คือ Acid Correction และ Base Correction ในกรณีที่ Electrode ไม่เป็นเชิงเส้นตามสมการของเนิสต์ (Nerst Equation)

จากสมการ (2-17) - (2-19) สามารถเขียนออกมาในรูปของฟังก์ชันได้ดังนี้

$$E = f(E^\circ, S_L, C_A, C_B, V_A, V_B, Kw) \quad \dots\dots(2-20)$$

ตัวแปรทั้งหมด 8 ตัวจากสมการ (2-20) ค่า E และ V_B เราสามารถวัดได้ในขณะทำการไทเทรต C_A, C_B และ V_A เป็นค่าที่หาได้จากการเตรียมสารละลาย ดังนั้นทำให้เราสามารถคำนวณหาค่า E° และ Kw ได้ในกรณีที่มิมีข้อมูลจากการไทเทรตมากพอเราเพียงแต่วัดค่า E และ V_B ให้มากพอเท่านั้น ก็สามารถคำนวณตัวแปรที่เหลือคือ E°, S_L, C_A, C_B และ Kw ได้

ในการวัดค่าศักย์ไฟฟ้า E เราจะใช้ขั้วกลาสเป็นตัววัดเมื่อทำการไทเทรตด้วยสารละลายเบส (เติม V_B) ค่าความเข้มข้นของ H^+ จะเปลี่ยนไปทำให้ค่า E ที่อ่านได้เปลี่ยนแปลง

ข้อดีของการใช้โปรแกรม ELE คือทำให้ได้ค่า E°, S_L อยู่ในเงื่อนไขที่ใกล้เคียงกับสภาวะการทดลองมากขึ้น (เช่นค่าความแรงไอออนและอุณหภูมิ) และทำให้สามารถตรวจสอบความเข้มข้นของกรดหรือเบสตัวใดตัวหนึ่งได้ด้วย

หลักการของโปรแกรม SUPERQUAD (SUPER)

โปรแกรม SUPERQUAD เป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ภาษาฟอร์แทรนที่ได้รับการพัฒนา มาใช้ในการคำนวณค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน โดยโปรแกรมนี้ สามารถใช้คำนวณค่าความเข้มข้นของสารตั้งต้น หรือค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของอิเล็กโทรดได้ด้วย โดยโปรแกรมเปิดทางเลือกให้เราสามารถกำหนดตัวแปรเหล่านี้เป็นตัวแปรที่ไม่ทราบค่า และให้ คอมพิวเตอร์คำนวณค่าออกมา หลักการของโปรแกรม SUPERQUAD มีดังต่อไปนี้

สำหรับสปีชีส์ทางเคมี A, B, \dots แต่ละตัวที่เกิดขึ้นอันเนื่องมาจากปฏิกิริยาเคมีในสารละลาย จะมีค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาดังนี้

$$\beta_{a,b} = [A_a B_b \dots] / [A]^a [B]^b \dots \quad \dots (2-21)$$

เมื่อ A, B คือ สารตั้งต้น (สำหรับโปรแกรมนี้มีได้ไม่เกิน 4 ตัว)

$[A], [B]$ คือ ความเข้มข้นของสารที่เป็นอิสระแต่ละตัว

สมการสมดุลของมวล (Mass-Balance Equation) ที่จะสอดคล้องกับสปีชีส์ทางเคมี และค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา จากสมการที่ (2-21) จะเป็น

$$T_A = [A] + \sum a_k \beta_{a,b} \dots [A]^a [B]^b \dots \quad \dots (2-22)$$

$$T_B = [B] + \sum b_k \beta_{a,b} \dots [A]^a [B]^b \dots$$

$T_A, T_B \dots$ คือ ความเข้มข้นทั้งหมดของสาร A, สาร B และอื่นๆที่เกี่ยวข้องทั้งหมดในปฏิกิริยา โดยสมมติว่าจำนวนสปีชีส์ที่มีทั้งหมดเท่ากับ k

ความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่เป็นอิสระ $[A], [B] \dots$ อย่างน้อยหนึ่งตัวจะถูกวัดหาปริมาณโดยตรงโดยอิเล็กโทรดที่ไวต่อสารนั้นๆ (ในการทดลองนี้ใช้พีเอชอิเล็กโทรดวัดความเข้มข้น H^+ เพียงตัวเดียว) โดยวัดศักย์ไฟฟ้าทุกๆจุดของสมการ (2-22) ที่มีการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของ $T_A, T_B \dots$ อันเนื่องมาจากการไทเทรต

การแก้สมการที่(2-22)โดยวิธี numerical method ตามเอกสารอ้างอิง(11)จะทำให้สามารถค่าตัวแปรที่ต้องการเช่นค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยา (β) หรือค่าความเข้มข้น T_A, T_B และอื่น ๆ ได้

เนื่องจากสมการ(2-22)จะเป็นจริงก็ต่อเมื่อมีแบบจำลองของระบบสมดุลที่สมเหตุสมผลซึ่งการคาดคะเนว่าระบบปฏิกิริยาที่กำลังศึกษาอยู่จะมีสปีชีส์ใดในระบบสมดุลบ้าง สามารถทำได้โดยทำการศึกษานั่นอย่างลึกซึ้งเท่านั้น ในทางปฏิบัติทำได้โดยอาศัย การศึกษาปฏิกิริยาที่ใกล้เคียงและอาศัยหลักทางสถิติเข้าช่วย

บทที่ 3

การทดลอง

สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง

- สารละลายกรดไนตริก ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์
- สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์
- สารละลายมาตรฐานอีดีทีเอ ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์
- สารละลายมาตรฐานโพแทสเซียมไฮโดรเจนพทาเลท ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์
- สารละลายมาตรฐานซิงค์(II)คลอไรด์ ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์
- สารละลายซิงค์(II)ไนเตรต ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์
- สารละลายคอปเปอร์(II)ไนเตรต ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์
- สารละลายบัฟเฟอร์พีเอช = 5 เฮกซามีน 30 % น้ำหนักต่อปริมาตร
- สารละลายบัฟเฟอร์พีเอช = 10 แอมโมเนีย/แอมโมเนียมคลอไรด์
- สารละลายอินดิเคเตอร์ฟีนอล์ฟทาลีน
- สารละลายอินดิเคเตอร์ไธลีนอลลอเรนจ์
- สารละลายอินดิเคเตอร์อีริโอโครม แบล็ค ที
- สารละลายโพแทสเซียมไนเตรต ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์
- น้ำกลั่น 3 ครั้ง
- แก๊สไนโตรเจน
- 1-[N-เมทิลนิริดอกซิลดีเนียม]-2-[2'-N-เมทิลนิริดีเนียม]ไฮดรอกไซด์

อุปกรณ์และเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง

เครื่องชั่งละเอียด

เครื่องพีเอชมิเตอร์

เครื่อง IV สเปกโตรโฟโตมิเตอร์

เครื่องไทเทรตอัตโนมัติ

ไมโครปิเปต

เครื่องกวนสารละลายโดยใช้แรงทางแม่เหล็กพร้อมแท่งแม่เหล็ก

อ่างน้ำร้อนที่สามารถควบคุมอุณหภูมิได้

เทอร์โมมิเตอร์

ปั๊มน้ำขนาดเล็ก

ขวดสามคอ

อุปกรณ์เครื่องแก้วต่างๆ

เครื่องคอมพิวเตอร์ AT 16 บิต และ 32 บิต พร้อมฮาร์ดดิสก์

การเตรียมสารละลายที่ใช้ในการทดลอง

1. สารละลายมาตรฐานโพแทสเซียมไฮโดรเจนพทาเลท ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์

นำผงโพแทสเซียมไฮโดรเจนพทาเลท เกรดงานวิเคราะห์ ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99.9 เปอร์เซ็นต์ ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียส นาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 10.2115 กรัมมาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งทำการปรับปริมาตรให้ครบ 100 มิลลิลิตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตร

จากการทดลองสารละลายมาตรฐานโพแทสเซียมไฮโดรเจนพทาเลทที่เตรียมได้มีความเข้มข้น 0.5018 โมลาร์

2. สารละลายมาตรฐานซิงค์(II)คลอไรด์ ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์

นำผงซิงค์(II)คลอไรด์ เกรดงานวิเคราะห์ ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99.5 เปอร์เซ็นต์ ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 6.8143 กรัม มาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งทำการปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตรขนาด 500 มิลลิลิตร จนครบปริมาตร

จากการทดลองสารละลายมาตรฐานซิงค์(II)คลอไรด์ที่เตรียมได้มีความเข้มข้น 0.1020 โมลาร์

3. สารละลายมาตรฐานอิตทีเอ ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์

นำผงไดโซเดียมไดไฮโดรเจนเอทิลีนไดเอมีนเททราแอซิเตตเกรดงานวิเคราะห์ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99.5 เปอร์เซ็นต์ ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 37.224 กรัม มาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้ง ทำการปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตรขนาด 1 ลิตรจนครบปริมาตร

หาความเข้มข้นที่แน่นอนของสารละลายมาตรฐานอิตทีเอโดยไทเทรตกับสารละลายมาตรฐานซิงค์(II)คลอไรด์⁽⁵⁾ ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์ที่พีเอช_{pH} ประมาณ 5 ปรับด้วยสารละลายบัฟเฟอร์พีเอช = 5 เสกซามีนและใช้สารละลายโซลินอลออร์เรนจ์เป็นอินดิเคเตอร์ ที่จุดยุติสารละลายของสารละลายมาตรฐานซิงค์(II)คลอไรด์และอินดิเคเตอร์ จะเปลี่ยนจากสีแดงเข้มเป็นสีเหลือง โดยอัตราส่วนจำนวนโมลของการทำปฏิกิริยาระหว่างสารละลายมาตรฐานซิงค์(II)คลอไรด์และสารละลายมาตรฐานอิตทีเอเท่ากับ 1:1

จากการทดลองสารละลายมาตรฐานอิตทีเอที่เตรียมได้มีความเข้มข้น เท่ากับ 0.0995 โมลาร์

4. สารละลายบัฟเฟอร์พีเอช = 5 เสกซามีน 30 เปอร์เซ็นต์น้ำหนักต่อปริมาตร

นำผงเสกซามีนเกรดงานวิเคราะห์ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99.0 เปอร์เซ็นต์ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 30 กรัม มาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้ง ทำการปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตรขนาด 100 มิลลิลิตรจนครบปริมาตร

5. สารละลายบัฟเฟอร์พีเอช = 10 แอมโมเนีย/แอมโมเนียมคลอไรด์

เติมสารละลายแอมโมเนียเข้มข้น 142 มิลลิลิตรลงในเกลียวแอมโมเนียมคลอไรด์เกรดงานวิเคราะห์ 17.5 กรัม เจือจางด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งจนสารละลายมีปริมาตรครบ 250 มิลลิลิตร เขย่าขวดให้สารละลายเข้ากัน

6. สารละลายอินดิเคเตอร์ฟีนอล์ฟทาลีน^(๕)

นำผงฟีนอล์ฟทาลีน 0.5 กรัมมาละลายในเอทานอล 50 มิลลิลิตรเติมน้ำกลั่น 3 ครั้ง 50 มิลลิลิตร พร้อมทั้งคนสม่ำเสมอถ้าสารละลายไม่ใสให้กรองเอาเฉพาะส่วนที่ใส

7. สารละลายอินดิเคเตอร์ไธลีนอลอเรนจ์^(๕)

ละลายผงไธลีนอลอเรนจ์ 0.5 กรัม ด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งทำการปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตรขนาด 100 มิลลิลิตร จนครบปริมาตร

8. สารละลายอินดิเคเตอร์อีวีโอโครม แบล็ค ที^(๕)

ละลายอีวีโอโครม แบล็ค ที 0.4 กรัม ด้วยเมทานอลบริสุทธิ์ 100 มิลลิลิตร

9. สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์

นำกรดโซเดียมไฮดรอกไซด์ เกรดงานวิเคราะห์ ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99 เปอร์เซ็นต์ ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 40.00 กรัม มาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งทำการปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้ง ในขวดวัดปริมาตรขนาด 2 ลิตรจนครบปริมาตร จากนั้นแบ่งสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ออกเป็น 2 ส่วน ส่วนละ 1 ลิตร ส่วนหนึ่งนำมาทำการควบคุมความแรงไอออนของสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ให้ได้ 0.5 โมลาร์โดยเติมผงโพแทสเซียมไนเตรดเกรดงานวิเคราะห์ ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99.5 เปอร์เซ็นต์ ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 50.555 กรัม

สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์อีกส่วนหนึ่งนำมาหาความเข้มข้นที่แน่นอนโดยไทเทรตด้วยสารละลายมาตรฐานโพแทสเซียมไฮดรเจนพทาเลท^(๕) ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์ที่เตรียมได้จากข้อ 1 ใช้สารละลายฟีนอล์ฟทาลีนเป็นอินดิเคเตอร์ ที่จุดยุติสารละลายจะเปลี่ยนจากสีชมพูเป็นไม่มีสี อัตราส่วนจำนวนโมลของการทำปฏิกิริยาระหว่างสารละลายมาตรฐานโพแทสเซียมไฮดรเจนพทาเลทและสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์เท่ากับ 1:1

จากการทดลองสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ที่เตรียมได้มีความเข้มข้นเท่ากับ 0.5332 โมลาร์

10. สารละลายกรดไนตริก ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์

นำกรดไนตริกเข้มข้น 65 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก เกรดงานวิเคราะห์ น้ำหนัก 96.9431 กรัม มาเจือจางด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้ง ทำการปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตรขนาด 2 ลิตร แบ่งสารละลายออกเป็น 2 ส่วน ส่วนละ 1 ลิตร ส่วนหนึ่งนำมาทำการควบคุมความแรงไอออนให้ได้ 0.5 โมลาร์โดยเติมด้วยผงโพแทสเซียมไนเตรตเช่นเดียวกับข้อ 9

สารละลายกรดไนตริกอีกส่วนหนึ่งนำมาหาความเข้มข้นที่แน่นอนโดยไทเทรตกับสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์^(๕) ที่ทราบความเข้มข้นที่แน่นอนจากข้อ 9 ใช้สารละลายฟีนอล์ฟทาลีนเป็นอินดิเคเตอร์ ที่จุดยุติสารละลายจะเปลี่ยนจากไม่มีสีเป็นสีชมพูอ่อน อัตราส่วนจำนวนโมลของการทำปฏิกิริยาระหว่างสารละลายกรดไนตริกและโซเดียมไฮดรอกไซด์เท่ากับ 1:1

จากการทดลองสารละลายกรดไนตริกที่เตรียมได้มีความเข้มข้นเท่ากับ 0.5265 โมลาร์

11. สารละลายซิงค์(II)ไนเตรต ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์

นำผงซิงค์(II)ไนเตรตเฮกซะไฮเดรตเกรดงานวิเคราะห์ ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99.0 เปอร์เซ็นต์ ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 2.9748 กรัม มาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งทำการปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตรขนาด 100 มิลลิลิตรจนครบปริมาตร

หาความเข้มข้นที่แน่นอนของสารละลายซิงค์(II)ไนเตรตโดยปรับพีเอชของสารละลายให้เท่ากับ 5 ด้วยสารละลายบัฟเฟอร์พีเอช = 5 เฮกซามีนจากนั้นนำไปไทเทรตด้วยสารละลายมาตรฐานอีดีทีเอ^(๕) ที่ทราบความเข้มข้นที่แน่นอนจากข้อ 3 ใช้สารละลายไซลีนอลอเรนจ์เป็นอินดิเคเตอร์ ที่จุดยุติสารละลายซิงค์(II)ไนเตรตจะเปลี่ยนจากสีแดงเข้มเป็นสีเหลืองชมพู อัตรา

ส่วนจำนวนโมลของการทำปฏิกิริยาระหว่างสารละลายซิงค์(II) ในเทรตและสารละลายมาตรฐาน
อิตทีเอเท่ากับ 1:1

จากการทดลองสารละลายซิงค์(II) ในเทรตที่เตรียมได้มีความเข้มข้น เท่ากับ 0.098
โมลาร์

12. สารละลายคอปเปอร์(II) ในเทรต ความเข้มข้น 0.1 โมลาร์

นำผงคอปเปอร์(II) ในเทรตไตรไฮเดรต เกรดงานวิเคราะห์ ความบริสุทธิ์ไม่น้อย
กว่า 99.5 เปอร์เซ็นต์ ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้
เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 2.4160 กรัม มาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งทำการปรับปริมาตรด้วย
น้ำกลั่น 3 ครั้งในขวดวัดปริมาตรขนาด 100 มิลลิลิตรจนครบปริมาตร

หาความเข้มข้นที่แน่นอนของสารละลายคอปเปอร์(II) ในเทรต^(๕) โดยปรับ pH ของ
สารละลายให้เท่ากับ 10 ด้วยสารละลายบัฟเฟอร์พีเอช = 10 แอมโมเนีย/แอมโมเนียมคลอไรด์
เติมสารละลายมาตรฐานอิตทีเอที่ทราบความเข้มข้นที่แน่นอนจากข้อ 3 ให้มากเกินพอและทราบ
ปริมาตรที่แน่นอน ทำการไทเทรตย้อนกลับเพื่อหาปริมาณอิตทีเอที่เหลือด้วยสารละลายมาตรฐาน
ซิงค์(II) คลอไรด์ ใช้อีริโอโครม แบล็ค ที่ เป็นอินดิเคเตอร์ ที่จุดยุติสารละลายจะเปลี่ยนจากสี
น้ำเงินเป็นสีม่วงน้ำเงิน อัตราส่วนจำนวนโมลของการทำปฏิกิริยาระหว่างสารละลายมาตรฐาน
ซิงค์(II) คลอไรด์และสารละลายมาตรฐานอิตทีเอที่เหลือเท่ากับ 1:1 จำนวนโมลของสารละลาย
มาตรฐานอิตทีเอที่ใช้ไปสมมูลกับจำนวนโมลของสารละลายคอปเปอร์(II) ในเทรตที่ใช้ในการไท-
เทรต ดังนั้นจึงคำนวณหาความเข้มข้นที่แน่นอนของสารละลายคอปเปอร์(II) ในเทรตได้

จากการทดลองสารละลายคอปเปอร์(II) ในเทรตมีความเข้มข้นเท่ากับ 0.1002
โมลาร์

13. สารละลายโพแทสเซียมไนเตรด ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์

นำวงโพแทสเซียมไนเตรด เกรดงานวิเคราะห์ ความบริสุทธิ์ไม่น้อยกว่า 99.5% ที่อบแห้งในตู้อบที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียสนาน 2 ชั่วโมงและทิ้งให้เย็นในเดซิเคเตอร์ น้ำหนัก 5.0555 กรัม มาละลายด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งทำการปรับปริมาตรในขวดวัดปริมาตรขนาด 100 มิลลิลิตรด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้งจนครบปริมาตร

วิธีการทดลอง

การทดลองจะจัดให้ระบบอยู่ในสภาวะที่มีอุณหภูมิ 37 องศาเซลเซียสโดยใช้อ่างน้ำร้อนที่ควบคุมอุณหภูมิได้และป้อนน้ำในการควบคุมอุณหภูมิในบรรยากาศของก๊าซไนโตรเจน และรักษาค่าความแรงไอออนของระบบให้มีค่าเท่ากับ 0.5 โมลาร์ด้วยโพแทสเซียมไนเตรด

1. การแคลิเบรทอิเล็กโทรด เพื่อหาค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน (E^0) ของอิเล็กโทรดที่ใช้มีวิธีการดังนี้

- 1.1 ปิดเปิดสารละลายโพแทสเซียมไนเตรดเข้มข้น 0.5 โมลาร์ จำนวน 25 มิลลิลิตรลงในขวดสามคอ
- 1.2 ต่อท่อสารละลายกรดไนตริก, สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์, ท่อแก๊สไนโตรเจนและอิเล็กโทรดให้จมลงในสารละลายที่อยู่ในขวดสามคอ ใช้เครื่องกวนสารละลายด้วยแรงทางแม่เหล็ก และแท่งแม่เหล็กกวนสารละลายด้วยความเร็วที่พอเหมาะ
- 1.3 เปิดวาล์วถึงแก๊สไนโตรเจนให้แก๊สไนโตรเจนเข้าสู่ขวดสามคอ ทิ้งให้ระบบเข้าสู่สภาวะสมดุลประมาณ 5 นาที
- 1.4 ใช้เครื่องไทเทรตอัตโนมัติโดยผ่านทางโปรแกรม TR500 โดยใช้คำสั่ง ecal จากรายการคำสั่งและให้ใส่ Sample Identification และ Comments ดังต่อไปนี้โดยไม่ให้ผิดพลาด (ความหมายของข้อความต่างๆแสดงในภาคผนวก ง)

SAMPLE IDENTIFICATION : e21b9401

COMMENTS : ves[wat=25.0,aco1=0.5,acv=2.0],

bur[bco=-0.5449],ele[eze1=425.0]

water 25 ml + acid 0.5 M x2.0 ml

โปรแกรมจะเติมสารละลายกรดไนตริก ความเข้มข้น 0.5 โมลาร์ 2 มิลลิลิตรลงในสารละลายโพแทสเซียมไนเตรด และทำการไทเทรตสารละลายนี้ด้วยสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์จนกระทั่งถึงช่วงพีเอช ประมาณ 12-13 หรือเติมสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ลงไปประมาณ 4 มิลลิลิตร เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์ข้อมูลออกมาทางเครื่องพิมพ์

2. การหาค่าคงที่ในการโปรโตเนชันของ 1-[*N*-เมทิลพิริดอกซิลิดีนีสม]-2-[2'-*N*-เมทิลพิริดีนีสม]ไฮดรารีน (SAG8)

2.1 ละลาย SAG8 ในปริมาณพอเหมาะด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้ง 60 มิลลิลิตร โดยค่อยๆเติม SAG8 ทีละน้อยลงในน้ำกลั่น 3 ครั้ง ใช้เครื่องกวนสารละลายด้วยแรงทางแม่เหล็กช่วยในการทำละลาย

2.2 ปิเปิดสารละลาย SAG8 25 มิลลิลิตรใส่ลงในขวดสามคอ

2.3 ต่อก้อนสารละลายกรดไนตริก, สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์, ก๊าซไนโตรเจนและอิเล็กโทรดให้จมลงในสารละลายที่อยู่ในขวดสามคอ ใช้เครื่องกวนสารละลายด้วยแรงทางแม่เหล็กและแท่งแม่เหล็กกวนสารละลายด้วยความเร็วที่พอเหมาะ

2.4 เปิดวาล์วถึงแก๊สไนโตรเจนให้แก๊สไนโตรเจนเข้าสู่ขวดสามคอ ทั้งให้ระบบเข้าสู่สภาวะสมดุลประมาณ 5 นาที

2.5 ใช้เครื่องไทเทรตอัตโนมัติโดยผ่านทางโปรแกรม TR600 โดยใช้คำสั่ง adda เพื่อเติมสารละลายกรดไนตริก 2 มิลลิลิตรลงในขวดสามคอ จากนั้นใช้คำสั่ง atob จากรายการคำสั่งและให้ใส่ Sample Identification และ Comments ดังต่อไปนี้โดยไม่ให้ผิดพลาด

SAMPLE IDENTIFICATION : z21b9401

COMMENTS : ves[wat=25.0,aco0=0.5,acv=2.0,l1c1=0.5],

bur[bco=-0.5449],ele[eze1=425.0]

SAG8 + water 25 ml + acid 0.5 M x2.0 ml

โปรแกรมจะทำการไทเทรตสารละลายในขวดสามคอด้วยสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์จนกระทั่งถึงช่วงพีเอช pH ประมาณ 12-13 หรือเติมสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ลงไปประมาณ 4 มิลลิลิตร เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์ข้อมูลออกมาทางเครื่องพิมพ์

- 2.6 ทำการไทเทรตย้อนกลับจากข้อ 2.5 โดยใช้คำสั่ง btoa จากรายการคำสั่งและให้ใส่ Sample Identification และ Comments ดังต่อไปนี้โดยไม่ให้ผิดพลาด

SAMPLE IDENTIFICATION : z21b9402, from=z21b9401

COMMENTS : SAG8 Protonation const.

