ภาคผนวก ก

ตัวอย่างการคำนวณ

ภาคผนวก ก

ตัวอย่างการคำนวณ

ก.1 การคำนวณขนาดผลึกและแลตทิซพารามิเตอร์

ขนาดของผลึกของโลหะคำนวณได้จากสมการของ Debye-Scherrer

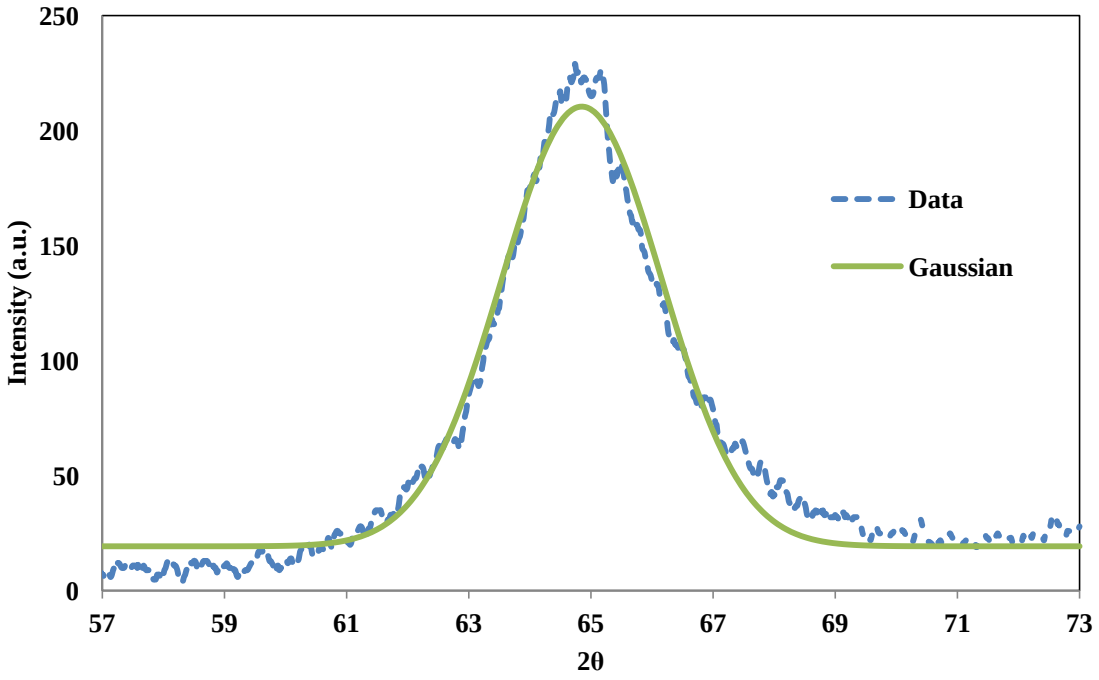
$$d = \frac{0.9\lambda_{K\alpha 1}}{\beta_{2\theta}\cos\theta_{max}} \qquad (ก.1)$$

เมื่อ $\lambda_{K\alpha_1}$ = ความยาวของคลื่น (1.5406 Å ,เมื่อใช้ Cu K_α)

$\beta_{2\theta}$= ความกว้างที่ครึ่งหนึ่งของความสูงของยอดที่สูงที่สุดของพีค (เรเดียน)

θ_{max} = มุมการเลี้ยวเบนสำหรับพีค (^{0})

รูปที่ ก.1 แสดงกราฟของ Au ที่ระนาบ (220) โดยพีคของการสะท้อนของตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C แสดงดังเส้นสีน้ำเงิน และ พีคการสะท้อนโดย Gaussian fitted แสดงดังเส้นสีเขียว



รูปที่ ก.1 การสะท้อนของ Au ระนาบ (220) สำหรับ Au/C

จากการ fitted Gaussian โดยโปรแกรม Origin , ทำให้ได้ค่าที่นำไปใช้คำนวณต่อสองค่าคือ

-ความกว้างที่ครึ่งหนึ่งของความสูงของยอดที่สูงที่สุดของพีค (FWHM) หรือค่า $\beta_{2\theta}$ หากจะนำค่าที่ได้จากโปรแกรมไปคำนวณต้องเปลี่ยนเป็นหน่วย เรเดียน

-ค่ามุมการเลี้ยวเบนที่มากที่สุดของพีค (θ_{max}) เมื่อหารด้วยสองจะทำให้ได้ค่า θ

<u>ตัวอย่างการคำนวณขนาดผลึกและแลตทิซพารามิเตอร์ของทองระนาบ (220)</u>

<u>ขนาดผลึกของ Au ที่ระนาบ (220)</u>

จากโปรแกรม $\beta_{2\theta}$คือ 0.060718 เรเดียน และθ คือ 32.44546° เรเดียน

ดังนั้น ขนาดผลึกเฉลี่ยของ Au คือ

$$d = \frac{0.9\times0.15406 \text{ นาโนเมตร}}{((0.060718\text{เรเดียน})\times(\cos(32.44546))}$$