โปรแกรมจะทำการไทเทรตสารละลายในขวดสามคอด้วยสารละลายกรดไนตริกจนกระทั่งถึงช่วงพีเอชประมาณ 2 หรือเติมสารละลายกรดไนตริกลงไปประมาณ 4 มิลลิลิตร เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์ข้อมูลออกมาทางเครื่องพิมพ์

3. การหาค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ 1-[N-เมทิลพริดอกซิลิดีนเนียม]-2-[2'-N-เมทิลพริดิเนียม]ไฮดรอกไซด์ (SAG8) กับซิงค์(II)ไอออน

- 3.1 เติมสารละลายซิงค์(II)ในเทรต 100 ไมโครลิตรลงในสารละลายจากข้อ 2.6

- 3.2 ใช้เครื่องไทเทรตอัตโนมัติโดยผ่านทางโปรแกรม TR600 โดยใช้คำสั่ง atob จากรายการคำสั่งและให้ใส่ Sample Identification และ Comments ดังต่อไปนี้โดยไม่ให้ผิดพลาด

SAMPLE IDENTIFICATION : z21b9403, from=z21b9402

COMMENTS : ves[m1c0=0.098,m1v=0.0001]

SAG8 + Zn(ii) 0.098 M x 100 microlit

โปรแกรมจะทำการไทเทรตสารละลายในขวดสามคอด้วยสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์จนกระทั่งถึงช่วง pH ประมาณ 12-13 หรือเติมสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ลงไปประมาณ 4 มิลลิลิตร เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์ข้อมูลออกมาทางเครื่องพิมพ์

- 3.3 เติมสารละลายซิงค์(II)ในเทรต 100 ไมโครลิตร ลงในสารละลายจากข้อ 3.2

- 3.4 ใช้คำสั่ง btoa จากรายการคำสั่งและให้ใส่ Sample Identification และ Comments ดังต่อไปนี้โดยไม่ให้ผิดพลาด

SAMPLE IDENTIFICATION : z21b9404, from=z21b9403

COMMENTS : ves[m1c0=0.098,m1v=0.0001]

SAG8 + Zn(II) 0.098 M x 100 microlit

โปรแกรมจะทำการไทเทรตสารละลายในขวดสามคอด้วยสารละลายกรดไนตริกจนกระทั่งถึงช่วงพีเอช ประมาณ 2 หรือเติมสารละลายกรดไนตริกลงไปประมาณ 4 มิลลิลิตร เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์ข้อมูลออกมาทางเครื่องพิมพ์

3.5 เติมสารละลายซิงค์(II)ในเทรต 100 ไมโครลิตร ลงในสารละลายจากข้อ 3.4

3.6 ใช้คำสั่ง atob จากรายการคำสั่งและให้ใส่ Sample Identification และ Comments ดังต่อไปนี้โดยไม่ให้ผิดพลาด

SAMPLE IDENTIFICATION : z21b9405, from=z21b9404

COMMENTS : ves[m1c0=0.098,m1v=0.0001]

SAG8 + Zn(II) 0.098 M x 100 microlit

โปรแกรมจะทำการไทเทรตสารละลายในขวดสามคอด้วยสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์จนกระทั่งถึงช่วงพีเอชประมาณ 12-13 หรือเติมสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ลงไปประมาณ 4 มิลลิลิตร เครื่องจะหยุดการทำงานและพิมพ์ข้อมูลออกมาทางเครื่องพิมพ์

4. การหาค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ 1-[N-เมทิลพิริดอกซิลิดีนีอัม]-2-[2'-N-เมทิลพิริดีนีนีอัม]ไฮดรอกไซด์(SAG8) กับคอปเปอร์(II)ไอออน

4.1 ปิเปิดสารละลาย SAG8 25 มิลลิลิตรใส่ลงในขวดสามคอ จากนั้นทำตามขั้นตอนที่ 2.3-

2.6 โดยเปลี่ยนรายละเอียด Sample Identification เป็น c21b94xx

4.2 เติมสารละลายคอปเปอร์(II)ในเทรต 100 ไมโครลิตร ลงในสารละลายจากข้อ 4.1

4.3 ทำการทดลองตามขั้นตอนในข้อ 3.2-3.6 โดยเปลี่ยนรายละเอียด Sample Identification เป็น c21b94xx เปลี่ยนรายละเอียด Comments เป็น

COMMENTS : ves[m1c0=0.100,m1v=0.0001]

SAG8 + Cu(II) 0.098 M x 100 microlit

และเปลี่ยนสารละลายที่เติมเป็นสารละลายคอปเปอร์(II)ในเทรต

4.4 ทำการเคลือบเรทอิเล็กโทรดอีกครั้งโดยเปลี่ยน Sample Identification เป็น e21b9402

5. การวัดการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วงVisibleของสารประกอบเชิงซ้อนของ 1-[N-เมทิลพิริดอกซิลิดีนีเยม]-2-[2'-N-เมทิลพิริดิเนียม]ไฮดรารีน(SAG8) กับไอออนของโลหะทรานซิชัน

5.1 ละลาย SAG8 ในปริมาณพอเหมาะด้วยน้ำกลั่น 3 ครั้ง 25 มิลลิตร โดยค่อยๆเติม SAG8 ทีละน้อยลงในน้ำกลั่น 3 ครั้ง ใช้เครื่องกวนสารละลายด้วยแรงทางแม่เหล็กช่วยในการทำละลาย

5.2 วัดพีเอชของสารละลาย SAG8

5.3 วัดการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วงvisible โดยใช้เครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์

5.4 ปรับพีเอชของสารละลาย SAG8 ให้มีค่าประมาณ 2 ด้วยสารละลายกรดไนตริกที่มีความแรงไอออน 0.5 โมลาร์ แล้ววัดการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วงVisible

5.5 ปรับพีเอชของสารละลาย SAG8 ให้มีค่าประมาณ 11 ด้วยสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ที่มีความแรงไอออน 0.5 โมลาร์แล้ววัดการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วงVisible

5.6 เติมสารละลายซิงค์(II)ในเทรต ปริมาณเล็กน้อยโดยระวังอย่าให้เกิดตะกอนลงในสารละลาย SAG8

5.7 วัดการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วงVisible

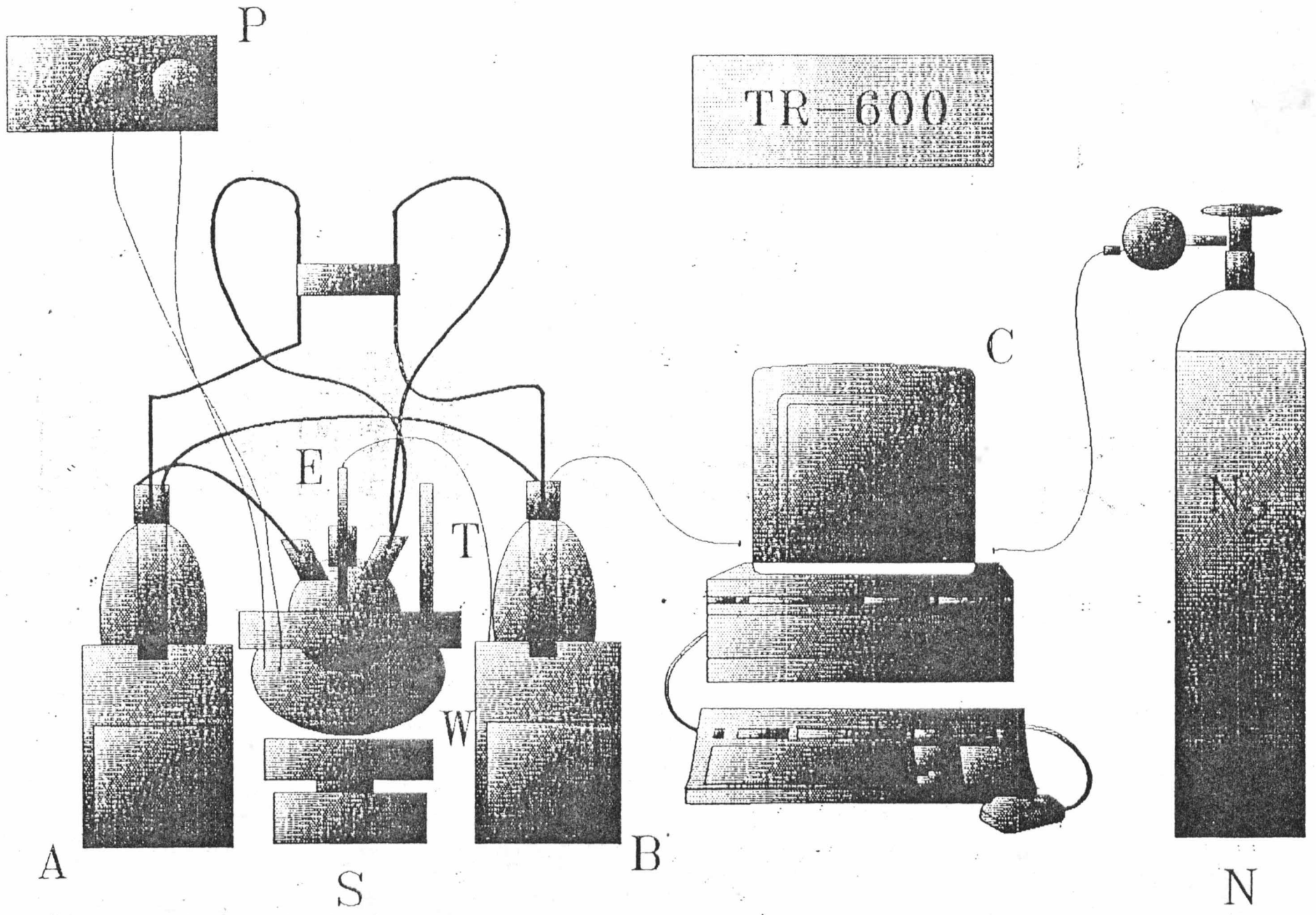
5.8 ปรับพีเอชของสารละลายให้มีค่าประมาณ 2 ด้วยสารละลายกรดไนตริกที่มีความแรงไอออน 0.5 โมลาร์ แล้ววัดการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วงVisible

5.9 ทำการทดลองข้อ 5.2-5.8 ซ้ำ แต่เปลี่ยนสารละลายซิงค์(II)ในเทรตเป็นสารละลายคอปเปอร์(II)ในเทรต

การคำนวณ

1. เปลี่ยนข้อมูลที่ได้จากโปรแกรม TR600 ให้เป็นอินพุทของโปรแกรม ELE และ SUPERQUAD โดยใช้โปรแกรม DCO
2. คำนวณพารามิเตอร์ของอิเล็กโทรดด้วยโปรแกรม ELE จะได้อัตราการถ่ายโอนอิเล็กตรอน (E°), ความเข้มข้นกรดและเบส (ภาคผนวก ค)

3. คำนวณหาค่าคงที่ในการเกิดโปรโตเนชันของ 1-[*N*-เมทิลพิริดอกซิลิดีนียม]-2-[2'-*N*-เมทิลพิริดีนียม]ไฮดรารีน(SAG8) โดยใช้พารามิเตอร์ของอิเล็กทรอนิกส์ที่ได้จากข้อ 2 เป็นอินพุตในการคำนวณ (ภาคผนวก ง)
4. คำนวณหาค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ 1-[*N*-เมทิลพิริดอกซิลิดีนียม]-2-[2'-*N*-เมทิลพิริดีนียม]ไฮดรารีน (SAG8) กับซิงค์(II)ไอออนและสมมติค่าคงที่ในการรับหรือให้โปรตอนในรูปของค่าลอการิทึมฐานสิบตามแบบจำลองที่คาดว่าจะเป็นไปได้
5. คำนวณหาค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ 1-[*N*-เมทิลพิริดอกซิลิดีนียม]-2-[2'-*N*-เมทิลพิริดีนียม]ไฮดรารีน (SAG8) กับคอปเปอร์(II)ไอออน โดยนำข้อมูลจากข้อ 4 มาใช้ประกอบในการสมมติค่าคงที่ในการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนในรูปของค่าลอการิทึมฐานสิบตามแบบจำลองที่คาดว่าจะเป็นไปได้



การจัดวางเครื่องมัลติทัชในการทดลอง

จากรูปการจัดวางเครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง

- P = ปืนน้ำ และอุปกรณ์ควบคุมอุณหภูมิ
- E = อิเล็กโทรด
- A = ชุดไทเทรตอัตโนมัติที่บรรจุกรดเป็นไทแทนต์
- B = ชุดไทเทรตอัตโนมัติที่บรรจุเบสเป็นไทแทนต์
- T = เทอร์โมมิเตอร์
- W = อ่างน้ำควบคุมอุณหภูมิ
- S = เครื่องกวนสารละลายด้วยแท่งแม่เหล็ก
- C = คอมพิวเตอร์
- N = ก๊าซไนโตรเจน

บทที่ 4

ผลการวิจัยและวิจารณ์

จากการทดลองเพื่อศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง 1-[N-เมธิลพิริดอกซิลลิดีเนียม]-2-[2'-N-เมธิลพิริดีเนียม]ไฮดรอกซีน (SAG8) กับโลหะซิงค์ (II) และ คอปเปอร์ (II) โดยวิธีโพเทนชิออลเมตริกไทเทรชัน ดังผลการทดลองต่อไปนี้

ตอนที่ 1 การแคริเบรทอเล็กโทรด์

จากการไทเทรตเพื่อทำการแคริเบรทอเล็กโทรด์ได้ข้อมูลดังนี้คือ ปริมาตรของไทเทรนต์ที่ใช้ , ค่าศักย์ไฟฟ้า และค่าพีเอชของสารละลายที่เกิดขึ้นในแต่ละจุดของการไทเทรต จากนั้นนำมาแปลงด้วยโปรแกรม DCO จะได้เป็นอินพุตดังภาคผนวก ข นำอินพุตไปคำนวณด้วยโปรแกรม ELE จะได้เอาท์พุตดังภาคผนวก ค ซึ่งจะคำนวณได้ต่าง ๆ ดังนี้

1. ค่าความเข้มข้นกรดไนตริก = 0.49986 โมลาร์
2. ค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน (E°) = 420.4467 มิลลิโวลต์

ค่าความเข้มข้นกรดไนตริกที่ได้จะไม่เท่ากับค่าที่ได้จากการไทเทรตกับโซเดียมไฮดรอกไซด์ แต่เราจะใช้ค่าที่ได้จากการคำนวณนี้เป็นค่าตั้งต้นสำหรับการคำนวณต่อ ๆ ไป เนื่องจากค่าที่ได้จากการคำนวณนี้เป็นค่าที่หาได้ที่สภาวะทำการทดลองจริง

ตอนที่ 2 การศึกษาปฏิกิริยาโปรโตเนชัน และดีโปรโตเนชันของ SAG8

ข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตประกอบด้วย ปริมาตรของไทแทรนด์ที่ใช้ , ค่าศักย์ไฟฟ้า และค่าพีเอชของสารละลายที่เกิดขึ้นในแต่ละจุดของการไทเทรต ดังแสดงในตารางที่ 4.1 และรูปที่ 4.1 จากนั้นเมื่อนำข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตไปคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD จะได้กราฟจากการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ (รูปที่ 4.6) จากกราฟทำให้ทราบว่าที่พีเอช 1.47 จะพบสปีชีส์ LH_3^- มากที่สุด และจะลดลงเรื่อย ๆ จนหมดไปที่พีเอช 4.27 และที่พีเอช 1.47 พบสปีชีส์ LH_2 น้อย และจะค่อย ๆ เพิ่มจนมีปริมาณมากที่สุดที่พีเอช 4.27 จากนั้นจะลดลงเรื่อย ๆ จนหมดไปที่พีเอชเท่ากับ 10.98 ส่วนสปีชีส์ LH^- จะเริ่มเกิดขึ้นที่พีเอช 4.27 และมากขึ้นเรื่อย ๆ จนคงที่ ๆ พีเอช 10.98

ตอนที่ 3 การไทเทรตระหว่าง SAG8 กับ ซิงค์(II)

จากการไทเทรตครั้งแรกที่มีปริมาณซิงค์(II) 0.0196 โมลในสารละลาย ได้ข้อมูลประกอบด้วย ปริมาตรของไทแทรนด์ที่ใช้ , ค่าศักย์ไฟฟ้า และค่าพีเอชของสารละลายที่เกิดขึ้นในแต่ละจุดของการไทเทรต ดังแสดงในตารางที่ 4.3 และรูป 4.2 จากนั้นเมื่อนำข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตไปคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD จะได้กราฟจากการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ 2 กราฟคือ เมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของโลหะซิงค์(II) (รูปที่ 4.7) และเมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของ SAG8 (รูปที่ 4.8) ซึ่งจากกราฟจะพบว่าที่พีเอชเท่ากับ 7.00 จะเริ่มเกิดสปีชีส์ MLH^+ , $M(LH)OH$ และ LH^- สปีชีส์ MLH^+ จะพบมากที่สุดที่พีเอช 8.95 เมื่อไทเทรตจนพีเอช 10 สปีชีส์ LH_2 และ MLH^+ จะหมดไปเหลือแต่สปีชีส์ $M(LH)OH$ กับ LH^- ซึ่งมีปริมาณคงที่

เมื่อไทเทรตครั้งที่สอง โดยเพิ่ม ซิงค์(II) เป็น 0.0294 โมลในสารละลาย ได้ข้อมูลเช่นเดียวกับการไทเทรตครั้งแรก ดังแสดงในตาราง 4.4 และรูป 4.3 เมื่อนำข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตไปคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD จะได้กราฟจากการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ 2 กราฟคือ เมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของโลหะซิงค์(II) (รูปที่ 4.9) และเมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของ SAG8 (รูปที่ 4.10) ซึ่งจากกราฟพบว่าสปีชีส์ MLH^+ และ $M(LH)OH$ เริ่มเกิดขึ้นได้ที่พีเอชต่ำลงคือที่พีเอชประมาณ 4 เท่านั้น MLH^+ จะมีปริมาณมากที่สุดที่พีเอช 7.00 และจะลดลงจนหมดไปที่

พีเอช 9.62 และที่จุดนี้สปีชีส์ $M(LH)OH$ จะมีมากขึ้นเรื่อย ๆ จนคงที่ ๆ และสปีชีส์ LH_2 ก็ทั้งหมดไป ส่วนสปีชีส์ LH^- จะเริ่มเกิดที่พีเอช 7.38 และมากขึ้นจนคงที่ ๆ พีเอช 10.83 จากการไทเทรตครั้งที่สองนี้ จะเห็นได้ชัดว่าสปีชีส์ MLH^+ สามารถเกิดได้มากกว่าการไทเทรตครั้งแรก ส่วนสปีชีส์ LH^- นั้นที่จุดสุดท้ายของการไทเทรตจะเหลือปริมาณน้อยกว่าครั้งแรก

ตอนที่ 4 การไทเทรตระหว่าง SAG8 กับ คอปเปอร์(II)

จากการไทเทรตครั้งแรกที่มีปริมาณคอปเปอร์(II) 0.0100 โมลในสารละลาย ได้ข้อมูลประกอบด้วย ปริมาตรของไทแทนต์ที่ใช้ , ค่าศักย์ไฟฟ้า และค่าพีเอชของสารละลายที่เกิดขึ้นในแต่ละจุดของการไทเทรต ดังแสดงในตารางที่ 4.5 และรูป 4.4 จากนั้นเมื่อนำข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตไปคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD จะได้กราฟจากการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ 2 กราฟคือ เมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของโลหะคอปเปอร์(II) (รูปที่ 4.11) และเมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของ SAG8 (รูปที่ 4.12) พบว่าสปีชีส์ MLH^+ จะเริ่มเกิดที่พีเอช 3.68 และมากที่สุดที่พีเอช 6.39 จากนั้นจะลดลงเรื่อย ๆ จนคงที่ ๆ พีเอช 10.04 สปีชีส์ $M(LH)_2$ จะเกิดขึ้นที่พีเอช 5.25 และเพิ่มขึ้นเรื่อย ๆ จนคงที่ ๆ พีเอช 10.04 และที่จุดนี้จะไม่เหลือ LH_2 เหลืออยู่ ส่วนสปีชีส์ LH^- จะเริ่มเกิดที่พีเอช 6.92 และมากขึ้นจนคงที่ ๆ พีเอช 10.53 ซึ่งจะมีปริมาณมากกว่าสปีชีส์ $M(LH)_2$

เมื่อไทเทรตครั้งที่สอง โดยเพิ่มปริมาณคอปเปอร์(II) เป็น 0.0300 โมลในสารละลาย ได้ข้อมูลเช่นเดียวกับการไทเทรตครั้งแรก ดังแสดงในตาราง 4.6 และรูป 4.5 เมื่อนำข้อมูลที่ี้ได้จากการไทเทรตไปคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD จะได้กราฟจากการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ 2 กราฟคือ เมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของโลหะคอปเปอร์(II) (รูปที่ 4.13) และเมื่อวัดที่เปอร์เซ็นต์ของ SAG8 (รูปที่ 4.14) พบว่าสปีชีส์ MLH^+ เริ่มเกิดที่พีเอช 4.00 และเกิดมากที่สุดที่พีเอช 6.00 จากนั้นจะลดลงเรื่อย ๆ จนหมดไปที่พีเอช 9.64 สปีชีส์ $M(LH)_2$ เริ่มเกิดที่พีเอช 5.52 และพบมากที่สุดที่พีเอช 8.78 จากนั้นจะลดลงเรื่อย ๆ จนหมดไปที่พีเอช 11.43 ในการไทเทรตครั้งที่สองนี้เกิดสปีชีส์ใหม่ที่ต่างจากการไทเทรตครั้งแรกนั่นคือ $M(LH)OH$ ซึ่งเริ่มเกิดที่พีเอช 6.00 และจะเพิ่มขึ้นจนคงที่ ๆ พีเอช 11.44 ส่วนสปีชีส์ LH^- จะเริ่มเกิดที่พีเอช 7.00 และมากขึ้นจนคงที่ ๆ พีเอช 11.23 ซึ่งที่จุดนี้จะไม่เหลือเพียงสปีชีส์ $M(LH)OH$, LH^- และ

$M(LH)_2$ อีกเป็นปริมาณน้อยมาก

จากการไทเทรตในตอน 2 และ 3 เมื่อสารละลายอยู่ในสภาวะเบส สารละลายจะมีสีส้มเกิดการตกตะกอนโดยในการทดลองตอนที่ 3 จะเกิดตะกอนมากกว่า

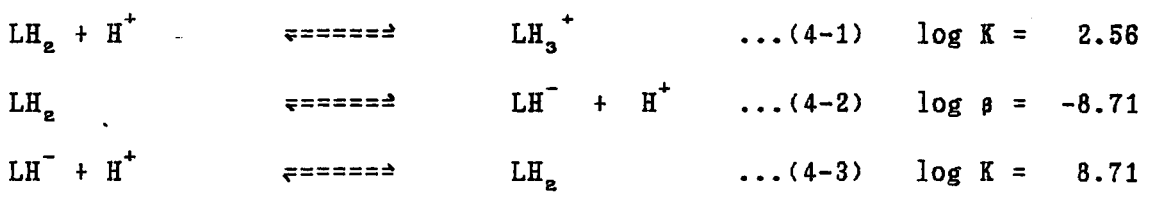
จากนั้นนำข้อมูลจากการไทเทรตมาคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD จะได้ค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน ($\log \beta$) ดังตารางที่ 4.7

ตารางที่ 4.7

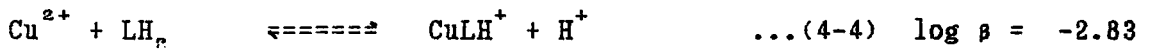
ตอนที่	สปีชีส์	แสดงค่าคงที่ของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน	ค่าจากเอกสารอ้างอิงที่ 11	หมู่ที่เกิดการโปรโตเนชัน
2	LH_3^+	2.56	1-3	N ตัวที่ 4
2	LH^-	8.71	8-11	O ตัวที่ 1
3	$ZnLH^+$	5.64	-	
3	$Zn(LH)OH$	-10.57	-	
4	$CuLH^+$	5.88	-	
4	$Cu(LH)_2$	5.50	-	
4	$Cu(LH)OH$	-10.56	-	

ค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน สามารถหาได้จากการคำนวณตามวิธีทดลองในบทที่ 3 ซึ่งจากการสมมุติโครงสร้างโมเลกุล จะได้ปฏิกิริยาที่เป็นไปได้ดังนี้

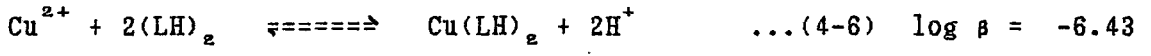
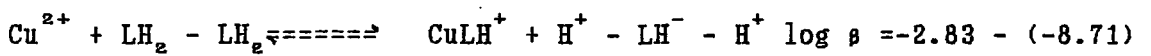
ในขั้นแรกสมมุติให้ SAGB ที่เป็นลิแกนด์อิสระ (Free Ligand) มีโครงสร้างเป็น LH_2



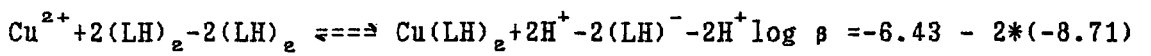
จากค่า log β ของการโปรตอนเนชั่น และดีโปรตอนเนชั่น เมื่อเทียบกับค่าจากเอกสารอ้างอิง ค่า log β เท่ากับ 2.56 น่าจะเป็นค่าคงที่ของปฏิกิริยาโปรตอนเนชั่นของหมู่ไพริดีน ที่ตำแหน่งไนโตรเจนตัวที่4 และค่า log β เท่ากับ 8.71 น่าจะเป็นค่าคงที่ของปฏิกิริยาโปรตอนเนชั่นของหมู่ฟีนิล ที่ตำแหน่งออกซิเจนตัวที่1 ของSAG8 ซึ่งจากค่า log β ที่ได้ นำไปเป็นค่าตั้งต้นในการศึกษาถึงการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง SAG8 กับโลหะ ซึ่งปฏิกิริยาที่เป็นไปได้ทั้งหมดมีดังนี้



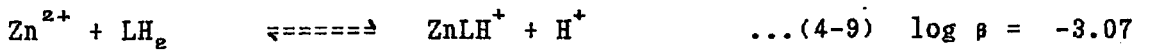
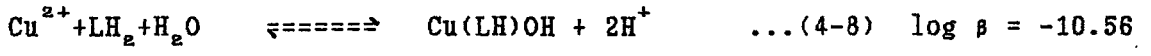
(4-4)-(4-2)



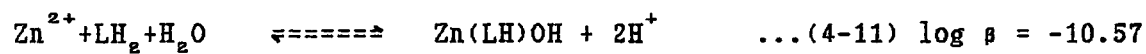
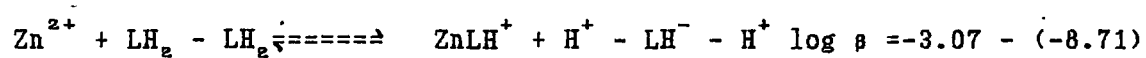
(4-6)-2*(4-2)



$$\log K/2 = 5.50$$



(4-9)-(4-2)



ซึ่งในการสมมติโครงสร้างโมเลกุลอื่น ๆ ไม่สามารถคำนวณหาค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนได้

ตารางที่ 4.1 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตเพื่อทำการวิเคราะห์เบรทลีเล็กโทรด

NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)	NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)
0	1.5717	331.2349	1.9389	10.4540	-203.5782
0.0010	1.5573	331.3823	1.9583	10.5560	-210.6703
0.0218	1.5689	331.0691	2.0071	10.8541	-229.3491
0.1218	1.5836	329.8717	2.0501	10.9745	-236.8648
0.2218	1.6095	328.3797	2.1335	11.1425	-248.2673
0.3218	1.6343	326.6665	2.2335	11.3053	-256.8882
0.4218	1.6740	325.0455	2.3335	11.4308	-263.6119
0.5218	1.7021	323.0560	2.4335	11.5029	-268.8434
0.6218	1.7323	321.0850	2.5335	11.5774	-273.0986
0.7218	1.7653	318.9482	2.6335	11.6360	-276.4881
0.8218	1.8279	316.0745	2.7335	11.6898	-279.7301
0.9218	1.8530	313.4956	2.8335	11.7384	-282.8433
1.0218	1.9012	310.8062	2.9335	11.7842	-285.4959
1.1218	1.9565	307.3799	3.0335	11.8276	-288.4248
1.2218	2.0573	303.2352	3.1335	11.8673	-290.6353
1.3218	2.1175	299.0352	3.2335	11.9094	-293.0116
1.4218	2.1889	293.5089	3.3335	11.9451	-295.3142
1.5218	2.3001	286.7301	3.4335	11.9717	-296.9352
1.6218	2.4657	277.0038	3.5335	11.9897	-297.7273
1.7218	2.6489	264.0356	3.6335	12.0026	-298.6852
1.8218	3.1303	236.7727	3.7335	12.0368	-300.8773
1.8744	5.2060	113.7212	3.8335	12.0594	-301.9825
1.8832	7.4461	-33.9405	3.9335	12.0777	-303.1431
1.8850	7.7146	-55.2718	4.0335	12.1064	-304.7457

ตารางที่ 4.1 ต่อ

1.8878	8.6293	-98.8372	4.1335	12.1220	-305.7773
1.8893	8.8700	-112.5239	4.2335	12.1370	-306.9378
1.8920	9.2307	-135.0158	4.3335	12.1492	-307.6562
1.8951	9.4733	-147.0078	4.4335	12.1669	-308.6693
1.9000	9.8034	-166.8655	4.5335	12.1834	-309.6641
1.9056	9.9229	-173.1101	4.6335	12.1993	-310.4009
1.9204	10.1663	-187.0179	4.7335	12.2127	-311.3588

ตารางที่ 4.2 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8 ด้วย NaOH

NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)	NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)
0	1.5637	330.6454	2.0435	10.7579	-226.1991
0.0010	1.5726	330.3138	2.0749	10.8737	-235.7595
0.0323	1.5793	329.7612	2.1409	11.0997	-245.2647
0.1323	1.6092	328.4718	2.2111	11.1941	-252.3015
0.2323	1.6248	327.4586	2.3111	11.3624	-260.6830
0.3323	1.6416	326.2244	2.4111	11.4503	-266.4118
0.4323	1.6715	324.1060	2.5111	11.5447	-271.5513
0.5323	1.7057	322.3929	2.6111	11.6156	-275.3644
0.6323	1.7399	319.9245	2.7111	11.6507	-278.8643
0.7323	1.7742	318.1745	2.8111	11.7210	-282.0327
0.8323	1.8157	315.5035	2.9111	11.7677	-284.7222
0.9323	1.8603	312.5746	3.0111	11.8120	-287.1169
1.0323	1.9305	308.7614	3.1111	11.8385	-288.2406
1.1323	1.9919	305.0036	3.2111	11.8462	-289.5300
1.2323	2.0588	301.1720	3.3111	11.8746	-291.9432
1.3323	2.1422	296.6221	3.4111	11.9195	-293.8958
1.4323	2.2286	290.9116	3.5111	11.9510	-295.4800
1.5323	2.3395	283.8748	3.6111	11.9708	-296.7326
1.6323	2.4715	273.2091	3.7111	11.9904	-297.8194
1.7323	2.7564	258.4356	3.8111	12.0120	-299.2563
1.8144	3.1892	231.3201	3.9111	12.0356	-300.6747
1.8631	3.8200	183.8311	4.0111	12.0704	-302.9957
1.8858	4.9913	112.2476	4.1111	12.0896	-304.0273
1.8928	5.4397	78.6479	4.2111	12.0985	-304.6167

ตารางที่ 4.2 ต่อ

1.8986	5.8520	66.7296	4.3111	12.1089	-305.3536
1.9039	5.9953	61.2586	4.4111	12.1263	-306.6983
1.9160	7.6379	-41.6035	4.5111	12.1513	-307.4536
1.9191	8.4165	-105.2661	4.6111	12.1586	-308.4114
1.9209	9.3230	-148.0025	4.7111	12.1736	-309.1851
1.9219	9.5557	-160.7497	4.8111	12.1843	-309.4246
1.9238	9.7756	-164.5076	4.9111	12.1880	-309.8114
1.9273	9.8428	-169.2233	5.0111	12.2029	-310.9167
1.9435	9.8734	-179.7048			

ตารางที่ 4.3 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8 กับ บิงค์ (II) ปริมาตร 0.0196 โมล
ด้วย HNO_3

HNO ₃ (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)	HNO ₃ (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)
0	12.2039	-310.6956	3.8277	11.3495	-258.1961
0.0010	12.1932	-310.2595	3.9277	11.3034	-255.5804
0.0277	12.1919	-309.9588	4.0277	11.1376	-244.8226
0.1277	12.1895	-309.4798	4.1277	11.0273	-237.7858
0.2277	12.1736	-308.8535	4.2277	10.8584	-227.8385
0.3277	12.1669	-308.3930	4.3277	10.5902	-209.4729
0.4277	12.1602	-307.9509	4.4142	10.0603	-172.9444
0.5277	12.1492	-307.1220	4.4570	9.5108	-146.4736
0.6277	12.1345	-306.7167	4.4798	9.4012	-130.3000
0.7277	12.1275	-305.4825	4.5324	9.0047	-99.0582
0.8277	12.1098	-304.8009	4.5683	8.2778	-34.2168
0.9277	12.1018	-304.1562	4.5838	7.3923	94.2688
1.0277	12.0719	-302.7378	4.5902	5.2732	123.0422
1.1277	12.0710	-302.4431	4.5916	4.1819	189.6337
1.2277	12.0356	-300.8405	4.5926	3.8768	192.8020
1.3277	12.0319	-299.9562	4.5941	3.8551	192.7099
1.4277	12.0096	-299.0721	4.6148	3.8313	207.2072
1.5277	11.9977	-298.3721	4.7148	3.3954	232.0385
1.6277	11.9965	-297.7273	4.7720	3.1132	248.4147
1.7277	11.9656	-296.1984	4.8235	2.8163	255.7462
1.8277	11.9586	-294.8721	4.8686	2.7143	261.3829
1.9277	11.9317	-294.0984	4.9685	2.6816	267.5908
2.0277	11.9421	-294.7431	5.0685	2.4632	276.3960

ตารางที่ 4.3 ต่อ

2.1277	11.9338	-294.1168	5.1685	2.4095	281.2038
2.2277	11.9244	-292.9011	5.2685	2.3475	286.2327
2.3277	11.8874	-289.8248	5.3685	2.2381	290.2853
2.4277	11.8544	-289.1801	5.4685	2.1847	293.5274
2.5277	11.8303	-287.4669	5.5685	2.1639	296.5852
2.6277	11.8068	-286.5274	5.6685	2.0885	298.9799
2.7277	11.7759	-284.5564	5.7685	2.0643	302.4615
2.8277	11.7533	-282.9906	5.8685	2.0023	304.3036
2.9277	11.7191	-281.2222	5.9685	1.9696	306.4772
3.0277	11.6831	-279.2144	6.0685	1.9336	309.0193
3.1277	11.6687	-277.6486	6.1685	1.9110	310.7877
3.2277	11.6290	-276.0275	6.2685	1.8914	312.1140
3.3277	11.5798	-272.9513	6.3685	1.8481	313.4956
3.4277	11.5676	-270.6302	6.4685	1.8297	314.9140
3.5277	11.4949	-267.7197	6.5685	1.8249	316.2771
3.6277	11.4684	-265.3066	6.6685	1.7879	317.4745
3.7277	11.4277	-260.5909			

ตารางที่ 4.4 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8 กับซิงค์(II) ปริมาตร 0.0294 โมล
ด้วย NaOH

NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)	NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)
0	1.8026	316.4982	3.0916	11.4525	-265.5276
0.0010	1.7943	317.1982	3.1916	11.4943	-268.2539
0.0343	1.7980	316.8298	3.2916	11.5279	-270.4092
0.1343	1.8267	315.3561	3.3916	11.5637	-272.6013
0.2343	1.8493	313.8456	3.4916	11.5970	-274.3144
0.3343	1.8646	312.5377	3.5916	11.6302	-276.3960
0.4343	1.8963	311.2114	3.6916	11.6501	-277.8512
0.5343	1.9150	309.2956	3.7916	11.6751	-279.0854
0.6343	1.9571	307.4720	3.8916	11.7072	-280.6328
0.7343	1.9941	305.0036	3.9916	11.7240	-282.2538
0.8343	2.0332	302.8852	4.0916	11.7533	-283.7275
0.9343	2.0738	300.0299	4.1916	11.7741	-284.7959
1.0343	2.1175	297.5615	4.2916	11.7943	-285.9380
1.1343	2.1737	293.6010	4.3916	11.8071	-286.6748
1.2343	2.2512	289.6037	4.4916	11.8224	-288.1116
1.3343	2.3047	285.8275	4.5916	11.8376	-288.7748
1.4343	2.3976	280.6328	4.6916	11.8550	-290.2853
1.5343	2.5246	274.7565	4.7916	11.8706	-290.6353
1.6343	2.6147	267.3329	4.8916	11.8834	-291.4090
1.7343	2.7842	257.4593	4.9916	11.9048	-293.0116
1.8343	3.0350	242.3726	5.0916	11.9244	-293.7116
1.9258	3.5530	214.2624	5.1916	11.9338	-294.7247
1.9716	6.0258	65.8454	5.2916	11.9470	-295.3694

ตารางที่ 4.4 ต่อ

1.9783	6.9556	61.5902	5.3916	11.9595	-295.9589
2.0054	7.1498	-7.4697	5.4916	11.9778	-296.8431
2.0134	7.2372	-12.5722	5.5916	11.9827	-297.5984
2.0396	7.3639	-33.5720	5.6916	11.9955	-298.0589
2.0920	9.0130	-129.7290	5.7916	12.0023	-298.6115
2.1027	9.3734	-142.8631	5.8916	12.0142	-299.4773
2.1128	9.7057	-160.6392	5.9916	12.0270	-300.0852
2.1231	9.7686	-171.4338	6.0916	12.0395	-300.6747
2.1661	10.0820	-188.3810	6.1916	12.0432	-301.0799
2.2031	10.4387	-204.5177	6.2916	12.0563	-301.7062
2.2322	10.5472	-210.7992	6.3916	12.0585	-302.2404
2.2976	10.6440	-220.5070	6.4916	12.0707	-302.7931
2.3976	10.8871	-232.0017	6.5916	12.0783	-303.0325
2.4916	11.0090	-239.5910	6.6916	12.0881	-303.6957
2.5916	11.1275	-246.3147	6.7916	12.0945	-304.2483
2.6916	11.2411	-251.7857	6.8916	12.1052	-304.8009
2.7916	11.2940	-256.1146	6.9916	12.1150	-305.3904
2.8916	11.3483	-259.4119	7.0916	12.1241	-305.7404
2.9916	11.3865	-261.7698			

ตารางที่ 4.5 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8กับคลอไรด์ (IF) ปริมาตร 0.0100

โมล ด้วย NaOH

NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)	NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)
0	1.7693	318.4324	2.3830	11.5007	-268.7881
0.0010	1.7720	318.3587	2.4830	11.5499	-271.5328
0.0857	1.7879	317.1061	2.5830	11.5960	-274.1486
0.1857	1.8490	315.3192	2.6830	11.6272	-276.6170
0.2857	1.8566	313.2930	2.7830	11.6745	-278.9380
0.3857	1.8914	311.1930	2.8830	11.7057	-280.6143
0.4857	1.9110	309.3509	2.9830	11.7323	-282.1064
0.5857	1.9660	306.5509	3.0830	11.7533	-283.8748
0.6857	2.0319	303.3457	3.1830	11.7762	-285.2748
0.7857	2.0561	300.5826	3.2830	11.8053	-286.7485
0.8857	2.1327	296.5668	3.3830	11.8315	-288.2958
0.9857	2.1795	292.9195	3.4830	11.8499	-289.4195
1.0857	2.2531	288.3327	3.5830	11.8633	-290.4695
1.1857	2.3704	282.2169	3.6830	11.8899	-291.8326
1.2857	2.5066	274.1118	3.7830	11.9088	-293.0116
1.3857	2.7332	261.9724	3.8830	11.9280	-294.0247
1.4855	3.0741	239.8674	3.9830	11.9436	-295.1300
1.5559	3.8248	193.7415	4.0830	11.9977	-298.4642
1.5826	5.2137	97.1793	4.1830	12.0218	-300.2141
1.5896	6.2039	31.7852	4.2830	12.0349	-301.0984
1.5926	6.5396	27.4747	4.3830	12.0530	-302.1483
1.5962	6.6413	20.5853	4.4830	12.0710	-302.7378
1.6079	6.8077	-5.3513	4.5830	12.0710	-302.5904

ตารางที่ 4.5 ต่อ

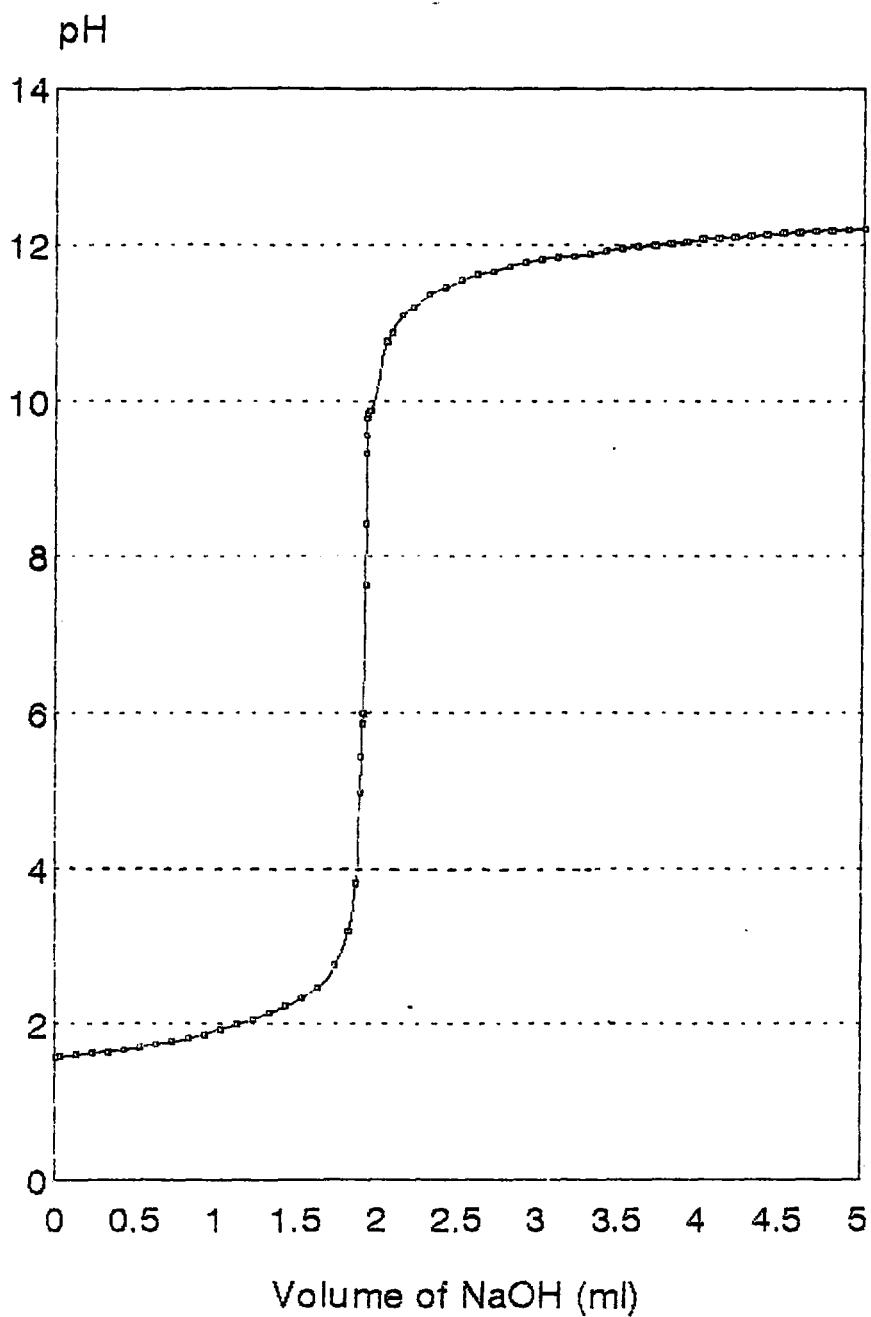
1.6288	8.2793	-78.9426	4.6830	12.0786	-303.2167
1.6342	9.2326	-133.9474	4.7830	12.0921	-304.1378
1.6367	9.5114	-152.2577	4.8830	12.1049	-305.2799
1.6403	9.6190	-156.3840	4.9830	12.1229	-306.1641
1.6514	9.7081	-162.8129	5.0830	12.1498	-307.3430
1.6854	10.3117	-197.4441	5.1830	12.1492	-307.4536
1.7027	10.4045	-203.7993	5.2830	12.1458	-307.2693
1.7506	10.6040	-216.5097	5.3830	12.1492	-307.7483
1.8101	10.7992	-227.2859	5.4830	12.1635	-308.4298
1.8830	10.9418	-238.7805	5.5830	12.1748	-309.0562
1.9830	11.1400	-247.1068	5.6830	12.1819	-309.4430
2.0830	11.2613	-254.8988	5.7830	12.1919	-310.0693
2.1830	11.3404	-260.3514	5.8830	12.1990	-310.6956
2.2830	11.4210	-263.8698	5.9830	12.2066	-311.1930

ตารางที่ 4.6 แสดงข้อมูลที่ได้จากการไทเทรต SAG8 กับคอปเปอร์(II) ปริมาตร 0.0300

ไทเทรต ด้วย NaOH					
NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)	NaOH (มิลลิลิตร)	pH	ศักย์ไฟฟ้า (มิลลิโวลต์)
0	1.7897	317.3456	3.1724	11.5450	-270.7776
0.0010	1.7852	317.4561	3.2724	11.5887	-274.4065
0.0558	1.8438	316.8113	3.3724	11.5921	-274.9223
0.1558	1.8215	315.3192	3.4724	11.6380	-276.9117
0.2558	1.8493	313.9008	3.5724	11.6590	-278.1091
0.3558	1.9370	312.1324	3.6724	11.6898	-279.7486
0.4558	1.9040	310.4193	3.7724	11.7203	-281.4249
0.5558	1.9388	308.3746	3.8724	11.7387	-282.6775
0.6558	1.9669	306.8825	3.9724	11.7533	-283.5432
0.7558	2.0051	304.7825	4.0724	11.7814	-285.3485
0.8558	2.0417	302.5352	4.1724	11.7964	-286.3616
0.9558	2.0869	299.5510	4.2724	11.8199	-287.5774
1.0558	2.1401	296.2168	4.3724	11.8379	-288.4616
1.1558	2.1972	292.7537	4.4724	11.8587	-289.8616
1.2558	2.2607	288.8853	4.5724	11.8706	-290.6537
1.3558	2.3337	285.7538	4.6724	11.8871	-291.5379
1.4558	2.4397	279.4907	4.7724	11.8999	-292.5142
1.5558	2.5442	272.2881	4.8724	11.9244	-294.2826
1.6558	2.6865	264.3487	4.9724	11.9549	-295.3694
1.7558	3.0799	250.4778	5.0724	11.9781	-297.1378
1.8063	3.1920	240.8989	5.1724	11.9876	-297.7273
1.9063	4.2586	183.2785	5.2724	11.9977	-298.3168
1.9309	4.8383	121.5133	5.3724	12.0001	-298.4457

ตารางที่ 4.6 ต่อ

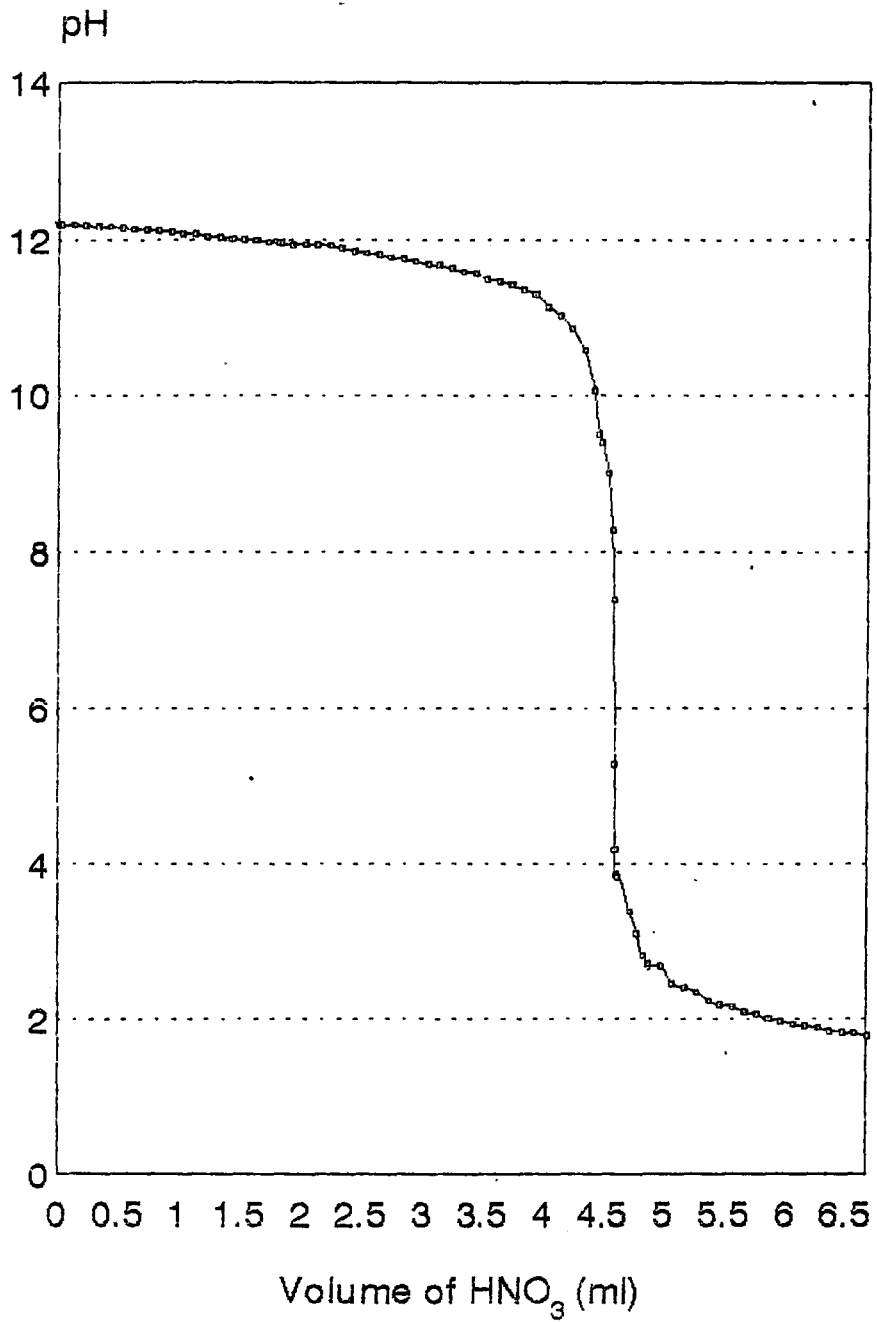
1.9445	5.8331	81.0426	5.4724	12.0075	-299.0721
1.9497	5.8360	72.6980	5.5724	12.0108	-299.2378
2.0497	8.9604	-119.8738	5.6724	12.0331	-300.5273
2.0604	9.6119	-147.0262	5.7724	12.0475	-301.2641
2.0665	9.4528	-148.7025	5.8724	12.0609	-302.3694
2.0790	9.7262	-161.9655	5.9724	12.0743	-303.0878
2.0935	9.7463	-172.9812	6.0724	12.0759	-303.0141
2.1935	10.4445	-205.6782	6.1724	12.0808	-303.4194
2.2318	10.6293	-216.4729	6.2724	12.0963	-304.1746
2.2843	10.7671	-224.5044	6.3724	12.1003	-304.8009
2.3724	10.8948	-232.2964	6.4724	12.1199	-305.9062
2.4724	10.9934	-239.7753	6.5724	12.1272	-306.2746
2.5724	11.1107	-246.4805	6.6724	12.1382	-306.7535
2.6724	11.2109	-252.0251	6.7724	12.1345	-306.6983
2.7724	11.2765	-256.2619	6.8724	12.1403	-306.8641
2.8724	11.3624	-260.2408	6.9724	12.1376	-306.7351
2.9724	11.4161	-264.1277	7.0724	12.1394	-307.0667
3.0724	11.5108	-268.8434			