$$= 2.7 \text{ นาโนเมตร}$$

<u>แลตทิซพารามิเตอร์ของ Au ที่ระนาบ (220)</u>

แลตทิซพารามิเตอร์ของ Au สามารถหาได้จากสมการของ Bragg

$$n\lambda = 2d\sin\Theta \qquad (ก.2)$$

พิจารณา n = 1 $$d = \frac{\lambda}{2(sin\theta)} \qquad (ก.3)$$

ในขณะที่ $$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \qquad (ก.4)$$

เมื่อ h, k และ l คือ ระนาบของผลึกที่สนใจ

a, b และ c คือ แลตทิซพารามิเตอร์

กรณีที่ระบบผลึกเป็นแบบ Cubic a = b = c

ค่า d-spacing สำหรับ Face-Centered Cubic จะได้เป็น

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2+k^2+l^2)}{a^2} \qquad (ก.5)$$

ที่ระนาบ (220) ของทอง

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(2^2+2^2+0\quad)}{a^2}$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(8)}{a^2}$$

$$d = \frac{a}{\sqrt{8}} \qquad (ก.6)$$

นำค่า d จากสมการ (ก.3) แทนลงในค่า d ของสมการ (ก.6)

$$\frac{\lambda}{2\sin\theta} = \frac{a}{\sqrt{8}}$$

$$a = \frac{\lambda\sqrt{8}}{2\sin\theta}$$

แทนค่า λ และ θ

$$a = \frac{1.5406 \text{ อังสตรอม } x\sqrt{8}}{2\ (\sin 32.44)}$$

เพราะฉะนั้นแลตทิซพารามิเตอร์ของ Au ที่ ระนาบ(220) มีค่า = 4.0959 นาโนเมตร

<u>ขนาดผลึกและแลตทิซพารามิเตอร์ของทองที่ระนาบ (111)</u>

<u>ขนาดผลึกของ Au ที่ระนาบ (111)</u>

การคำนวณหาขนาดผลึกใช้สมการในการคำนวณเดิม คือสมการ

$$d = \frac{0.9\lambda_{K\alpha 1}}{\beta_{2\theta}\cos\theta_{max}} \qquad (ก.1)$$

จากโปรแกรม $\beta_{2\theta}$= 0.054705 เรเดียน และθ = 19.18505° เรเดียน

$$d = \frac{0.9\times 0.15406 \text{ นาโนเมตร}}{((0.054705 \text{ เรเดียน})\times(\cos(19.18505))}$$

เพราะฉะนั้นขนาดผลึกของทองที่ระนาบ (111) = 2.68 นาโนเมตร

<u>แลตทิซพารามิเตอร์ของทองที่ระนาบ (111)</u>

จากสมการ

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2+k^2+l^2)}{a^2} \qquad (ก.5)$$

ที่ระนาบ (111) ของทอง

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(1^2+1^2+1^2)}{a^2}$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(3)}{a^2}$$

$$d = \frac{a}{\sqrt{3}} \qquad \text{(ก.7)}$$

นำค่า d จากสมการ (ก.3) แทนลงในค่า d ของสมการ (ก.7)

$$\frac{\lambda}{2\sin\theta} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

$$a = \frac{\lambda\sqrt{3}}{2\sin\theta}$$

แทนค่า λ และ θ

$$a = \frac{1.5406 \text{ อังสตรอม } x\sqrt{3}}{2 \sin 19.18505}$$

เพราะฉะนั้นแลตทิซพารามิเตอร์ของทองที่ระนาบ (111) = 4.0584 นาโนเมตร

ก.1.2 เปรียบเทียบการคำนวณขนาดผลึกและแลตทิซพารามิเตอร์ ระหว่างระนาบ (111) และ (220) ของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบควบคุมปริมาณโลหะรวมคงที่ 20%

ตารางที่ ก.1 เปรียบเทียบการคำนวณขนาดผลึกระหว่างระนาบ (111) และ (220)

ตัวเร่งปฏิกิริยา	ขนาดผลึก		ร้อยละของความแตกต่างทั้งสองระนาบ (%)
	ระนาบ (220)	ระนาบ (111)	
Au/C	2.6853	2.6835	0.07
Au_4Ni_1/C	3.1327	3.0979	0.01
Au_3Ni_1/C	4.4812	4.4768	0.09
Au_2Ni_1/C	4.9794	4.8999	0.02
Au_1Ni_1/C	4.8614	4.1475	0.04

ตารางที่ ก.2 เปรียบเทียบการคำนวณ แลตทิซพารามิเตอร์ ระหว่างระนาบ (111) และ (220)

ตัวเร่งปฏิกิริยา	แลตทิซพารามิเตอร์		ร้อยละความต่างของสองระนาบ (%)
	ระนาบ (220)	ระนาบ (111)	
Au/C	4.0595	4.0584	0.03
Au_4Ni_1/C	4.0511	4.0547	0.08
Au_3Ni_1/C	4.0528	4.0523	0.01
Au_2Ni_1/C	4.0557	4.0553	0.01
Au_1Ni_1/C	4.0572	4.0568	0.01