รูปที่ 4.1

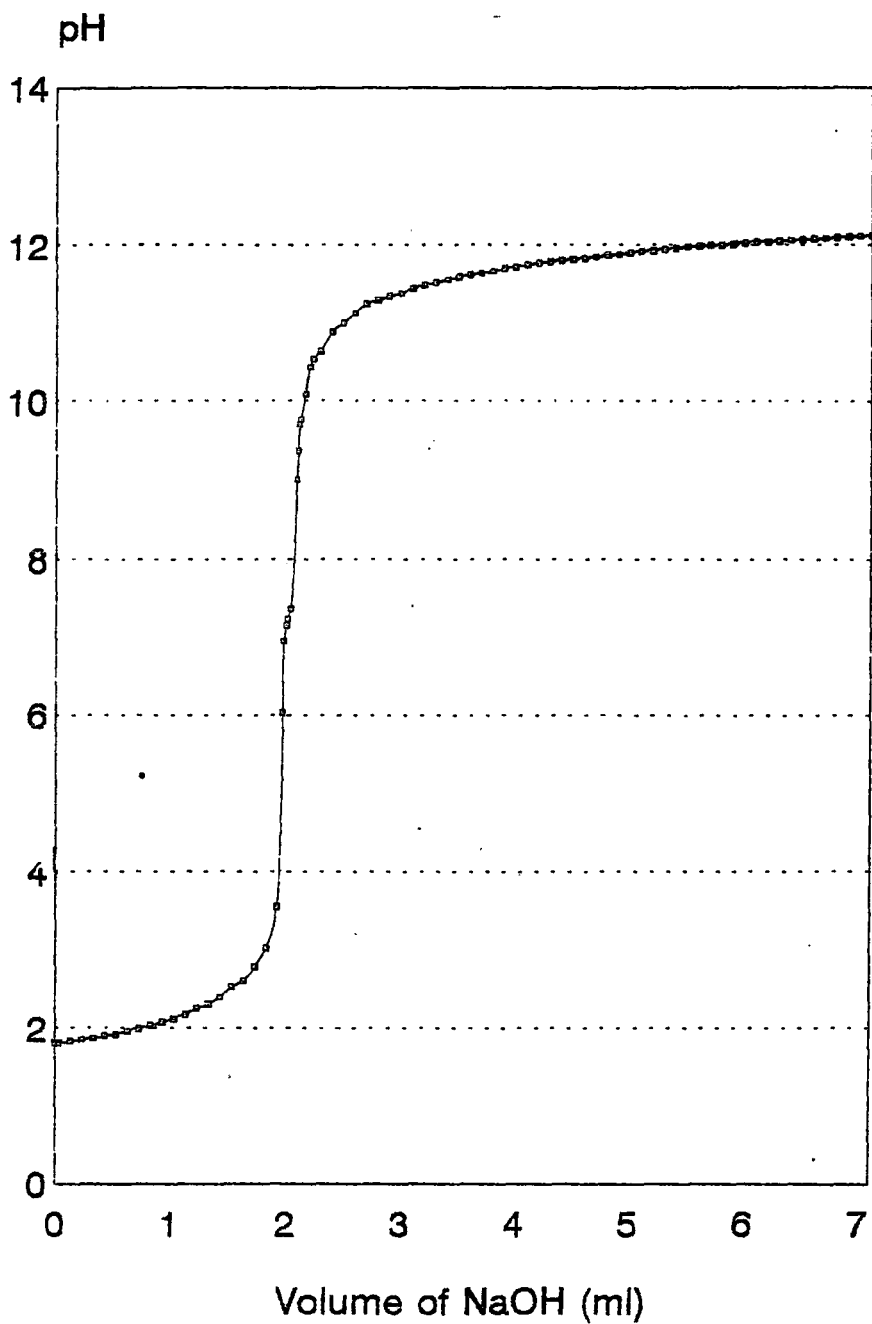
กราฟที่ได้จากการไทเทรต SAG8 ด้วย NaOH

เพื่อศึกษาการโปรตอนเนชั่น



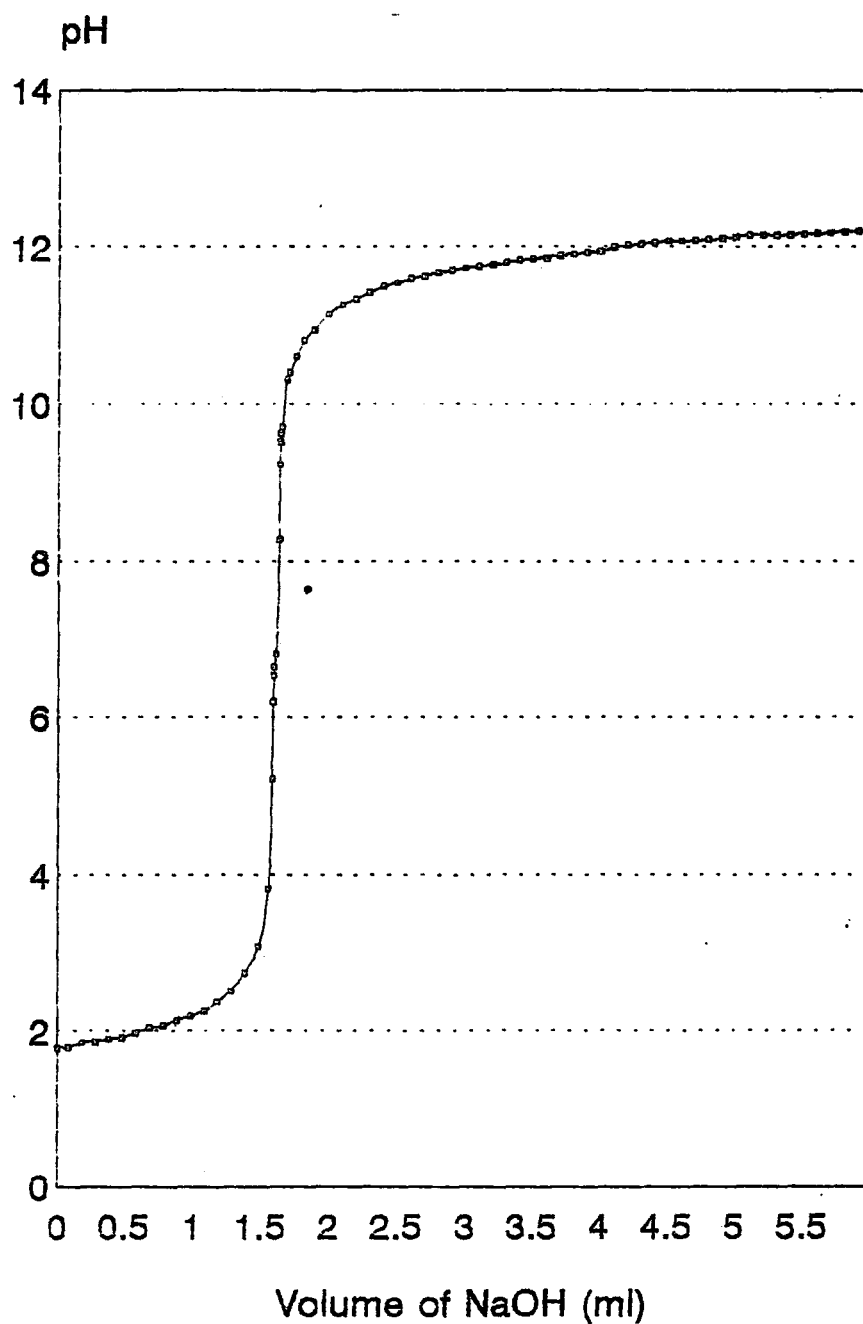
รูปที่ 4.2

กราฟที่ได้จากการไทเทรต SAG8+ซิงค์(II) 0.0196 โมล ด้วย HNO₃



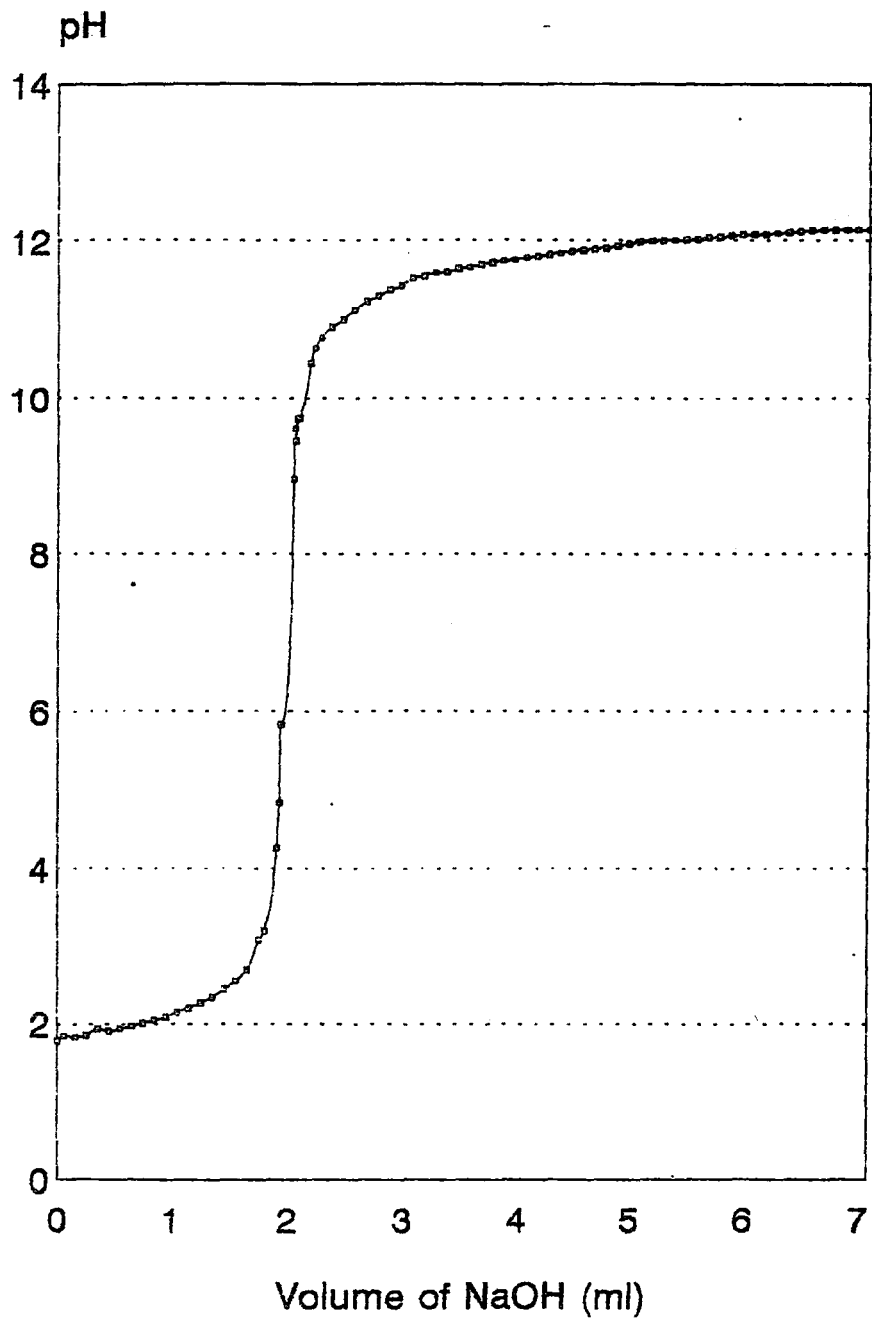
รูปที่ 4.3

กราฟที่ได้จากการไทเทรต SAG8+ซิงค์(II) 0.0294 โมล ด้วย NaOH



รูปที่ 4.4

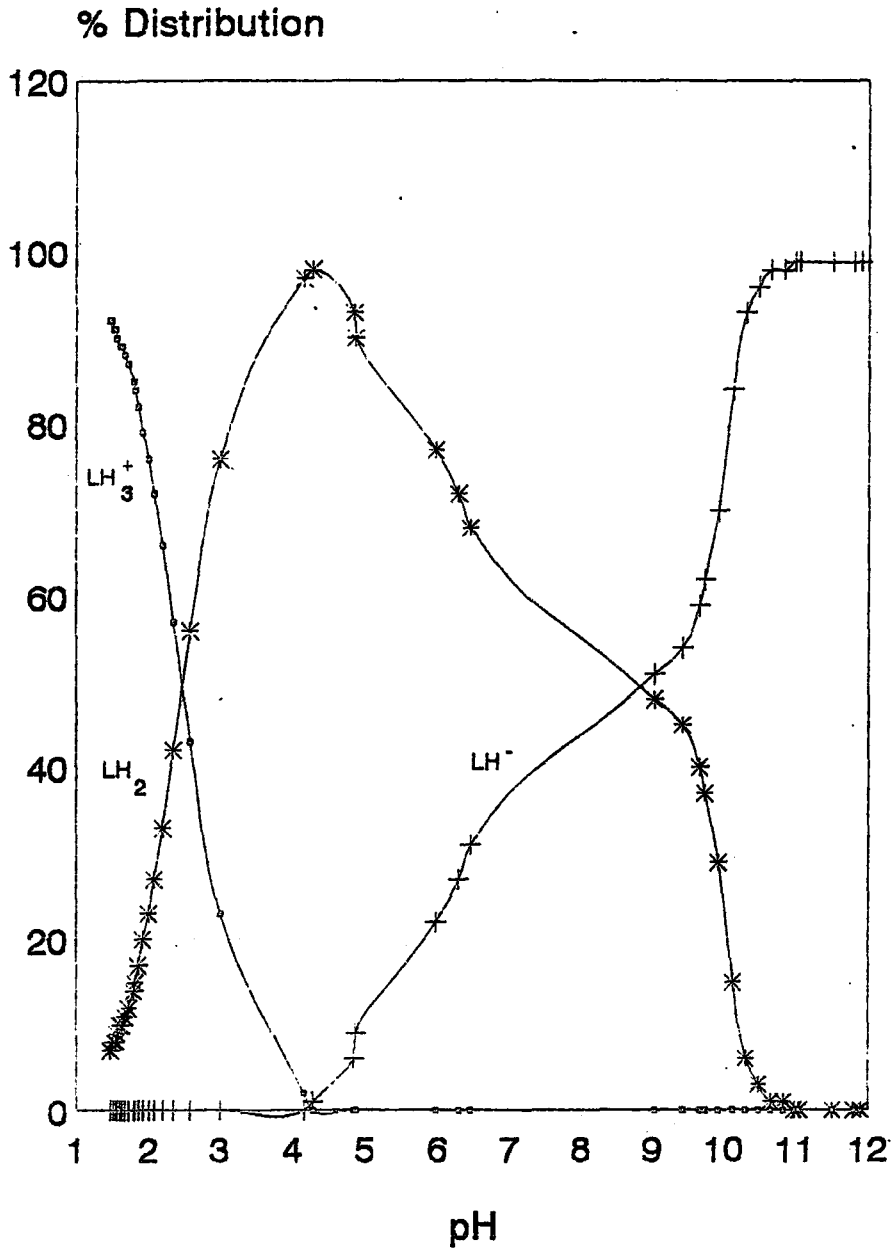
กราฟที่ได้จากการไทเทรต SAG8+คอปเปอร์(II) 0.0100 โมล ด้วย NaOH .



รูปที่ 4.5

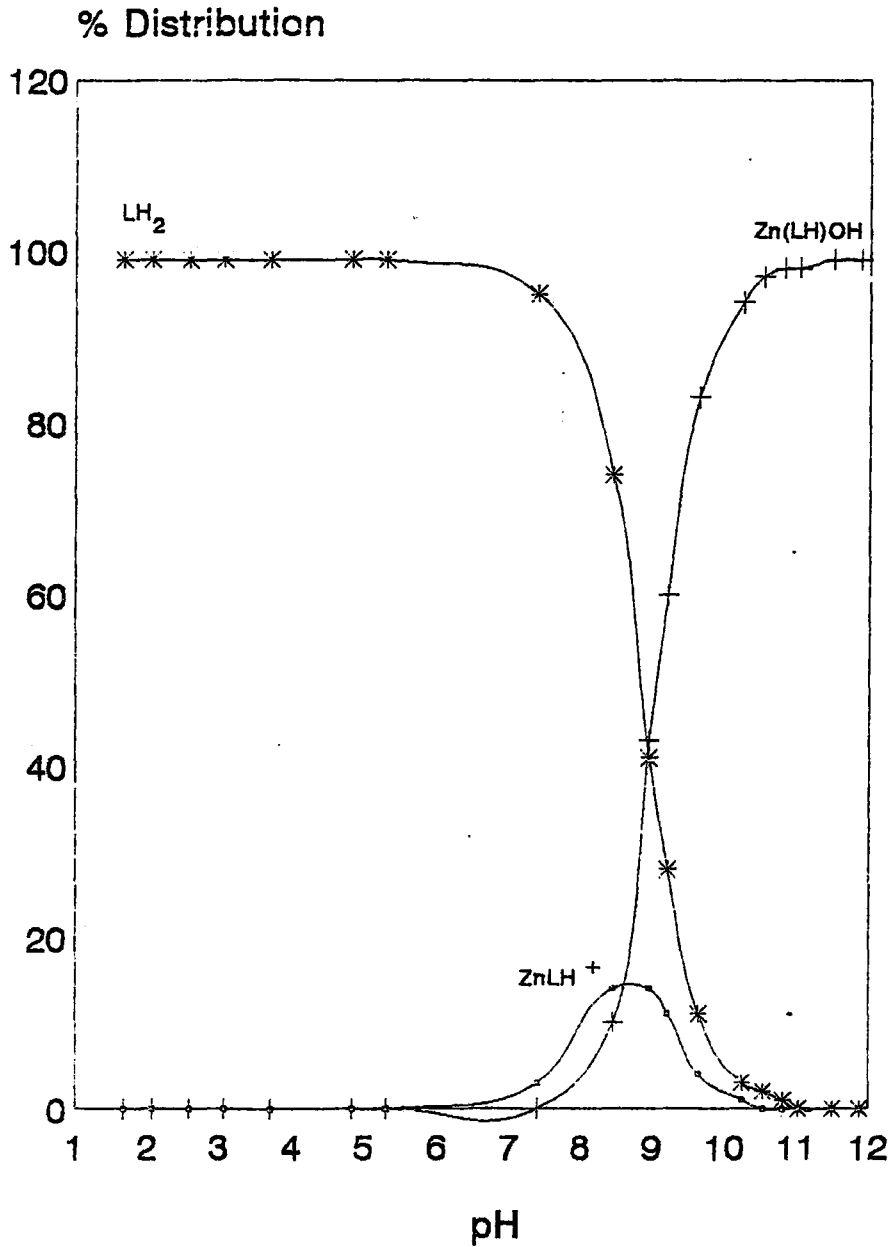
กราฟที่ได้จากการไทเทรต SAG8+คอปเปอร์(II)0.0300โมล ด้วย NaOH

% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF SAG8
PROTONATION CURVE

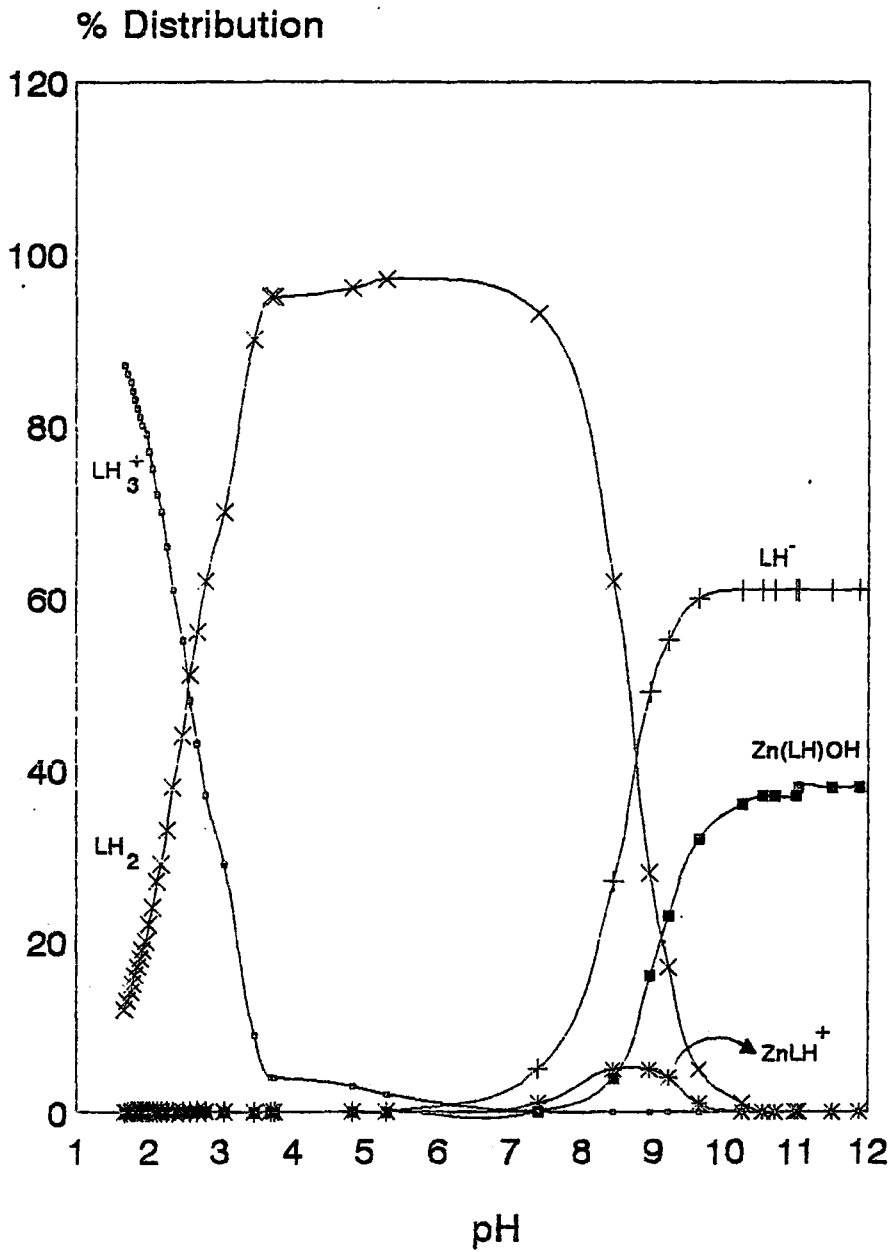


จุด 4.6

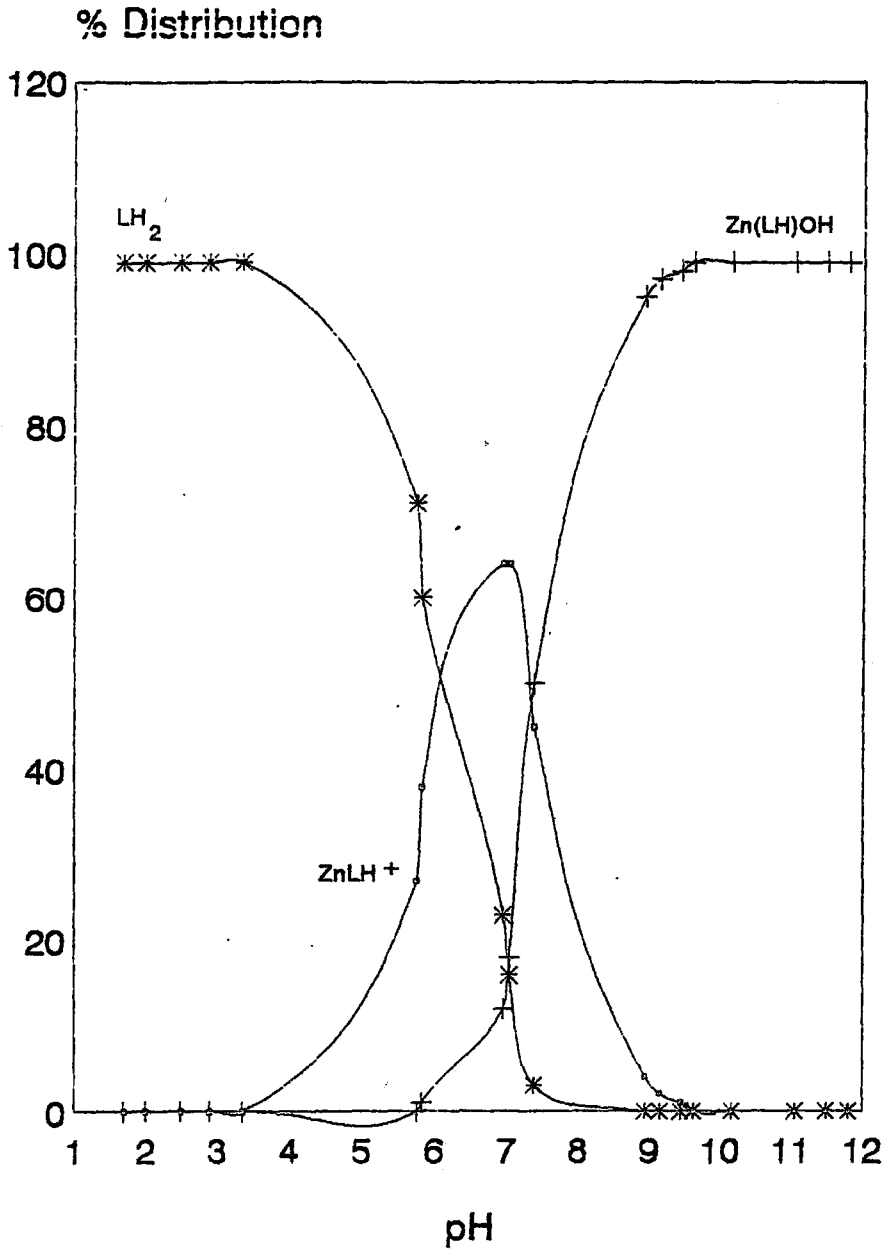
% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF Zn(II)
SAG8 + Zn(II) 0.0198 mol



% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF SAG8
SAG8 + Zn(II)0.0198 mol

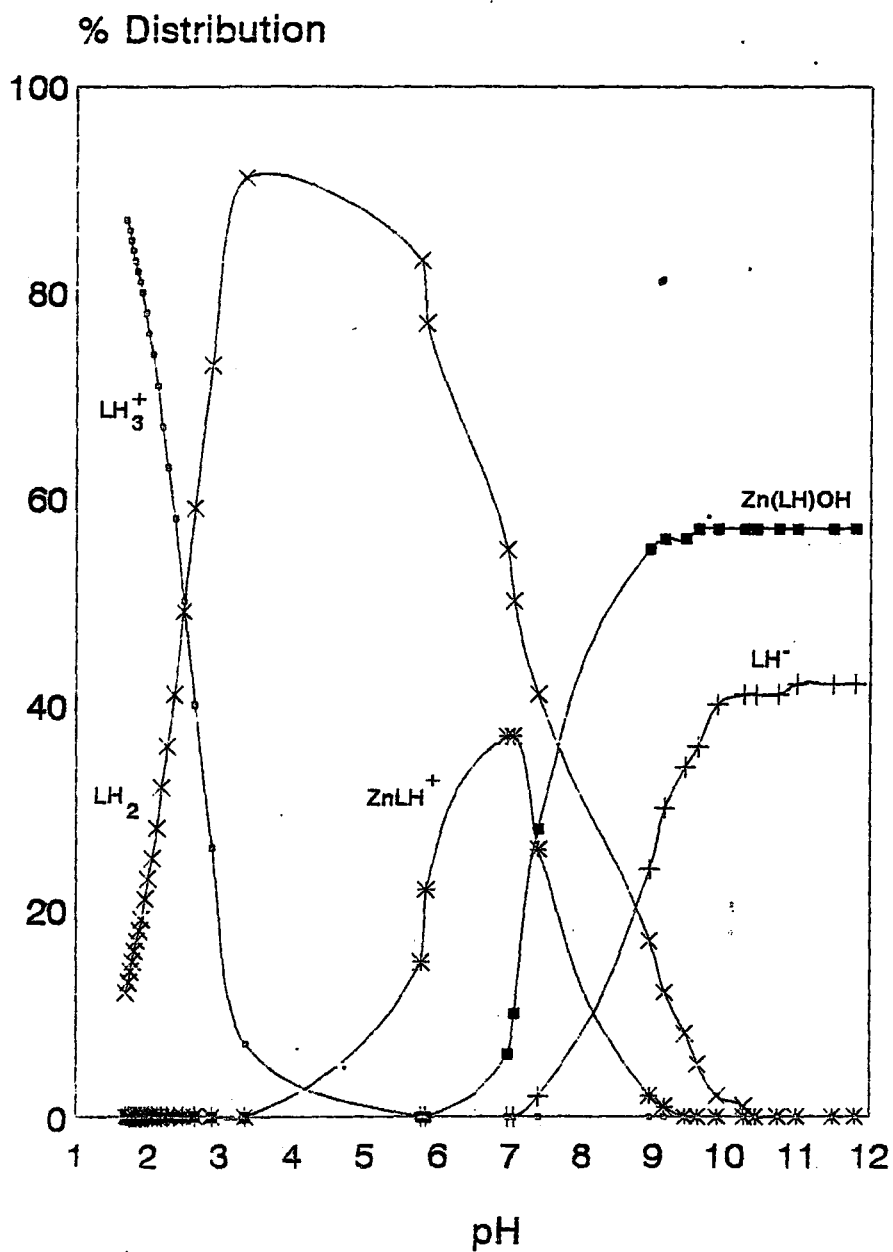


% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF Zn(II)
9AG8 + Zn(II)0.0284 mol

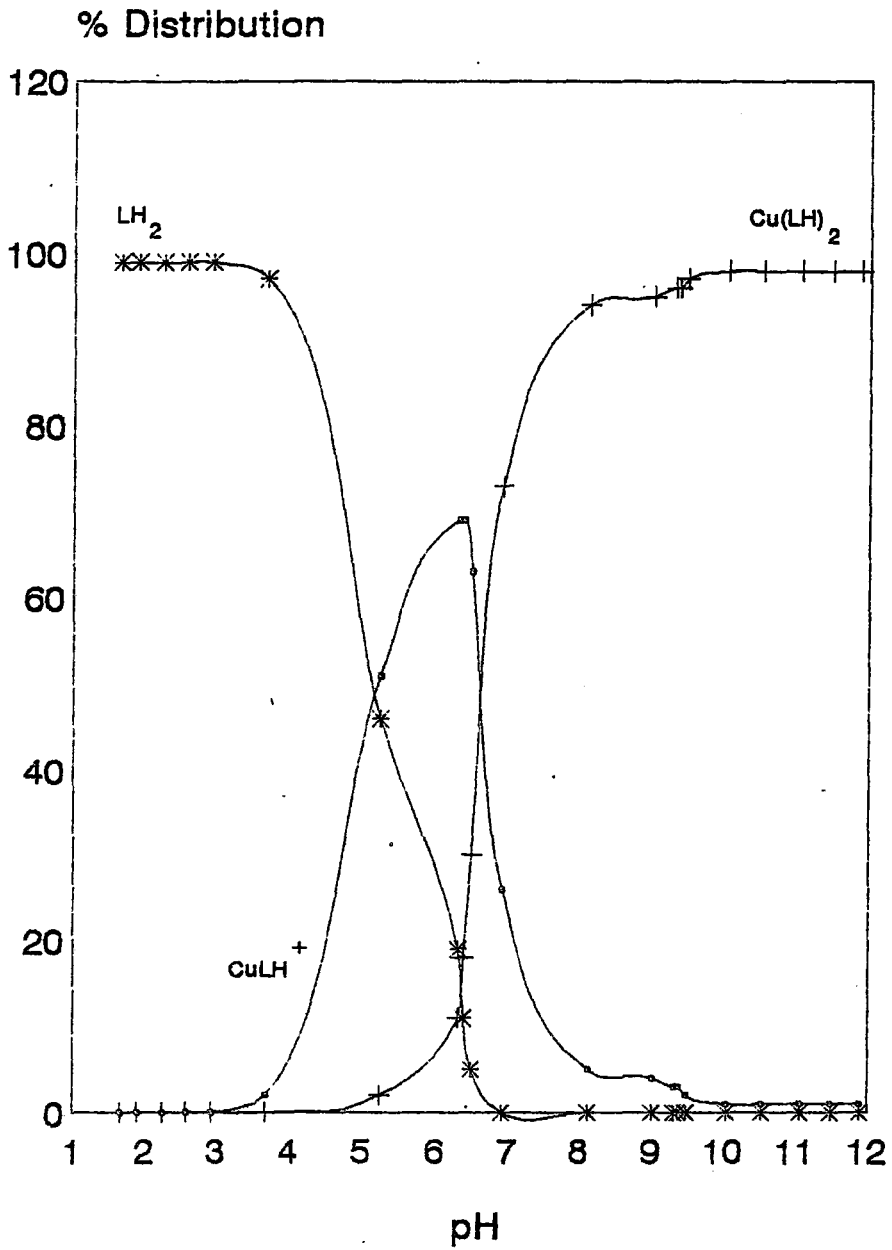


จุด 4.9

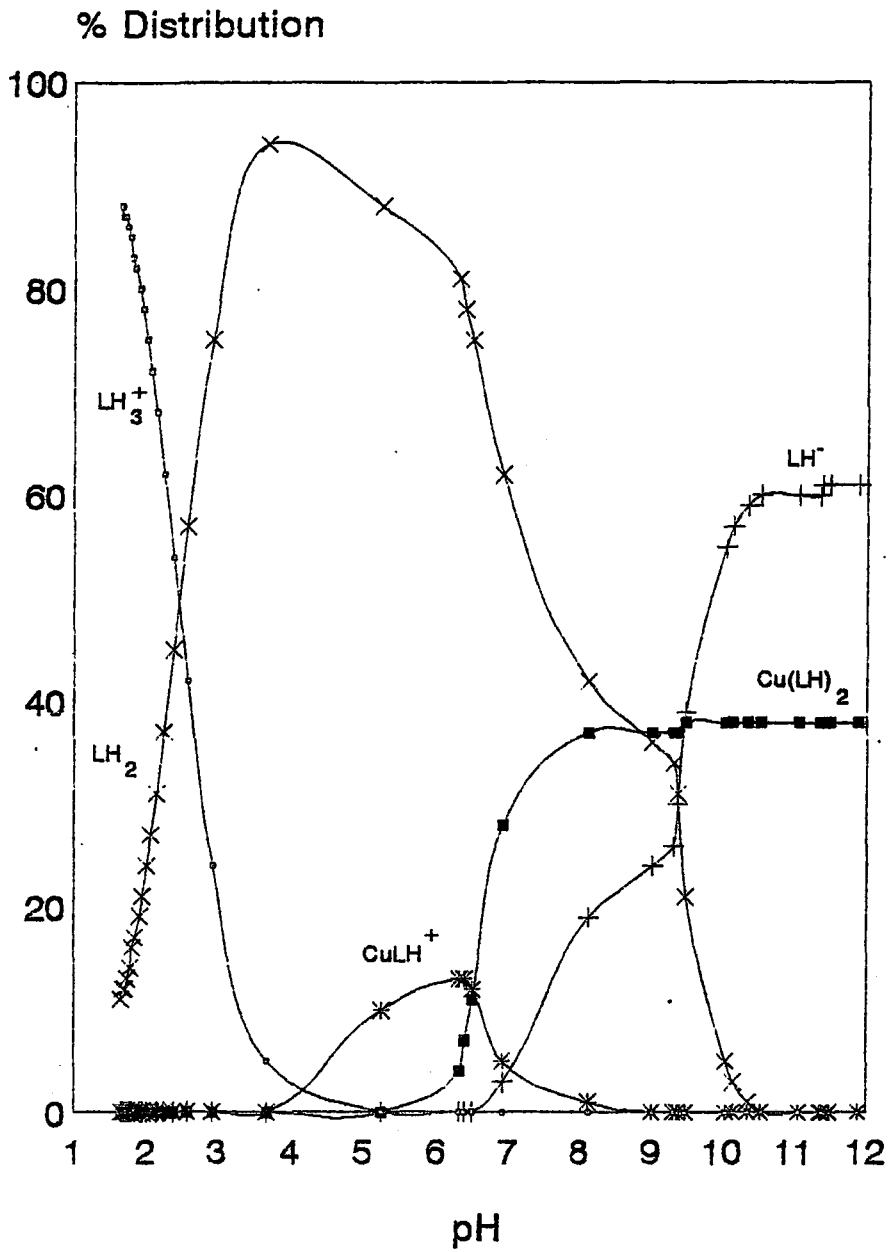
% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF SAG8
SAG8 + Zn(II)0.0294 mol



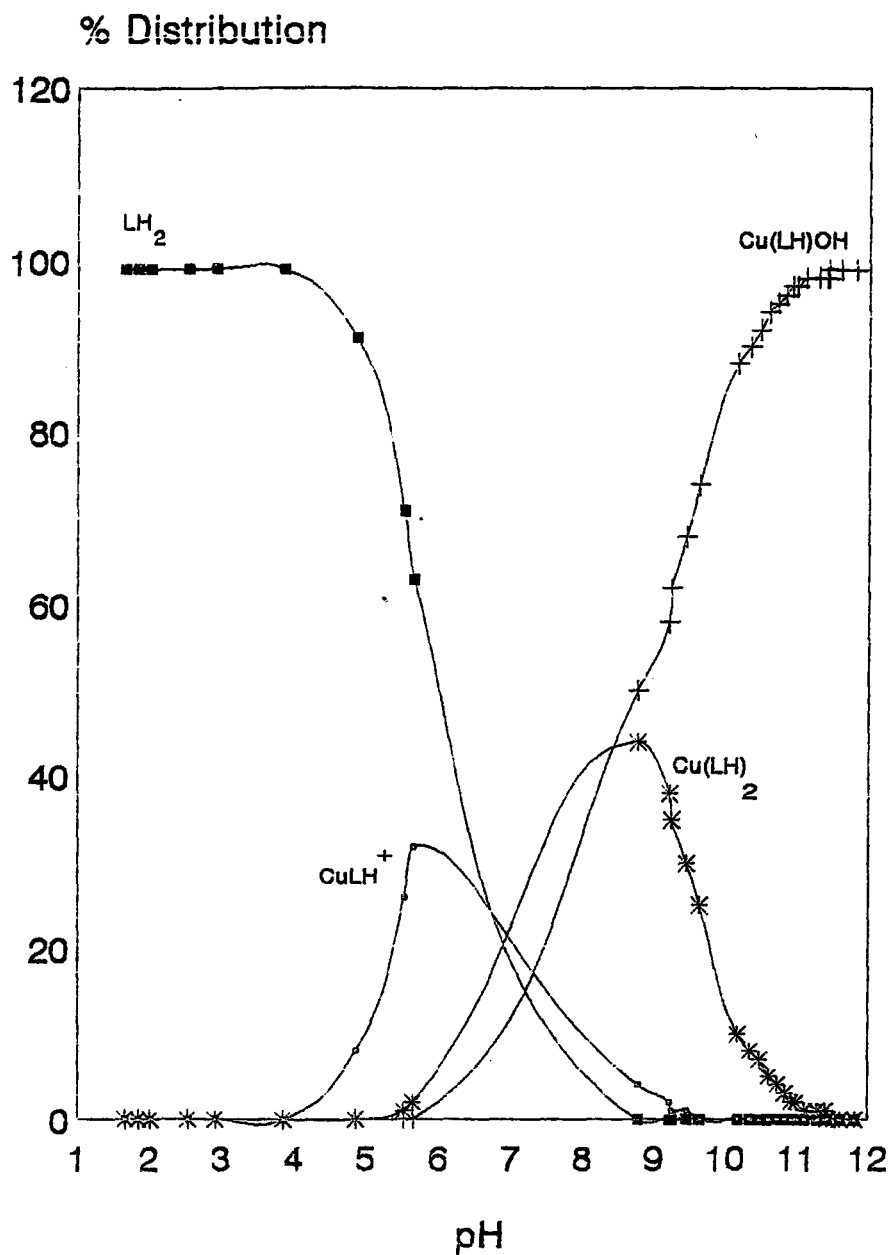
% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF Cu(II)
SAGB + Cu(II) 0.0100 mol



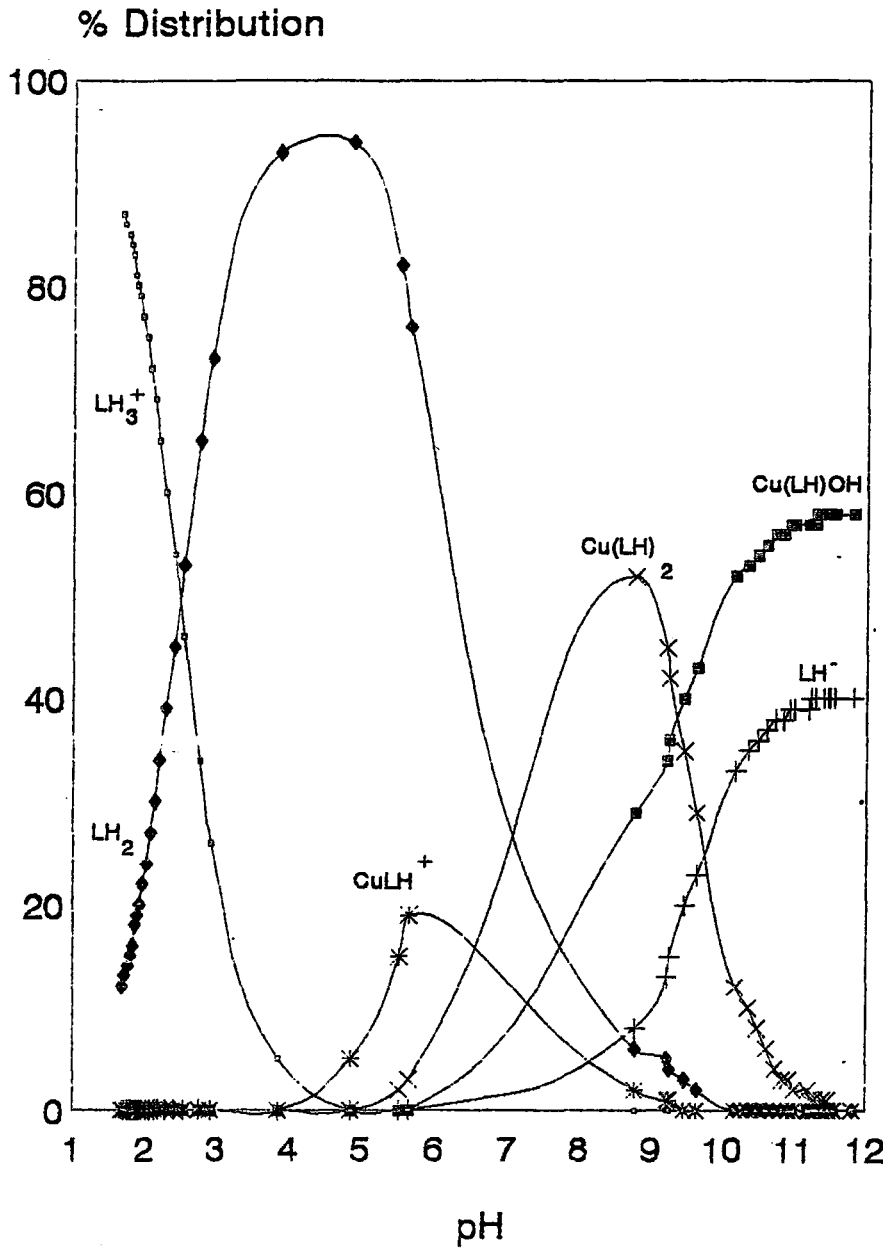
% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF SAG8
SAG8 + Cu(II)0.0100 mol

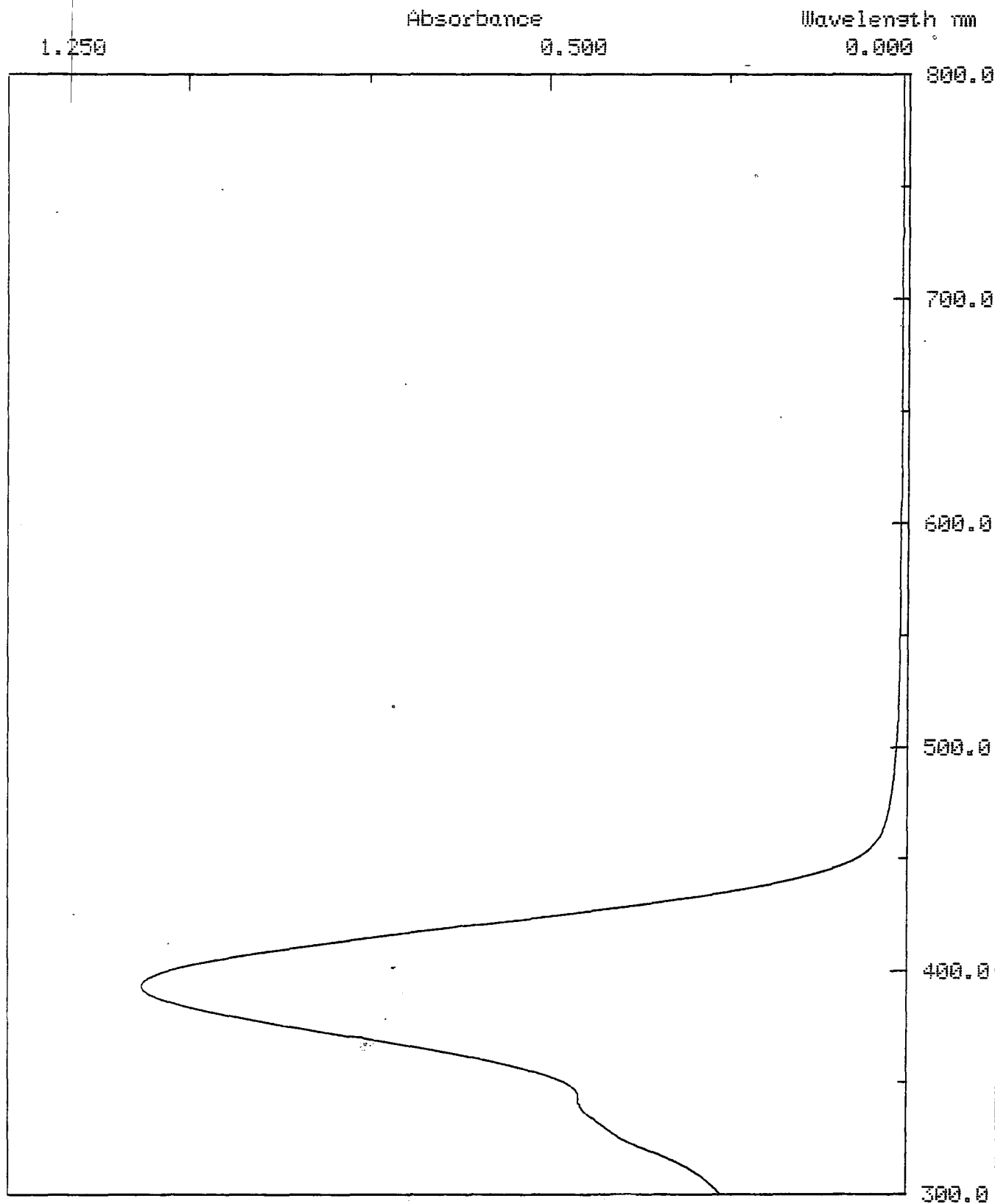


% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF Cu(II)
 SAGB + Cu(II) 0.0300 mol



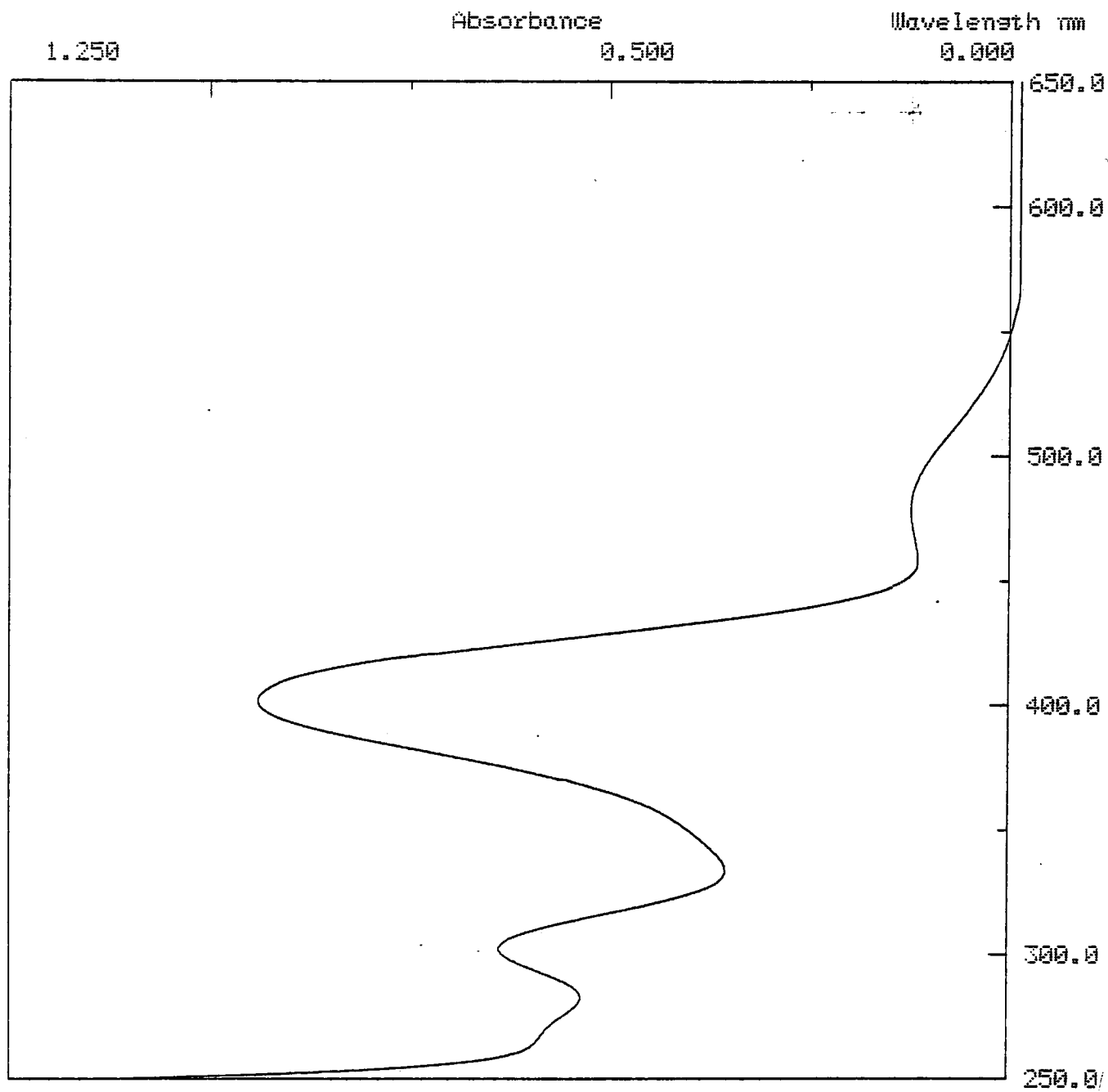
% FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF SAG8
SAG8 + Cu(II)0.0300 mol



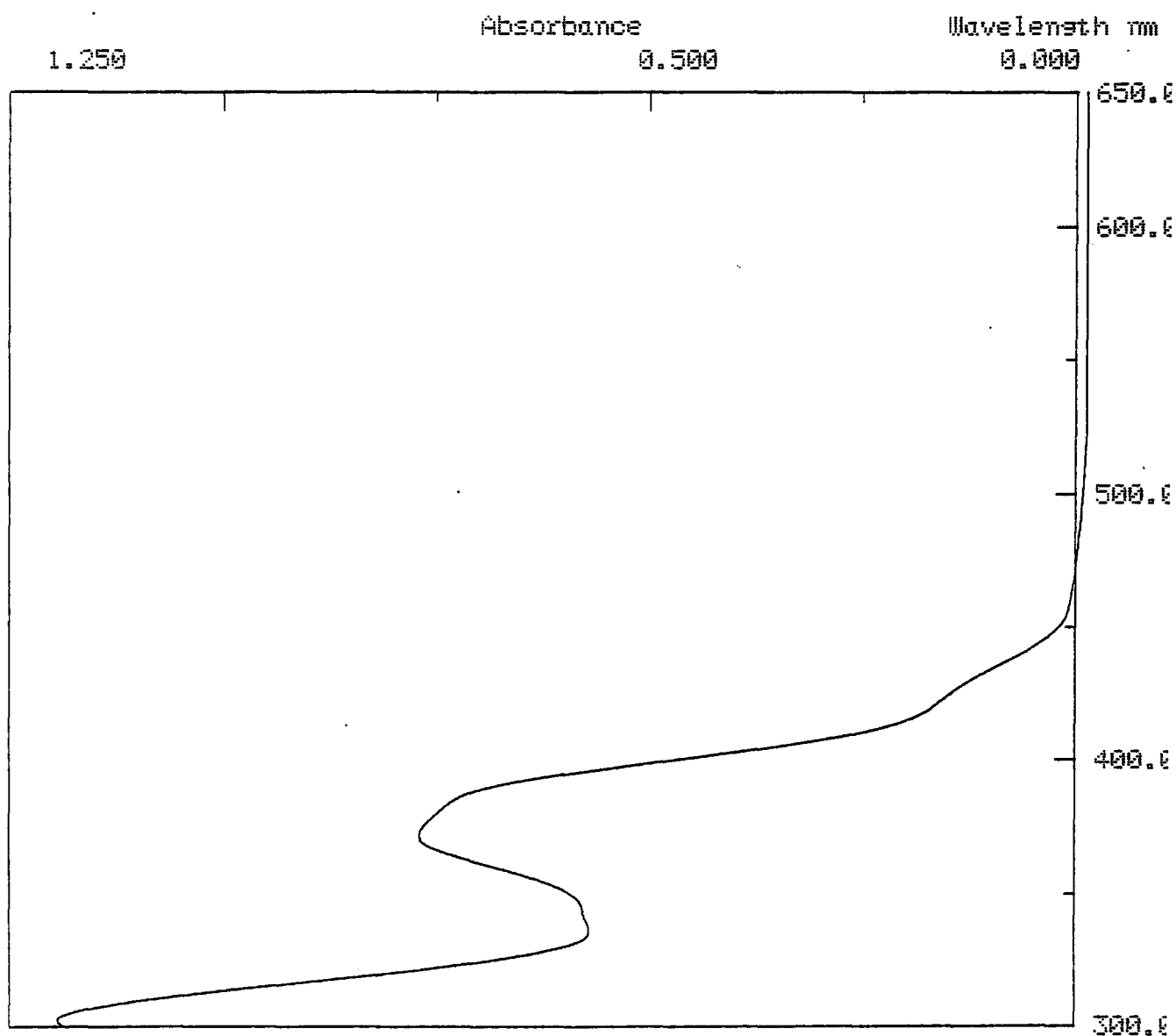


รูปที่ 4.16 ทำการวัด SAG8 ที่พีเอช 5.7 สารละลายมีสีเหลืองอ่อน

โดยจุดสูงสุดของกราฟอยู่ที่ 392.5 nm

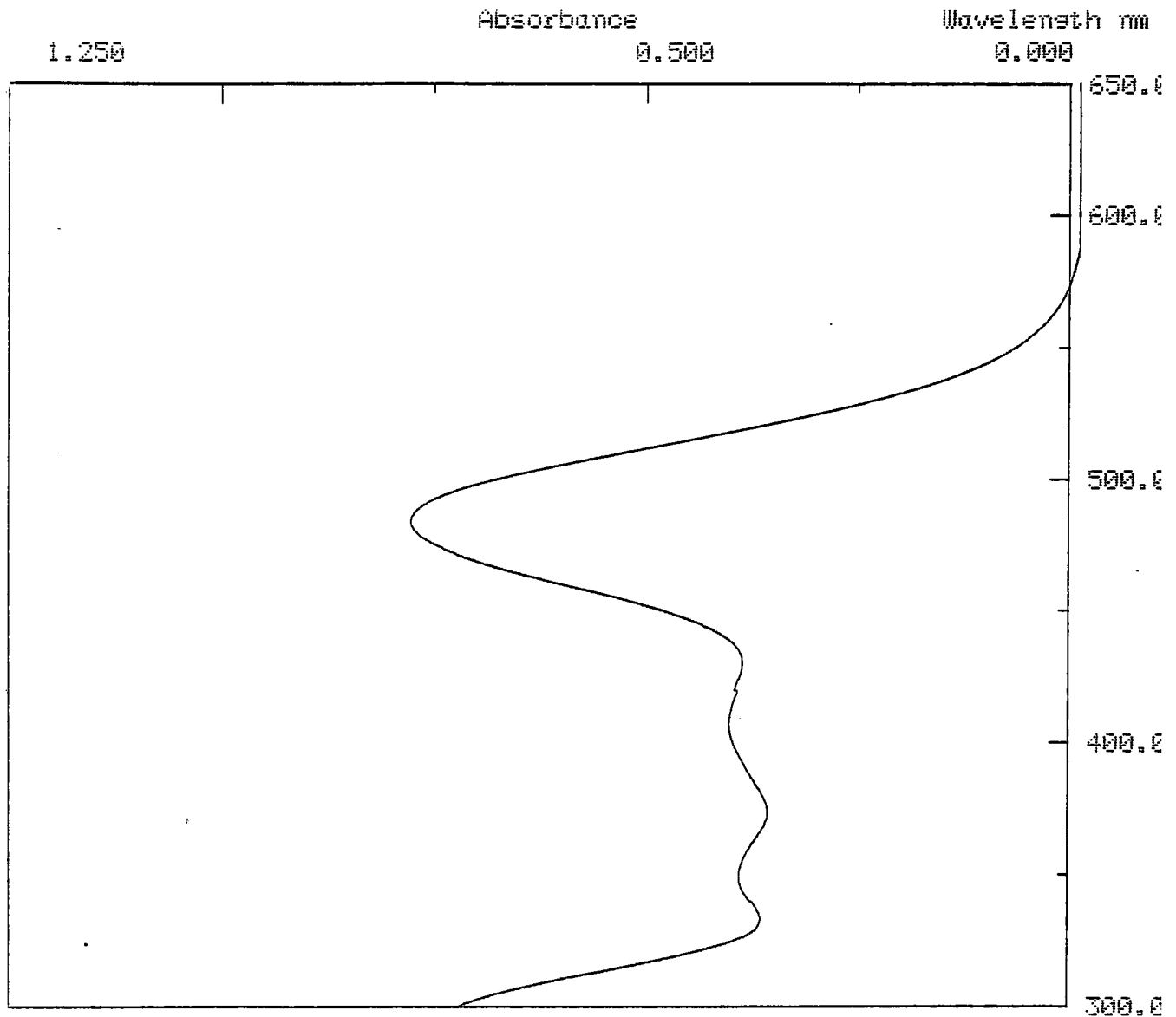


รูปที่ 4.17 ทำการวัด SAG8 ที่เลข 11.6 สารละลายมีสีเหลือง
โดยจุดสูงสุดของกราฟอยู่ที่ 401.5 nm



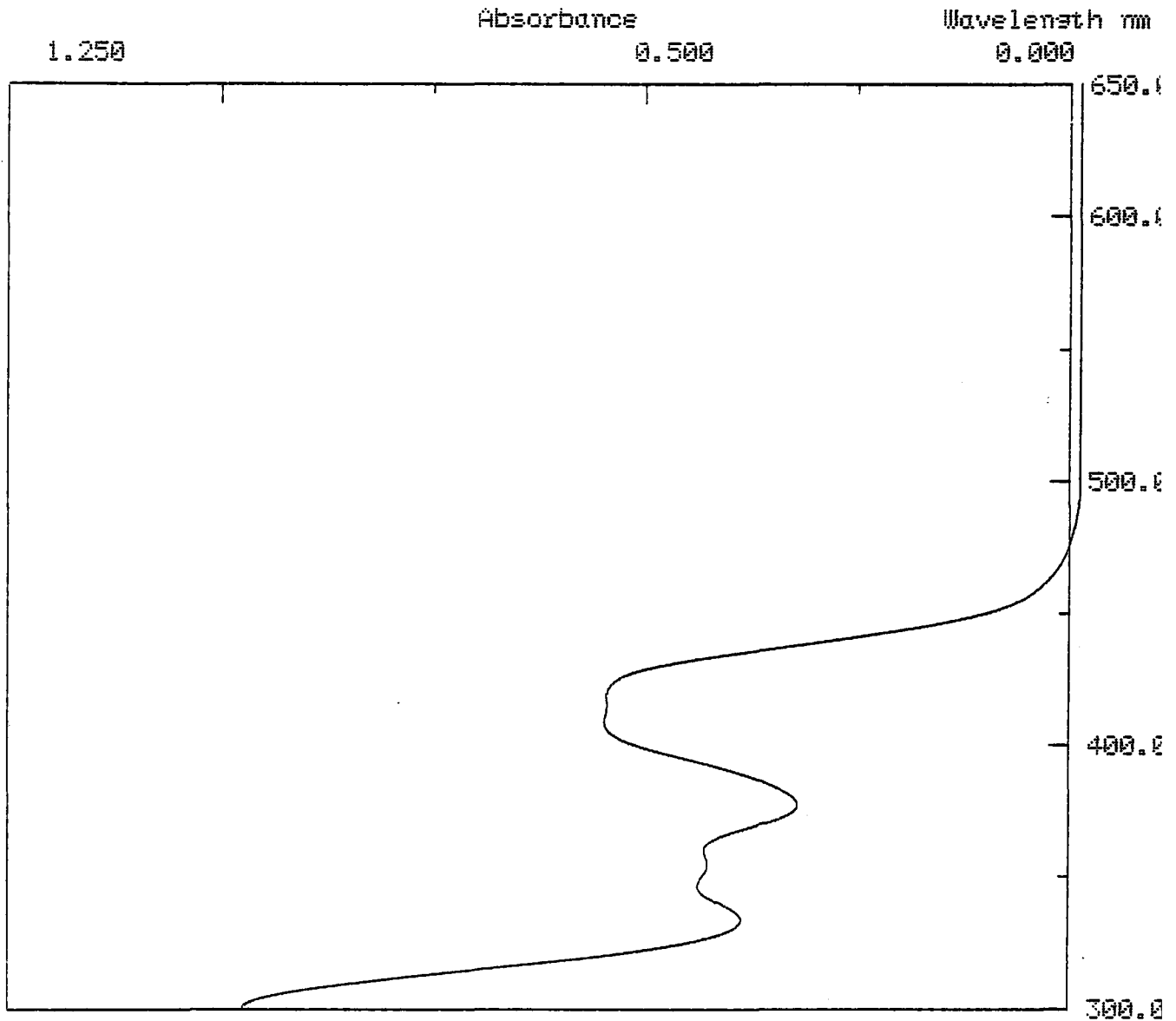
รูปที่ 4.18 ทำการวัด SAGB กับ ซิงค์(II) ที่พีเอช 1.6 สารละลายมีสีเหลืองอ่อน

โดยจุดสูงสุดของกราฟอยู่ที่ 372.5 nm



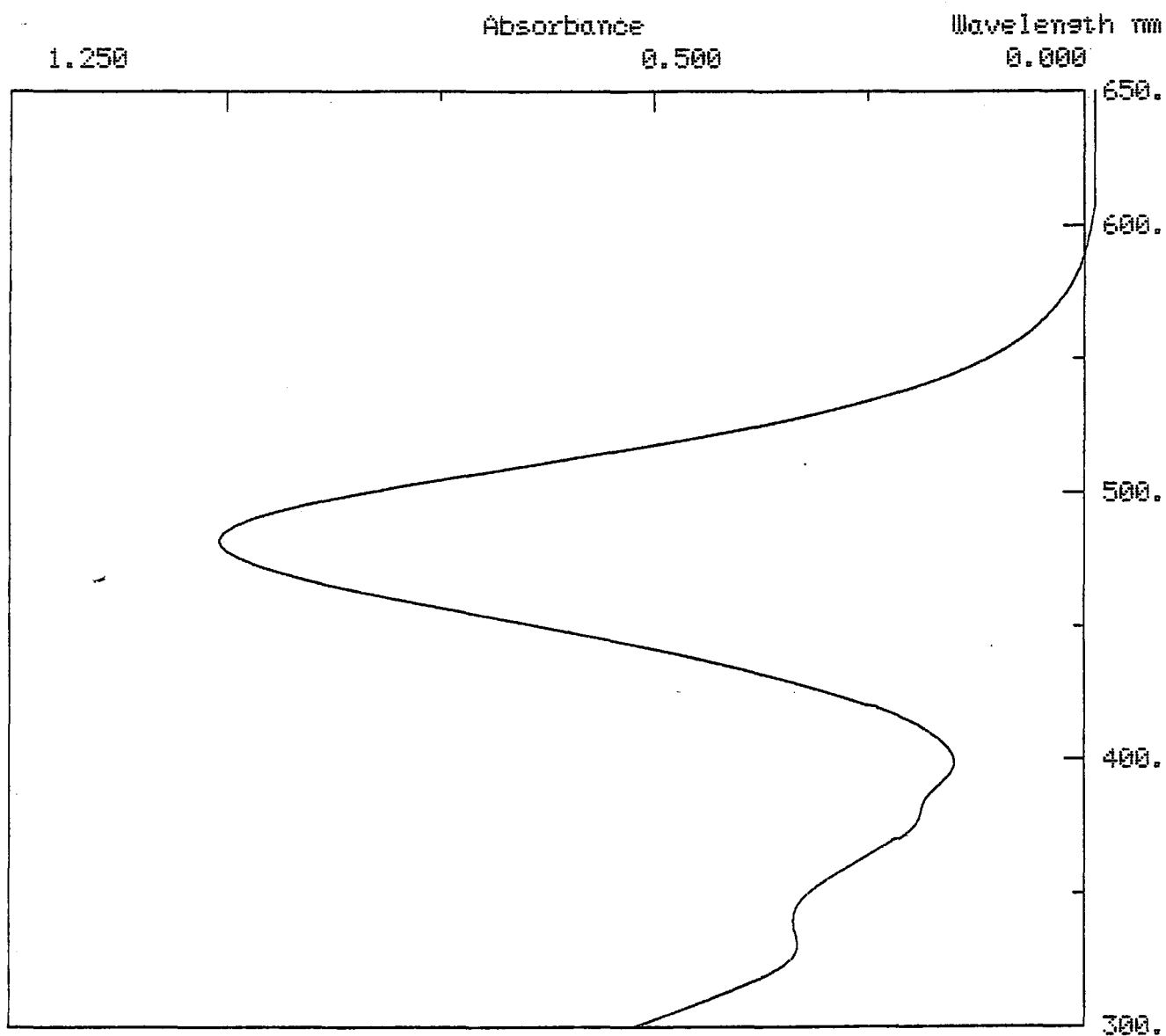
รูปที่ 4.19 ทำการวัด SAGB กับ ซิงค์(II) ที่พีเอช 11.4 สารละลายมีสีส้ม

โดยจุดสูงสุดของกราฟอยู่ที่ 484.0 nm



รูปที่ 4.20 ทำการวัด SAG8 กับ คอปเปอร์(II) ที่พีเอช 1.9 สารละลายมีสีเหลือง

โดยจุดสูงสุดของกราฟอยู่ที่ 409.0 nm



รูปที่ 4.21 ทำการวัด SAG8 กับ คอปเปอร์(II) ที่พีเอช 12.2 สารละลายมีสีส้ม

โดยจุดสูงสุดของกราฟอยู่ที่ 482.5 nm

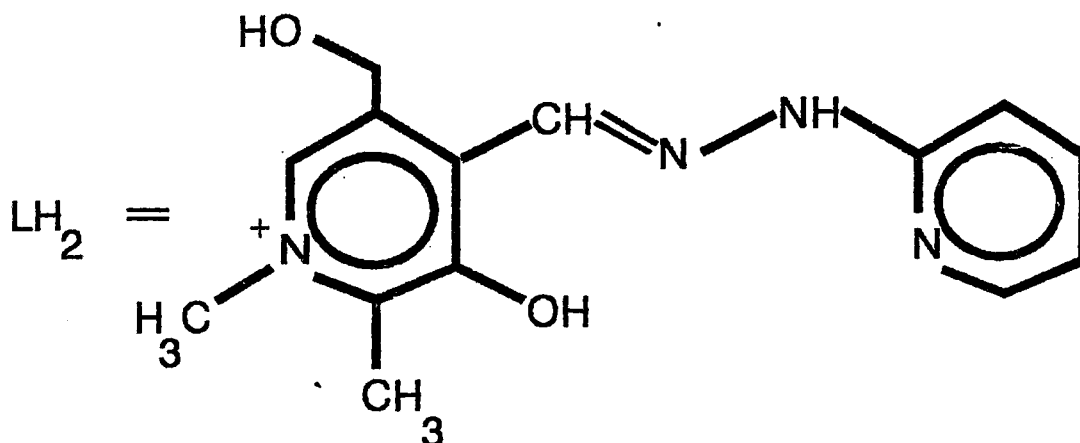
บทที่ 5

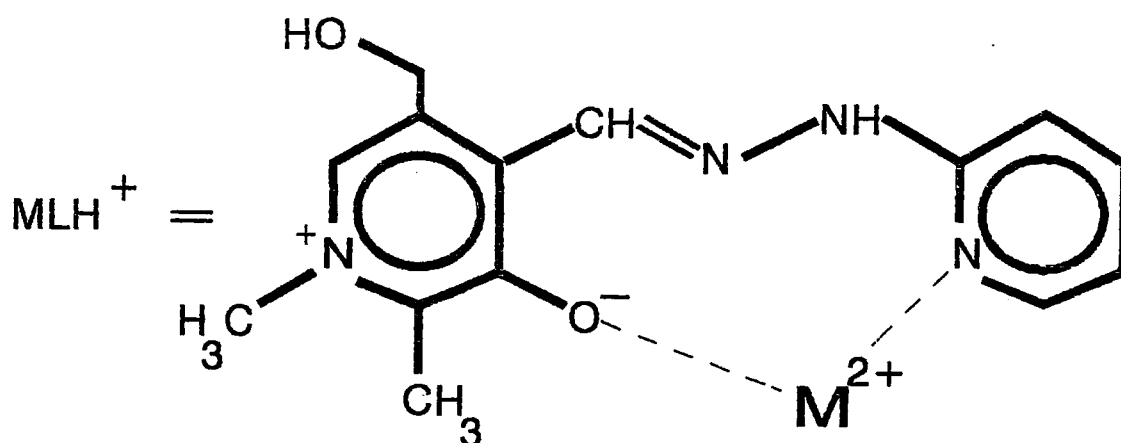
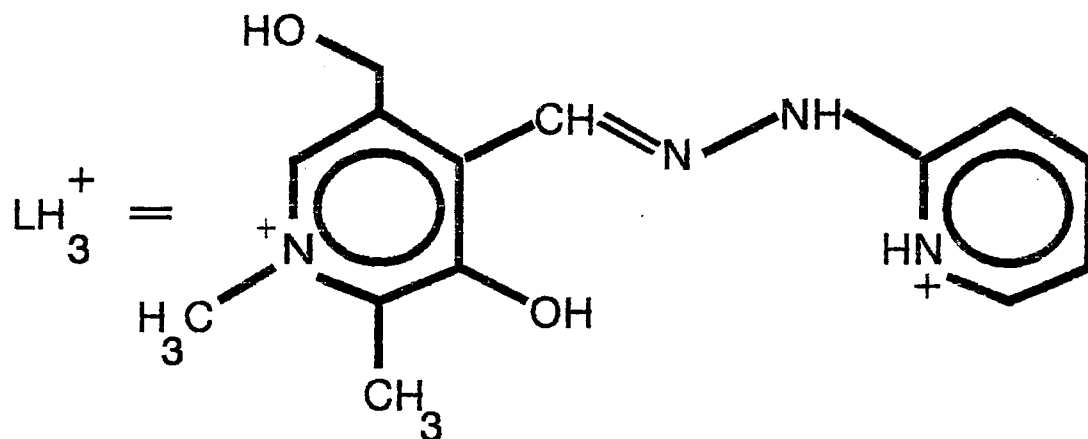
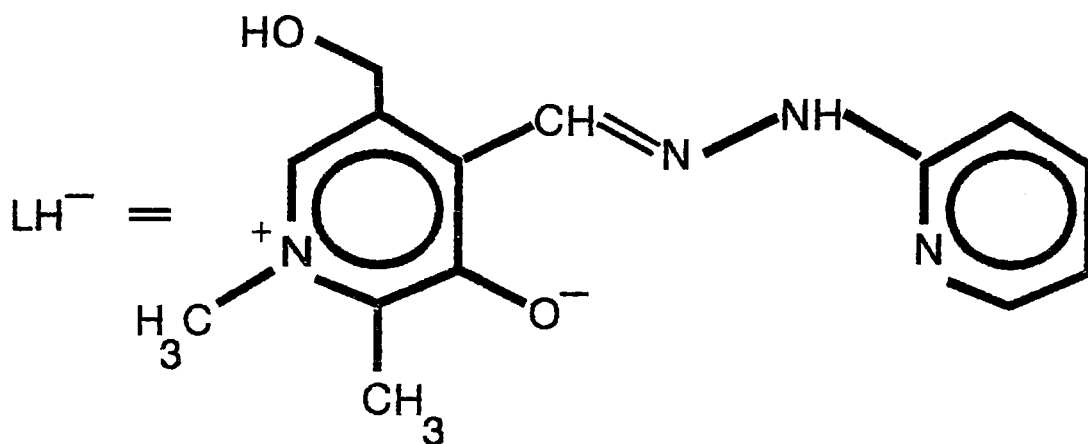
สรุปผลการวิจัยและเสนอแนะ

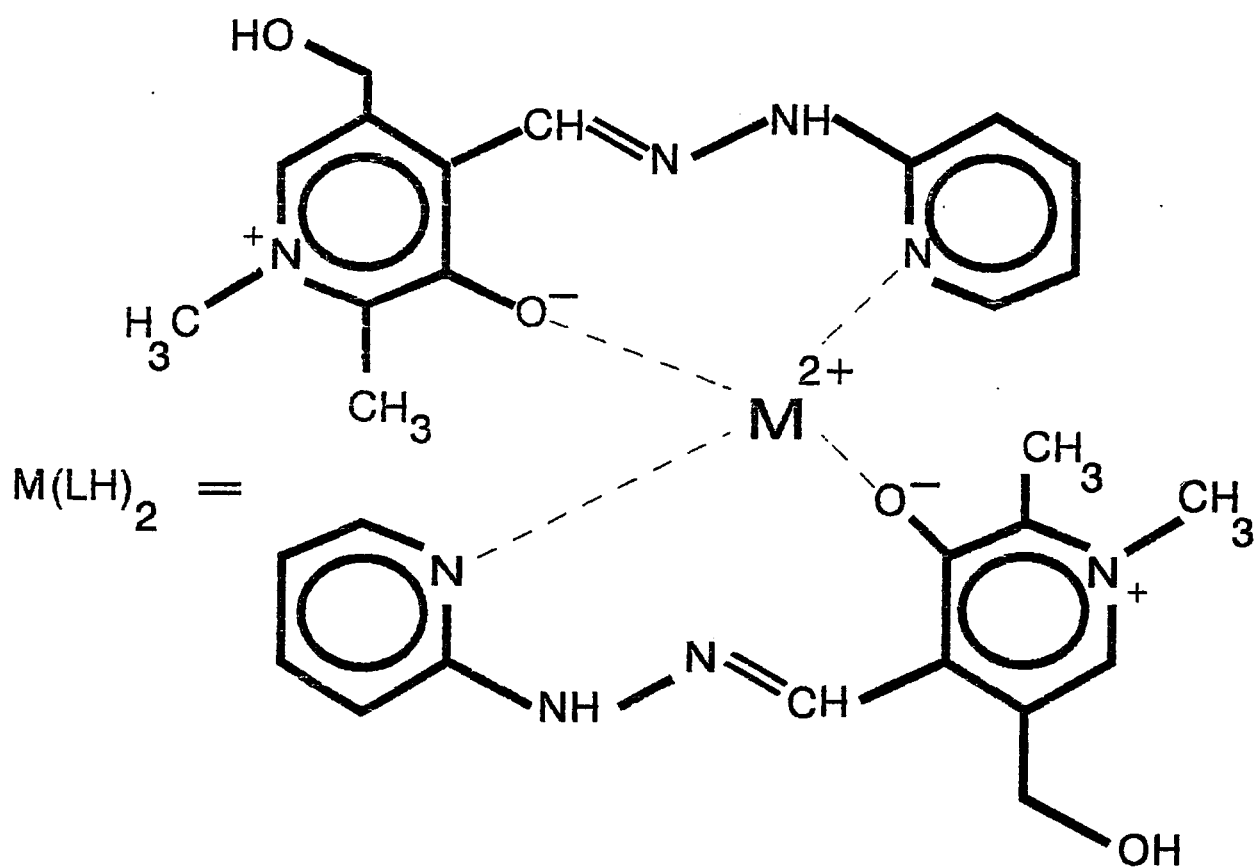
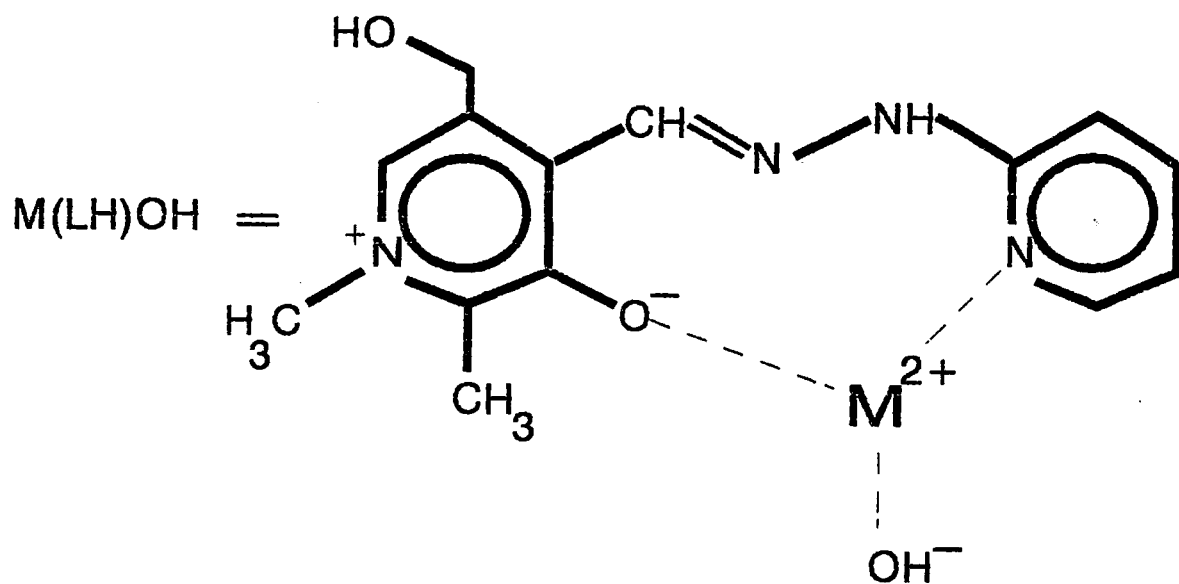
ผลจากการศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง 1-[*N*-เมธิลพิริดอกซิลลิดีเนียม]-2-[2'-*N*-เมธิลพิริดีเนียม]ไฮดรารีน (SAG8) กับโลหะซิงค์(II) และคอปเปอร์(II) โดยการใช้เทคนิคโพเทนชิอเมตริกไทเทรชัน โดยควบคุมสภาวะการทดลองให้มีความแรงไอออนของ KNO_3 เท่ากับ 0.5 โมลาร์ ที่อุณหภูมิ 37 องศาเซลเซียส ซึ่งได้ค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนสปีชีส์ต่าง ๆ ดังแสดงในตารางที่ 4.7 โดยใช้โปรแกรม SUPERQUAD คำนวณดังตัวอย่างอินพุท และเอาท์พุทของโปรแกรมในภาคผนวก ง และ จ ซึ่งวิธีที่จะพิสูจน์ว่าเกิดสารประกอบเชิงซ้อนสปีชีส์ต่าง ๆ จริงตามที่คำนวณได้จากโปรแกรมหรือไม่นั้น วิธีที่มีผู้เคยใช้คือใช้เทคนิค ESR (Electron Spin Resonance) ทดสอบ

จากค่าคงตัวเสถียรภาพของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนทำให้ทราบโครงสร้างของ SAG8 ได้ดังต่อไปนี้

กำหนดให้ SAG8 เริ่มต้น (Free Ligand) เป็น LH_2







และจากกราฟการกระจายของสปีชีส์ต่าง ๆ ทำให้ทราบว่า ซิงค์(II) และคอปเปอร์(II) จับตัวเป็นสารเชิงซ้อนกับ SAG8 ได้หมดที่พีเอชเป็นเบสประมาณ 11 ขึ้นไป และจะไม่เกิดเป็นสารเชิงซ้อนกับ SAG8 ที่พีเอชเป็นกรด ปริมาณโลหะก็มีผลต่อการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเช่นกัน จากการทดลองทราบว่าเมื่อปริมาณโลหะมากขึ้นสารเชิงซ้อนระหว่าง SAG8 กับ โลหะก็สามารถเกิดได้ที่พีเอชต่ำลง ในขณะเดียวกันคอปเปอร์ 1 ตัวสามารถจับกับ SAG8 2 โมเลกุลเมื่อมีปริมาณคอปเปอร์มากขึ้นด้วย และจากผลการวัดค่าการดูดกลืนแสง พบว่ากราฟผลการทดลองของ SAG8+ซิงค์(II) วัดที่พีเอชเป็นกรดจะมียอดของกราฟตรงกับกราฟ SAG8 ที่พีเอชเป็นกรด และเมื่อวัด SAG8+ซิงค์(II) พบว่ายอดของกราฟจะเปลี่ยนไป ซึ่งเป็นการยืนยันถึงผลที่ได้จากการคำนวณว่าที่พีเอชเป็นเบส จะเกิดสปีชีส์ใหม่ของ SAG8+ซิงค์(II) แต่จากการวัดค่าการดูดกลืนแสงของ SAG8+คอปเปอร์(II) ที่พีเอชเป็นกรด พบว่ายอดของกราฟที่ได้แตกต่างจากกราฟ SAG8 ซึ่งอาจเกิดจากสาเหตุต่าง ๆ ดังนี้

1. ที่สภาวะเป็นกรดของ SAG8+คอปเปอร์(II) อาจเกิดสปีชีส์อื่น ๆ อีกนอกเหนือจากผลที่ได้จากการคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD
2. ขณะทำการวัดค่าการดูดกลืนแสง สารละลายถูกรบกวนด้วยเกลือของคอปเปอร์บางชนิดที่เนื่องจากเมื่อเติมคอปเปอร์(II) เพียงน้อยก็สามารถเกิดตะกอนได้ จึงทำให้กราฟที่ได้มียอดกราฟเปลี่ยนแปลงไป

เมื่อวัดค่าการดูดกลืนแสงของ SAG8+คอปเปอร์(II) ที่พีเอชเป็นเบส ยอดกราฟที่ได้จะเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจนเช่นเดียวกับที่ทำการวัด SAG8+ซิงค์(II) ซึ่งยืนยันถึงการเกิดสปีชีส์ขึ้นใหม่เช่นเดียวกับผลที่ได้จากการคำนวณด้วยโปรแกรม SUPERQUAD นั่นเอง

สรุปได้ว่า SAG8 สามารถใช้กำจัดโลหะซิงค์(II) และคอปเปอร์(II) ได้ โดยจะต้องมีการควบคุมสภาวะความเป็นกรด-เบสให้เหมาะสมเพื่อให้ SAG8 เกิดสารประกอบเชิงซ้อนอย่างมีประสิทธิภาพที่สุด

แนวทางในการทำการศึกษาคือ

1. จากผลของการวัดค่าการดูดกลืนแสงของ SAG8+คอปเปอร์(II) ที่พีเอชเป็นกรด ควรทำการวัดค่าการดูดกลืนของแสงใหม่ โดยทำการวัดที่หลาย ๆ ค่าพีเอช (1-7) เพื่อเป็นข้อมูลในการวิเคราะห์ถึงสปีชีส์ที่เกิดขึ้นในสภาวะนั้น
2. จากข้อ 1. จำนวนโครงสร้างของสารละลายที่มี SAG8+คอปเปอร์(II) อีกร โดยสมมติโครงสร้างโมเลกุลใหม่ ๆ ว่าเป็นไปได้หรือไม่
3. ทำการทดลองเหมือนโครงการงานพิเศษนี้ แต่ใช้โลหะปริมาณมาก ๆ เมื่อเทียบกับ ปริมาณ SAG8 เพื่อศึกษาถึงผลที่เกิดขึ้น
4. เปลี่ยน ซิงค์(II)และคอปเปอร์(II)เป็นโลหะทรานซิชันอื่น ๆ เพื่อศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ SAG8 นอกเหนือจากนี้

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก รูปแบบของ Data Input สำหรับโปรแกรม SUPERQUAD และโปรแกรม ELE^(๑)

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 Loops] [Print Mode] [No. of Reactants] [Det Reactant]

3 [Name of Reactants]

...

4 [Working Temp.] [Initial Voltage] [Final Voltage]

5 [log K] [No. of Each 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.] [Initial Volume(ml)] [ERR.]

10 [Control No.] [Control No.] [RI] [E°] [Emv] [RK of E°] [Sl Factor]

- 11 Blank Line
- 12 [CRK of Point] [Titrant Volume] [Reading Voltage(mv)] [Point No.]
- ...
- 13 Blank Line
- 14 Options

ตารางนี้แสดงรูปแบบโดยรวมของการใส่ข้อมูลเพื่อนำไปคำนวณโดยใช้โปรแกรม SUPERQUAD และโปรแกรม ELE ในบางรายการอาจมีข้อมูลมากกว่า 1 ได้ เช่น

รายการที่ 3 สามารถมีข้อมูลได้มากที่สุด 4 บรรทัด แต่ละบรรทัดจะแทนสารตั้งต้นแต่ละตัว

รายการที่ 5 สามารถมีข้อมูลได้มากที่สุด 18 บรรทัด แต่ละบรรทัดจะแทนค่าคงตัวเสถียรภาพของสารประกอบเชิงซ้อนแต่ละตัวที่กำหนดไว้

รายการที่ 7 สามารถมีจำนวนข้อมูลได้เท่ากับจำนวนของสารตั้งต้น ข้อมูลแต่ละตัวแสดงรายละเอียดของสารตั้งต้นแต่ละชนิดในการไทเทรต

รายการที่ 12 สามารถมีข้อมูลได้มากที่สุด 401 บรรทัด แต่ละบรรทัดจะแทนค่าของข้อมูลการไทเทรตแต่ละจุด

รายละเอียดของการจัดรูปแบบข้อมูลในแต่ละรายการมีดังนี้

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจองเนื้อที่	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 พล็อตค่า Residuals 3 คือ พล็อตค่าความเข้มข้น 5 คือ พิมพ์เคอร์ฟการไทเทรต 6 คือ พิมพ์ตารางค่า Residuals ในหน่วย emf 7 คือ พิมพ์ตารางค่าหน่วยความเข้มข้นในหน่วย โมลต่อลิตร 8 คือ พิมพ์ข้อมูลพิเศษของค่า chi-square 9 คือ พิมพ์ตารางของความเข้มข้นรวมและความ เข้มข้นอิสระ ถ้ากำหนด IPRIN เป็น 9 เครื่องจะทำงานให้ตั้ง แต่ที่ 1-9
	11-15	INT	No. of Reactants (จำนวนสารตั้งต้นทั้งหมดใน ระบบ)
	16-20	INT	Det Reactant (การเลือกความสำคัญของข้อมูล) 0 คือ ความสำคัญขึ้นอยู่กับข้อมูลที่ได้จากการ ทดลอง 1 คือ ข้อมูลทุกตัวสำคัญเท่ากันหมด
3	1-12	String[12]	No. of Reactants (ชื่อของสารตั้งต้นแต่ละตัว)

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจองเนื้อที่	ความหมาย
(ต่อ)			
4	1-10	Float-10.6	Working Temp. (อุณหภูมิที่ทำการทดลอง °C)
	11-15	Float-10.6	Upper Voltage Range
	16-20	Float-10.6	Lower Voltage Range
5	1-10	Float-10.6	ค่าลอการิทึมฐาน 10 ของค่าคงตัวเสถียรภาพ
	11-15	INT	Coefficient-ตัวเลขที่แสดงถึงสัมประสิทธิ์ปริมาณ
	16-20	INT	สัมพันธของแต่ละสปีชีส์ที่เกิดขึ้น
	21-25	INT	
	26-30	INT	Running Key (RK) โดยที่ -1 คือ ไม่ต้องสนใจค่า log K นั้นในการ คำนวณครั้งแรก 0 คือ ให้ค่า log K นั้นคงที่ตลอด 1 คือ ให้คำนวณค่า log K นั้นใหม่
6			เว้น 1 บรรทัด เพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลเกี่ยวกับค่าคงที่การรวมตัว
7	3	INT	Control No. ตัวเลขควบคุมการพิมพ์สำหรับการ พล็อตการกระจายของแต่ละสปีชีส์ 0 คือ ไม่ต้องพล็อต 1 คือ พล็อตค่าอัตราส่วนระหว่างความเข้มข้น ของสปีชีส์กับความเข้มข้นรวมสำหรับ ความเข้มข้นอิสระจะปรากฏในรูปดอกจัน (*)
	5	INT	Reactant Index(RI) ดัชนีของสารตั้งต้นจาก

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจําแนกเนื้อหา	ความหมาย
(ต่อ)			<p>ข้อมูลที่ให้ไว้ในรายการที่ 3 เช่น</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. สำหรับสารตั้งต้นตัวแรก 2. สำหรับสารตั้งต้นตัวที่สอง <p>ฯลฯ</p>
	6-15	Float-10.6	<p>TMMOL ปริมาตรรวมเป็นมิลลิโมลของสารตั้งต้นแต่ละตัวในขวดกั้นกลมตอนเริ่มต้นกระบวนการไทเทรตสำหรับโปรแกรม SUPERQUAD หรือความเข้มข้นของสารตั้งต้นในขวดกั้นกลมตอนเริ่มต้นกระบวนการไทเทรตสำหรับโปรแกรม ELE</p>
	16-25	Float-10.6	<p>CONC. ความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่อยู่ในบิวเรต (โมลต่อลิตร)</p>
	26-30	INT	<p>Running Key of TMMOL</p>
	31-35	INT	<p>Running Key of CONC.</p>
8			<p>เว้น 1 บรรทัดเพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลเกี่ยวกับสารตั้งต้น</p>
	1-5	INT	<p>Control No.</p>
	6-15	Float-10.6	<p>Initial Volume ปริมาตรของสารในขวดกั้นกลมตอนเริ่มต้นการไทเทรตในแต่ละครั้ง</p>
	16-25	Float-10.6	<p>Error in Reading Volume of Burette ค่าผิดพลาดในการอ่านปริมาตรสารในบิวเรต</p>
10	1	INT	<p>Control No. ชนิดของอิเล็กโทรด</p> <p>0 คือ อ่านค่าเป็นมิลลิโวลต์</p>

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจองเนื้อที่	ความหมาย
(ต่อ)			
	3	INT	1 คือ อ่านค่าเป็นพีเอช Control No. จำนวนของอิเล็กตรอนที่ถูกถ่ายเท ในระบบซึ่งขึ้นอยู่กับอิเล็กโทรดที่ใช้ 0 คือ มีการถ่ายเทอิเล็กตรอนจำนวน 1 อิเล็กตรอน
	5	INT	Reactant Index ดัชนีของสารตั้งต้นที่มีผลต่อ อิเล็กโทรด ในที่นี้คือโปรตอน
	6-15	Float-10.6	E° ค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของอิเล็กโทรดที่ใช้ (มิลลิโวลต์)
	16-25	Float-10.6	Error in Millivolt ค่าผิดพลาดในการอ่าน ค่ามิลลิโวลต์
	26-30	INT	Running Key ในการควบคุมค่า E°
	31-40	Float-10.6	Slope Factor ค่าที่จะต้องนำไปคูณกับความชัน Nernstain เพื่อหาความชันของการทดลอง เว้น 1 บรรทัดเพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลเกี่ยว กับอิเล็กโทรด
11			Running Key of Point ตัวเลขควบคุมการนำ ข้อมูลไปคำนวณ 0 คือ ให้นำค่าของข้อมูลที่จุดนั้นไปคำนวณ 1 (หรือเลขจำนวนเต็มบวก) คือ ไม่นำจุดนั้น ไปคำนวณ
	1-10	Float-10.4	Titrant Volume ปริมาตรของไทเทรนต์ที่ใช้

รายการ	คอลัมน์	รูปแบบการจองเนื้อหา	ความหมาย
(ต่อ)	11-20	Flaot-10.4	<p>ในการไทเทรตแต่ละจุด (มิลลิลิตร) Reading Voltage ค่ามิลลิโวลต์หรือพีเอชที่ อ่านจากอิเล็กโทรดในการไทเทรตแต่ละจุด วัน 1 บรรทัดเพื่อแสดงจุดสิ้นสุดของข้อมูลสำหรับ การไทเทรตแต่ละครั้ง</p> <p>ข้อมูลการไทเทรตครั้งต่อไป (ทำซ้ำตั้งแต่รายการ ที่ 7-13) หรือวันบรรทัดเพื่อแสดงจุดสิ้นสุดการ ใส่ข้อมูลในการคำนวณโดยใช้โปรแกรม SUPER QUAD</p>

ภาคผนวก ข ตัวอย่างอินพุทของโปรแกรม ELE. ในการวิเคราะห์อิเล็กทรอนิกส์

e21b9401 ecal_____001

99 2 1 3

proton

37.00 400.00 100.00 .002

-13.25 -1 0

1 1 .54490 -.53320 1 0

0 27.00000 2.00000

0 0 0 425.00000 .10000 1 .000

0	.0000	331.2349	1
0	.0010	331.3823	2
0	.0218	331.0691	3
0	.1218	329.8717	4
0	.2218	328.3797	5
0	.3218	326.6665	6
0	.4218	325.0455	7
0	.5218	323.0560	8
0	.6218	321.0850	9
0	.7218	318.9482	10
0	.8218	316.0745	11
0	.9218	313.4956	12
0	1.0218	310.8062	13
0	1.1218	307.3799	14
0	1.2218	303.2352	15

0	1.3218	299.0352	16
0	1.4218	293.5089	17
0	1.5218	286.7301	18
0	1.6218	277.0038	19
0	1.7218	264.0356	20
0	1.8218	236.7727	21
0	1.8744	113.7212	22
0	1.8832	-33.9405	23
0	1.8850	-55.2718	24
0	1.8878	-98.8372	25
0	1.8893	-112.5239	26
0	1.8920	-135.0158	27
0	1.8951	-147.0078	28
0	1.9000	-166.8655	29
0	1.9056	-173.1101	30
0	1.9204	-187.0179	31
0	1.9389	-203.5782	32
0	1.9583	-210.6703	33
0	2.0071	-229.3491	34
0	2.0501	-236.8648	35
0	2.1335	-248.2673	36
0	2.2335	-256.8882	37
0	2.3335	-263.6119	38
0	2.4335	-268.8434	39
0	2.5335	-273.0986	40
0	2.6335	-276.4881	41
0	2.7335	-279.7301	42

0	2.8335	-282.8433	43
0	2.9335	-285.4959	44
0	3.0335	-288.4248	45
0	3.1335	-290.6353	46
0	3.2335	-293.0116	47
0	3.3335	-295.3142	48
0	3.4335	-296.9352	49
0	3.5335	-297.7273	50
0	3.6335	-298.6852	51
0	3.7335	-300.8773	52
0	3.8335	-301.9825	53
0	3.9335	-303.1431	54
0	4.0335	-304.7457	55
0	4.1335	-305.7773	56
0	4.2335	-306.9378	57
0	4.3335	-307.6562	58
0	4.4335	-308.6693	59
0	4.5335	-309.6641	60
0	4.6335	-310.4009	61
0	4.7335	-311.3588	62

ภาคผนวก ค ตัวอย่างเอาต์พุตของโปรแกรม ELE. ในการแคริเบรทอิเล็กโทรด

ELECTRODE FITTING PROGRAME

V. 2.0, WINTER 1994

DEPT. OF INDUSTRIAL CHEMISTRY

WRITTEN BY DR. P. DOUNGDEE

KMIT LADKRABANG, BANGKOK 10520

CONVERGENCE SATISFY AFTER 11 LOOPS

PARAMETERS CHANGE NOT MORE THAN .10 %

FINAL VALUES OF THE PARAMETERS :

CHI-SQR = .35860

PARAMETERS AND STANDARD DEV

PARAMETERS	420.45	.99973
DEVIATION	.13079	.46504E-05
% DEVIATION	.31108E-01	.46516E-03
DEPENDENCIES	.92523E-01	.92523E-01

CORRELATION COEFFICIENTS :

A 1 1.0000

A 2 -.21714 1.0000

DEGREES OF FREEDOM = 20

FINAL LAMBDA = .20000E-07

POINTS	EXP. MV	CAL. MV	RESIDUAL	PH
1	331.23	332.36	-1.1233	1.4497
2	331.38	332.34	-.96061	1.4473
3	331.07	332.02	-.95494	1.4524
4	329.87	330.44	-.57112	1.4719
5	328.38	328.77	-.39517	1.4961
6	326.67	327.01	-.34281	1.5240
7	325.05	325.13	-.87598E-01	1.5503
8	323.06	323.13	-.74381E-01	1.5826
9	321.09	320.98	.10334	1.6147
10	318.95	318.66	.28563	1.6494
11	316.07	316.14	-.67593E-01	1.6961
12	313.50	313.38	.11568	1.7380
13	310.81	310.32	.48391	1.7817
14	307.38	306.90	.48460	1.8374
15	303.24	302.99	.24188	1.9047
16	299.04	298.46	.57742	1.9730
17	293.51	293.03	.47433	2.0628
18	286.73	286.28	.45256	2.1730
19	277.00	277.29	-.28350	2.3310

20	264.04	263.76	.27176	2.5418
21	236.77	235.39	1.3811	2.9848
22	113.72	113.73	-.86129E-02	4.9844

THE LAST RESULT OF CALCULATION

CONCENTRATION OF ACID = .49986 SETRUN = 1

CONCENTRATION OF BASE = -.53320 SETRUN = 0

FINAL VALUE OF EZER = 420.44670 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 = 27.00000

WORKING TEMPERATURE = 37.00000

TOTAL NO. OF PARAMETERS WERE FITED = 2

ภาคผนวก ง ตัวอย่างอินพุทของโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับศึกษาค่าคงตัวของสารประกอบเชิงซ้อน
ระหว่าง ซิงค์ (II) กับ SAG8

z21b9405 atob____.003

99 5 3 3

Zn(ii)

SAG8

PROTON

37.00 400.00 -400.00 9999.000

2.56 0 1 1 0

-8.71 0 1 -1 0

-3.22 1 1 -1 1

-10.00 1 1 -2 1

-13.25 0 0 -1 1

1 1 .02940 .00000 0 0

1 2 .05098 .00000 0 0

1 3 1.07641 -.53320 1 0

0 49.69750 .00200

0 0 3 420.44670 5.00000 0 1.000

0 .0000 316.4982 1

0 .0010 317.1982 2

0 .0343 316.8298 3

0 .1343 315.3561 4

0 .2343 313.8456 5

0 .3343 312.5377 6

0	.4343	311.2114	7
0	.5343	309.2956	8
0	.6343	307.4720	9
0	.7343	305.0036	10
0	.8343	302.8852	11
0	.9343	300.0299	12
0	1.0343	297.5615	13
0	1.1343	293.6010	14
0	1.2343	289.6037	15
0	1.3343	285.8275	16
0	1.4343	280.6328	17
0	1.5343	274.7565	18
0	1.6343	267.3329	19
0	1.7343	257.4593	20
0	1.8343	242.3726	21
0	1.9258	214.2624	22
0	1.9716	65.8454	23
0	1.9783	61.5902	24
0	2.0054	-7.4697	25
0	2.0134	-12.5722	26
0	2.0396	-33.5720	27
0	2.0920	-129.7290	28
0	2.1027	-142.8631	29
0	2.1128	-160.6392	30
0	2.1231	-171.4338	31
0	2.1661	-188.3810	32
0	2.2031	-204.5177	33

0	-2.2322	-210.7992	34
0	2.2976	-220.5070	35
0	2.3976	-232.0017	36
0	2.4916	-239.5910	37
0	2.5916	-246.3147	38
0	2.6916	-251.7857	39
0	2.7916	-256.1146	40
0	2.8916	-259.4119	41
0	2.9916	-261.7698	42
0	3.0916	-265.5276	43
0	3.1916	-268.2539	44
0	3.2916	-270.4092	45
0	3.3916	-272.6013	46
0	3.4916	-274.3144	47
0	3.5916	-276.3960	48
0	3.6916	-277.8512	49
0	3.7916	-279.0854	50
0	3.8916	-280.6328	51
0	3.9916	-282.2538	52
0	4.0916	-283.7275	53
0	4.1916	-284.7959	54
0	4.2916	-285.9380	55
0	4.3916	-286.6748	56
0	4.4916	-288.1116	57
0	4.5916	-288.7748	58
0	4.6916	-290.2853	59
0	4.7916	-290.6353	60

0	4.8916	-291.4090	61
0	4.9916	-293.0116	62
0	5.0916	-293.7116	63
0	5.1916	-294.7247	64
0	5.2916	-295.3694	65
0	5.3916	-295.9589	66
0	5.4916	-296.8431	67
0	5.5916	-297.5984	68
0	5.6916	-298.0589	69
0	5.7916	-298.6115	70
0	5.8916	-299.4773	71
0	5.9916	-300.0852	72
0	6.0916	-300.6747	73
0	6.1916	-301.0799	74
0	6.2916	-301.7062	75
0	6.3916	-302.2404	76
0	6.4916	-302.7931	77
0	6.5916	-303.0325	78
0	6.6916	-303.6957	79
0	6.7916	-304.2483	80
0	6.8916	-304.8009	81
0	6.9916	-305.3904	82
0	7.0916	-305.7404	83

ภาคผนวก 3 ตัวอย่างเกณฑ์ของโปรแกรม SUPERQUAD สำหรับการศึกษาค่าคงตัวเสถียรภาพ
ของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง ซิงค์ (II) กับ SAG8

SUPERQUAD 1984A

z21b9405 atob____.003

MAXIT	IPRIN	MODE	TOL	ACCM	RELAC
99	5	3	.10E-03	.10E-74	.298023E-07

REACTANT 1- Zn(ii)

REACTANT 2- SAG8

REACTANT 3- 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 CONSTANTS	LOG BETAS	REFINEMENT KEYS	STOICHIOMETRIC COEFFICIENTS
A	3.6308E 2	2.5600	0	0 1 1
B	.1950E -8	-8.7100	0	0 1 -1
C	.6026E -3	-3.2200	1	1 1 -1
D	1.0000E-10	-10.0000	1	1 1 -2
E	.5623E-13	-13.2500	1	0 0 -1

3 FORMATION CONSTANTS TO BE REFINED

SLOPE = 61.53891

CURVE 1 INITIAL VOLUME 49.70

TITRE VOLUME ERROR .00200 MILLILITRES

REACTANT	INITIAL NO OF MILLIMOLES	TITRANT MOLES/LITRE	STANDARD POTENTIAL MILLIVOLTS	ELECT ERR
Zn(ii)	.02940	.00000	NO ELECTRODE	
SAG8	.05098	.00000	NO ELECTRODE	
proton	1.07641	-.53320	420.44670	5.00

POINT	TITRE	-LOG 3	E.M.F.	WEIGHT
1	.000	1.689	316.50	.04
2	.001	1.678	317.20	.04
3	.034	1.684	316.83	.04
4	.134	1.708	315.36	.04
5	.234	1.732	313.85	.04
6	.334	1.754	312.54	.04
7	.434	1.775	311.21	.04
8	.534	1.806	309.30	.04
9	.634	1.836	307.47	.04
10	.734	1.876	305.00	.04
11	.834	1.910	302.89	.04

12	.934	1.957	300.03	.04
13	1.034	1.997	297.56	.04
14	1.134	2.061	293.60	.04
15	1.234	2.126	289.60	.04
16	1.334	2.188	285.83	.04
17	1.434	2.272	280.63	.04
18	1.534	2.367	274.76	.04
19	1.634	2.488	267.33	.04
20	1.734	2.649	257.46	.04
21	1.834	2.894	242.37	.04
22	1.926	3.350	214.26	.04
23	1.972	5.762	65.85	.04
24	1.978	5.831	61.59	.04
25	2.005	6.954	-7.47	.04
26	2.013	7.037	-12.57	.04
27	2.040	7.378	-33.57	.04
28	2.092	8.940	-129.73	.04
29	2.103	9.154	-142.86	.04
30	2.113	9.443	-160.64	.04
31	2.123	9.618	-171.43	.04
32	2.166	9.893	-188.38	.04
33	2.203	10.156	-204.52	.04
34	2.232	10.258	-210.80	.04
35	2.298	10.415	-220.51	.04
36	2.398	10.602	-232.00	.04
37	2.492	10.726	-239.59	.04
38	2.592	10.835	-246.31	.04

39	2.692	10.924	-251.79	.04
40	2.792	10.994	-256.11	.04
41	2.892	11.048	-259.41	.04
42	2.992	11.086	-261.77	.04
43	3.092	11.147	-265.53	.04
44	3.192	11.191	-268.25	.04
45	3.292	11.226	-270.41	.04
46	3.392	11.262	-272.60	.04
47	3.492	11.290	-274.31	.04
48	3.592	11.324	-276.40	.04
49	3.692	11.347	-277.85	.04
50	3.792	11.367	-279.09	.04
51	3.892	11.392	-280.63	.04
52	3.992	11.419	-282.25	.04
53	4.092	11.443	-283.73	.04
54	4.192	11.460	-284.80	.04
55	4.292	11.479	-285.94	.04
56	4.392	11.491	-286.67	.04
57	4.492	11.514	-288.11	.04
58	4.592	11.525	-288.77	.04
59	4.692	11.549	-290.29	.04
60	4.792	11.555	-290.64	.04
61	4.892	11.568	-291.41	.04
62	4.992	11.594	-293.01	.04
63	5.092	11.605	-293.71	.04
64	5.192	11.621	-294.72	.04
65	5.292	11.632	-295.37	.04

66	5.392	11.642	-295.96	.04
67	5.492	11.656	-296.84	.04
68	5.592	11.668	-297.60	.04
69	5.692	11.676	-298.06	.04
70	5.792	11.685	-298.61	.04
71	5.892	11.699	-299.48	.04
72	5.992	11.709	-300.09	.04
73	6.092	11.718	-300.67	.04
74	6.192	11.725	-301.08	.04
75	6.292	11.735	-301.71	.04
76	6.392	11.744	-302.24	.04
77	6.492	11.753	-302.79	.04
78	6.592	11.756	-303.03	.04
79	6.692	11.767	-303.70	.04
80	6.792	11.776	-304.25	.04
81	6.892	11.785	-304.80	.04
82	6.992	11.795	-305.39	.04
83	7.092	11.800	-305.74	.04

83 DATA POINTS IN CURVE 1

83 DATA POINTS HAVE BEEN READ IN CORRESPONDING TO 1 TITRATION CURVES

1 SPECIAL PARAMETERS TO BE REFINED

		CURVE	VALUE
TOT MMOLES	proton	1	1.0764E+00

100 ITERATIONS IN CCFR AT POINT 25

ITERATION 1 SIGMA= 9.55595 SUM OF SQUARES = 7.2140E+03

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	.6026E -3	.1042	6.6533E -4	
BETA D	1.0000E-10	-.9000	10.0000E-12	
BETA E	.5623E-13	.0901	6.1300E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0764E+00	-.0856	1.0672E+00	

ITERATION 2 SIGMA= 6.05614 SUM OF SQUARES = 2.8975E+03

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	6.6533E -4	2.6318	2.4164E -3	
BETA D	10.0000E-12	1.6626	2.6626E-11	
BETA E	6.1300E-14	.1789	7.2269E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0672E+00	-.2054	1.0453E+00	

ITERATION 3 SIGMA= 1.49952 SUM OF SQUARES = 1.7764E+02

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	2.4164E -3	-.5161	1.1692E -3	
BETA D	2.6626E-11	1.0203	5.3792E-11	
BETA E	7.2269E-14	.0017	7.2389E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0453E+00	-.0408	1.0410E+00	

ITERATION 4 SIGMA= .74035 SUM OF SQUARES = 4.3301E+01

MARQUART PARAMETER FOR NEXT ITERATION 1.0319E-01

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	1.1692E -3	-.2575	8.6813E -4	
BETA D	5.3792E-11	-.6591	1.8336E-11	
BETA E	7.2389E-14	-.0075	7.1845E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0410E+00	.0177	1.0428E+00	

ITERATION 5 SIGMA= .73840 SUM OF SQUARES = 4.3074E+01

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	8.6813E -4	-.0016	8.6676E -4	
BETA D	1.8336E-11	.3285	2.4360E-11	
BETA E	7.1845E-14	.0005	7.1878E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0428E+00	.0006	1.0429E+00	

ITERATION 6 SIGMA= .70365 SUM OF SQUARES = 3.9115E+01

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	8.6676E -4	.0420	9.0314E -4	
BETA D	2.4360E-11	.1545	2.8125E-11	
BETA E	7.1878E-14	.0014	7.1978E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0429E+00	-.0023	1.0427E+00	

ITERATION 7 SIGMA= .70113 SUM OF SQUARES = 3.8835E+01

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
-----------	-----------	-----------	-----------	-----

BETA C	9.0314E -4	-.0023	9.0108E -4
BETA D	2.8125E-11	.0061	2.8295E-11
BETA E	7.1978E-14	-.0002	7.1961E-14
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0427E+00	.0002	1.0427E+00

ITERATION 8 SIGMA= .70109 SUM OF SQUARES = 3.8830E+01

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	9.0108E -4	.0002	9.0127E -4	
BETA D	2.8295E-11	.0010	2.8323E-11	
BETA E	7.1961E-14	.0000	7.1963E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0427E+00	-.0000	1.0427E+00	

z21b9405 atob____.003

8 ITERATIONS

REFINEMENT TERMINATED SUCCESSFULLY

CHI-SQUARED = 75.75

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

SIGMA = .7011

	VALUE	REL STD DEV	LOG BETA	STD DEVIATION		
BETA A CONSTANT	3.63078E 2		2.56000		0	1
BETA B CONSTANT	.19498E -8		-8.71000		0	1 -
BETA C REFINED	9.01273E -4	.1486	-3.04514	.06987	1	1 -
BETA D REFINED	2.83232E-11	.2302	-10.54786	.11360	1	1 -
BETA E REFINED	7.19628E-14	.0184	-13.14289	.00808	0	0 -

		CURVE	INITIAL VALUE	FINAL VALUE	STD DEV
TOT MMOLES	proton	1	1.07641	1.04269	.00071

CORRELATION MATRIX - PARAMETERS ORDERED AS ABOVE

	1	2	3
2	.71		
3	.17	.17	
4	-.75	-.81	-.22

REFINEMENT CONTINUES WITH WEIGHTS OBTAINED FROM THE CALCULATED TITRATION

ITERATION 1 SIGMA= .64096 SUM OF SQUARES = 3.2456E+01

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	9.0127E -4	-.0636	8.4396E -4	
BETA D	2.8323E-11	-.0566	2.6719E-11	
BETA E	7.1963E-14	.0003	7.1986E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0427E+00	.0021	1.0429E+00	

ITERATION 2 SIGMA= .64028 SUM OF SQUARES = 3.2387E+01

PARAMETER	OLD VALUE	REL SHIFT	NEW VALUE	REL
BETA C	8.4396E -4	.0037	8.4707E -4	
BETA D	2.6719E-11	.0054	2.6864E-11	
BETA E	7.1986E-14	.0001	7.1996E-14	
CURVE 1 TOT MMOLES proton	1.0429E+00	-.0001	1.0429E+00	
z21b9405 atob_____003				

2 ITERATIONS

REFINEMENT TERMINATED SUCCESSFULLY

CHI-SQUARED = 77.67

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

SIGMA = .6403

	VALUE	REL STD DEV	LOG BETA	STD DEVIATION		
BETA A CONSTANT	3.63078E 2		2.56000		0	1
BETA B CONSTANT	.19498E -8		-8.71000		0	1 -
BETA C REFINED	8.47067E -4	.1628	-3.07208	.07717	1	1 -
BETA D REFINED	2.68638E-11	.2368	-10.57083	.11737	1	1 -
BETA E REFINED	7.19959E-14	.0169	-13.14269	.00739	0	0 -

	CURVE	INITIAL VALUE	FINAL VALUE	STD DEV
TOT MMOLES proton	1	1.04269	1.04289	.00072

CORRELATION MATRIX - PARAMETERS ORDERED AS ABOVE

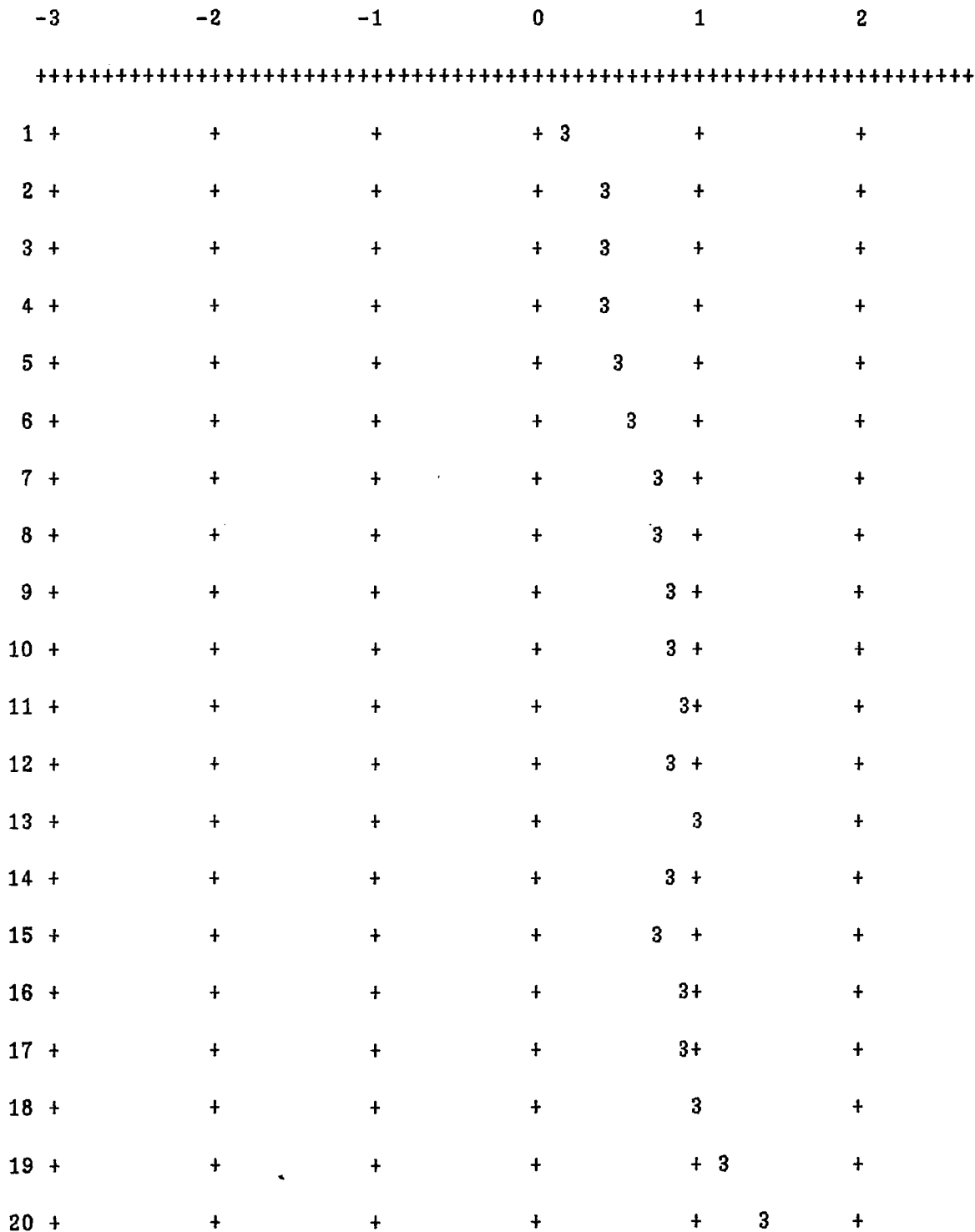
1 2 3

2 .68

3 .15 .17

4 -.68 -.79 -.22

RESIDUALS PLOTS - UNITS OF SD .6403



21	+	+	+	+	+	+3
22	+	+	+	+	+	+
23	+	+	+	3+	+	+
24	+	+	+	+	+	+
25	+ 3	+	+	+	+	+
26	+	+	3+	+	+	+
27	+	+	+	+	+	+
28	+	+	3	+	+	+
29	+	+	+	3	+	+
30	+	+3	+	+	+	+
31	+	+3	+	+	+	+
32	+	+	+	+	3	+
33	+	+	+	3+	+	+
34	+	+	+	3	+	+
35	+	+	+	+	3	+
36	+	+	+	+	3	+
37	+	+	+	+	3	+
38	+	+	+	+	3	+
39	+	+	+	3+	+	+
40	+	+	+	3+	+	+
41	+	+	+	3+	+	+
42	+	+	+	+	3	+
43	+	+	+	3+	+	+
44	+	+	+	3+	+	+
45	+	+	+	3+	+	+
46	+	+	+	3+	+	+
47	+	+	+	3+	+	+

48 +	+	+	3 +	+	+
49 +	+	+	3+	+	+
50 +	+	+	3	+	+
51 +	+	+	3	+	+
52 +	+	+	3+	+	+
53 +	+	+	3+	+	+
54 +	+	+	3+	+	+
55 +	+	+	3	+	+
56 +	+	+	+3	+	+
57 +	+	+	3	+	+
58 +	+	+	+3	+	+
59 +	+	+	3+	+	+
60 +	+	+	+ 3	+	+
61 +	+	+	+ 3	+	+
62 +	+	+	3	+	+
63 +	+	+	3	+	+
64 +	+	+	3	+	+
65 +	+	+	3	+	+
66 +	+	+	+3	+	+
67 +	+	+	3	+	+
68 +	+	+	3	+	+
69 +	+	+	+3	+	+
70 +	+	+	+ 3	+	+
71 +	+	+	+3	+	+
72 +	+	+	+3	+	+
73 +	+	+	+3	+	+
74 +	+	+	+ 3	+	+

```

75 +      +      +      + 3-      +      +
76 +      +      +      + 3      +      +
77 +      +      +      + 3      +      +
78 +      +      +      + 3      +      +
79 +      +      +      + 3      +      +
80 +      +      +      + 3      +      +
81 +      +      +      + 3      +      +
82 +      +      +      + 3      +      +
83 +      +      +      + 3      +      +

```

+++++

z21b9405 atob____.003

CURVE 1

PERCENT FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF Zn(ii)

```

0                      50                      1
+      +      +      +      +      +      +      +      +

```

+++++

```

1.7 +
1.7 +
1.7 +
1.7 +
1.7 +
1.8 +
1.8 +
1.8 +
1.8 +
1.9 +

```

1.9 +
 2.0 +
 2.0 +
 2.1 +
 2.1 +
 2.2 +
 2.3 +
 2.4 +
 2.5 +
 2.6 +
 2.9 +
 3.4 +
 5.8 + C *
 5.8 +D C *
 7.0 + D * C
 7.0 + * D C
 7.4 + * C D
 8.9 + C D
 9.2 + C
 9.4 +C
 9.6 +C
 9.9 +
 10.2 +
 10.3 +
 10.4 +
 10.6 +
 10.7 +

10.8 +

10.9 +

11.0 +

11.0 +

11.1 +

11.1 +

11.2 +

11.2 +

11.3 +

11.3 +

11.3 +

11.3 +

11.4 +

11.4 +

11.4 +

11.4 +

11.5 +

11.5 +

11.5 +

11.5 +

11.5 +

11.5 +

11.6 +

11.6 +

11.6 +

11.6 +

11.6 +

11.6 +

11.6 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.7 +

11.8 +

11.8 +

11.8 +

11.8 +

11.8 +

11.8 +

11.8 +

z21b9405 atob____.003

CURVE 1

PERCENT FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF SAG8

0

50

1

+ + + + + + + + + +

+++++

1.7 +

*

A

9.2 +C	*	B	D
9.4 +C	*	B	D
9.6 +	*	B	D
9.9 +	*	B	D
10.2 +*		B	D
10.3 +*		B	D
10.4 +*		B	D
10.6 +		B	D
10.7 +		B	D
10.8 +		B	D
10.9 +		B	D
11.0 +		B	D
11.0 +		B	D
11.1 +		B	D
11.1 +		B	D
11.2 +		B	D
11.2 +		B	D
11.3 +		B	D
11.3 +		B	D
11.3 +		B	D
11.3 +		B	D
11.4 +		B	D
11.4 +		B	D
11.4 +		B	D
11.4 +		B	D
11.4 +		B	D
11.5 +		B	D
11.5 +		B	D

11.8 +

B

D

z21b9405 atob____.003

CURVE 1

PERCENT FORMATION RELATIVE TO TOTAL CONCENTRATION OF proton

0	50	1
+	+	+
+	+	+
+	+	+
+	+	+
+	+	+
+	+	+
+	+	+
+	+	+
+	+	+
+++++		
1.7 + A		*
1.7 + A		*
1.7 + A		*
1.7 + A		*
1.7 + A		*
1.8 + A		*
1.8 + A		*
1.8 + A		*
1.8 + A		*
1.9 + A		*
1.9 + A		*
2.0 + A		*
2.0 + A		*
2.1 + A		*
2.1 + A		*
2.2 + A		*
2.3 + A		*
2.4 + A		*
2.5 + A		*

2.6 +	A				*
2.9 +	A				*
3.4 +	A				*
5.8 + D					
5.8 + D					C
7.0 +B		D			C
7.0 +B		D		C	
7.4 + B		C		D	
8.9 +C E	B				D
9.2 +C E	B				D
9.4 +	E	B			D
9.6 +	E	B			D
9.9 +	B	E		D	
10.2 +	B		E	D	
10.3 +	B		D	E	
10.4 +	B		D		E
10.6 +	B	D			E
10.7 +	B	D			E
10.8 +	B	D			E
10.9 +	B	D			E
11.0 +	B	D			E
11.0 +	B	D			E
11.1 +	B	D			E
11.1 +	B	D			E
11.2 +	B	D			E
11.2 +	B	D			E
11.3 +	B	D			E

11.7 +BD

11.7 +BD

11.7 +BD

11.8 +BD

11.8 +BD

11.8 +BD

11.8 +BD

11.8 +BD

11.8 +BD

11.8 +BD

ภาคผนวก ง ความหมายของคำสั่งต่างๆที่ใช้ใน Sample Identification และ Comments

ใน Sample Identification และ Comments มีจำนวน 4 บรรทัดจะเป็นกลุ่มคำสั่งที่จะช่วยเปลี่ยนข้อมูลของโปรแกรม TR600 โดยโปรแกรม DCO ให้เป็นอินพุทสำหรับโปรแกรม ELE หรือ SUPERQUAD เพื่อคำนวณหาพารามิเตอร์ของอิเล็กทรอนิกส์และค่าคงตัวเสถียรภาพในการเกิดสารประกอบเชิงซ้อน ความหมายของคำสั่งต่างๆมีดังนี้

1. e21b9401 เป็นชื่อแฟ้มข้อมูลที่ได้จากการไทเทรตจะต้องใช้เป็นตัวอักษรภาษาอังกฤษและตัวเลขรวมกันครบ 8 ตัวพอดี ดังตัวอย่าง

e หมายถึง อิเล็กโทรด (c คือ คอปเปอร์ z คือ สังกะสี)

21 หมายถึง วันที่ 21

b หมายถึง เดือนกุมภาพันธ์ (เดือนมกราคม-ธันวาคม คือ a-1)

94 หมายถึง ปี 1994

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

2. ves[wat=25.0,aco1=0.5,acv=2.0]],

ves[...] หมายถึง กลุ่มข้อมูลที่เกี่ยวกับสารละลายในขวดสามคอ ซึ่งมีดังต่อไปนี้

wat=25.0 หมายถึง สารละลายโพแทสเซียมไนเตรด 0.5 โมลาร์ 25 มิลลิ
ลิตร

aco1=0.5 หมายถึง ความเข้มข้นของกรดไนตริกที่เติมลงในขวดสามคอ เท่า
กับ 0.5 โมลาร์

acv=2.0 หมายถึง ปริมาตรของกรดไนตริกที่เติมลงในขวดสามคอ เท่ากับ
2 มิลลิลิตร

aco1 เลข 1 จะเป็น RUNNING KEY ของตัวแปรในอินพุทของโปรแกรม ELE ซึ่งหมายถึง ความเข้มข้นของกรดไนตริกจะถูกนำไปคำนวณใหม่พร้อมกับตัวแปรตัวอื่น ๆ เพื่อให้ทราบค่าอย่างละเอียดและถูกต้อง ถ้าใช้เลข 0 แทนหมายถึงความเข้มข้นของกรดไนตริกจะเท่ากับ 0.5 โมลาร์ ตลอดการคำนวณ

3. bur[bco0=-0.5],

bur[...] หมายถึง กลุ่มข้อมูลที่เกี่ยวกับสารละลายในบิวเรตซึ่งมีดังต่อไปนี้

bur0=-0.5 หมายถึง ความเข้มข้นในหน่วยโมลาร์ของสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ เท่ากับ 0.5 โมลาร์

4. ele[eze1=425.0]

ele[...] หมายถึง กลุ่มข้อมูลที่เกี่ยวกับอิเล็กทรอนิกส์ ซึ่งมีดังต่อไปนี้

eze1=425.0 หมายถึง ค่าที่เดาตั้งต้นสำหรับค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน (E°)

เลข 1 คือ RUNNING KEY

บรรณานุกรม

1. จุฑาทิพย์ ตั้งพลเจริญ , นรพล สุขโช " การศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนชนิดไบนิวเคลียร์ของโลหะทรานส์ซัน" วิทยานิพนธ์ระดับปริญญาตรี, ภาควิชาเคมี , สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง, ปีการศึกษา 2534.
2. ชุติมา เลิศชวณะกุล เคมีวิเคราะห์ 1 พิมพ์ครั้งที่ 3 หน้า 16 สำนักพิมพ์ฝ่ายตำรา และอุปกรณ์การศึกษามหาวิทยาลัยรามคำแหง พ.ศ. 2526.
3. ธวัชชัย ศรีวิบูลย์ เคมีวิเคราะห์ 2 หน้า 21-59 สำนักพิมพ์ฝ่ายตำรา และอุปกรณ์การศึกษามหาวิทยาลัยรามคำแหง พ.ศ. 2529.
4. Avramovici-Grisaru, Schelly. and Sarel, Shalom., "Formation and Crystal Structure of 1-[N-Methylpyridoxylidenium]-2-[2'-N-Methylpyrodidinium]hydrazine Diperchlorate and Its Red Tautomer.", Reprint from The Journal of Organic Chemistry., 1990, Vol. 55, No. 18, pp. 5236-5241.
5. Bassett, J., Danney, R.C., Jeffery, G.H. and Mendham, J. Vogel's Textbook of Quantitative inorganic Analysis., William Clowes (Beccles) Limited , Beccles And London, 1982.
6. Gans, P., Sabatini, A. and Vacca, A., "Superquad", J. Chem. Soc., Dalton Trans., 1985 , pp. 1195-1200.
7. Iheanacho, Eugene N., Sarel, Shalom., Samuni, Amram., Avramovici-Grisaru, Schelly. and Spira, Dan T., "Growth Inhibition of *Plasmodium Falciparum* Involving Carbon Centered Iron-Chelate Radical (L, X⁻)-Fe(III) Based on Pyridoxal-Betaine. A Novel Type of Antimalarials Active Against Chloroquine-Resistant Parasites.", Free Rad. Res. Comms., Vol. 15, No. 1, pp. 1-10.

8. K. Nakamoto and A. E. Martell. Pyridoxine and Pyridoxal Analogs. III. Ultraviolet Absorption Studys and Solution Equilibria of 2- and 4- Hydroxymethyl-3-Hydroxypyridines and Pyridine-2, 3- and 4- Aldehydes, J. Am. Chem. Soc., 1959, 81, 5857
9. K. Nakamoto and A. E. Martell. Pyridoxine and Pyridoxal Analogs. IV. Ultraviolet Spectra and Solution Equilibria of 3- Methoxypyridine -2 (and 4-) -aldehydes and of 3-Hydroxy pyridine-2(and 4-) aldehydes, J. Am. Chem. Soc., 1959, 81, 5863
10. Rainer, M.J.A. and Rode, B.M. "The Complex Formation of Zinc (II) with GHL and Related Peptides", Inorganic Chimica Acta., 93(1984):109-115.
11. Shanbhag, Venkatesh M. and Martell, Arthur E., "Schiff Bases of Pyridoxal 5'-Phosphate and 5'-Deoxypyridoxal with Phenylglycine Derivatives and Their Metal Complexes.", Reprint from Inorganic Chemistry., 1990, Vol. 29, No. 5, pp. 1023-1031.
12. Sigel, Helmut. and Martin, R. Bruce., "Coordinating Properties of the Amide Bond. Stability and Structure of Metal Ion Complexes of Peptides and Related Ligands.", Chemical Reviews. , 1982 , Vol. 82, No. 4, pp. 385-426.