ก.2 การเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยา

ก.2.1 การเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C

การเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C ที่โหลดทอง 20%
ในปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยา 100 มิลลิกรัม จะมีปริมาณโลหะทอง 20 มิลลิกรัม

มวลโมเลกุลของทอง (Au) = 197 กรัม
มวลโมเลกุลสารเริ่มต้นของทอง ($HAuCl_4.3H_2O$, 99.9% Aldrich) = 394 กรัม
ตัวเร่งปฏิกิริยา 100 มิลลิกรัม ใช้ ทอง 20 มิลลิกรัม
หาปริมาณของสารเริ่มต้นของทองทองเมื่อใช้ทองในการโหลด 20 มิลลิกรัม
Au 197 มิลลิกรัม ใช้ $HAuCl_4.3H_2O$ 394 มิลลิกรัม
ดังนั้น Au 20 มิลลิกรัม ใช้ $HAuCl_4.3H_2O$ 40 มิลลิกรัม
หาปริมาณน้ำที่ละลายสารเริ่มต้นทอง
ความเข้มข้นของโซล Au ในสารละลายคือ 110 มิลลิกรัม/ลิตร หรือ 5.588×10^{-4} โมลาร์
ดังนั้น Au 20 มิลลิกรัม จะละลายในน้ำ (20 x 1000)/110 = 181.18 มิลลิลิตร

∴ ชั่งสารเริ่มต้นทอง 40 มิลลิกรัม ละลายในน้ำกลั่น 181.18 มิลลิตร

<u>พอลิไวนิลแอลกอฮอล์ (PVA)</u>

มวลโมเลกุลของ C=12, H=1, O=16

มวลโมเลกุลของ $(CH_2{=}CH\text{-}OH)_n$ คิดเฉพาะหน่วยที่ซ้ำกัน = (12+2(1)) + (12+1) + (16+1) = 44 กรัม

อัตราส่วนโดยโมล Au: PVA คือ 1:0.9 หรืออัตราส่วนโดยน้ำหนักคือ 1:0.2

สำหรับ Au 20 มิลลิกรัม ต้องใช้ PVA (20 x 0.2) /1 = 4 มิลลิกรัม

ความเข้มข้นของพอลิไวนิลแอลกอฮอล์ (PVA) คือ 1% โดยน้ำหนัก

พอลิไวนิลแอลกอฮอล์ 1 กรัม น้ำกลั่น 100 มิลลิตร

ถ้า พอลิไวนิลแอลกอฮอล์ 4 มิลลิกรัม น้ำกลั่นเท่ากับ 0.4 มิลลิตร

ต้องการเตรียมพอลิไวนิลแอลกอฮอล์ในน้ำกลั่น 5 มิลลิตร

น้ำกลั่น 0.4 มิลลิลิตร พอลิไวนิลแอลกอฮอล์ 4 มิลลิกรัม

ถ้า น้ำกลั่น 5 มิลลิลิตร ใช้ พอลิไวนิลแอลกอฮอล์ เท่ากับ 50 มิลลิกรัม

∴ ชั่งพอลิไวนิลแอลกอฮอล์ 50 มิลลิกรัม ละลายในน้ำกลั่น 5 มิลลิลิตร และดูดมาใช้ 0.4 มิลลิลิตร

<u>โซเดียมโบโรไฮไดรด์ ($NaBH_4$)</u>

มวลโมเลกุลของ Na = 23, B = 10.8, H = 1

มวลโมเลกุล ของ $NaBH_4$ 23 + 10.8 +4(1) = 37.8 กรัม

อัตราส่วนโดยโมลของ $Au:NaBH_4$ = 1:4

Au 20 มิลลิกรัม = $(0.02\ gAu / 197) = 1.015 \times 10^{-4}$ โมล

ดังนั้นต้องใช้ โซเดียมโบโรไฮไดรด์ = $1.015 \times 10^{-4} \times 4 = 4.06 \times 10^{-4}$ โมล

ความเข้มข้นของโซเดียมโบโรไฮไดรด์ สำหรับรีดักชัน Au คือ 0.1 โมลาร์

ดังนั้นปริมาณของโซเดียมโบโรไฮไดรด์ ที่ใช้คือ = $(4.06 \times 10^{-4} \times 1000)/0.1 = 4.06$ มิลลิลิตร

ต้องการเตรียมโซเดียมโบโรไฮไดรด์ ในน้ำกลั่น 5 มิลลิลิตร

หาปริมาณของโซเดียมโบโรไฮไดรด์ เมื่อใช้น้ำกลั่น 5 มิลลิลิตร ที่ทำให้มีความเข้มข้น 0.1 โมลาร์

น้ำกลั่น 4.06 มิลลิลิตร มี โซเดียมโบโรไฮไดรด์ 15.41มิลลิกรัม

เมื่อน้ำน้ำกลั่น 5 มิลลิลิตร มี โซเดียมโบโรไฮไดรด์ 18.98 มิลลิกรัม

∴ ชั่งโซเดียมบอโรไฮไดรด์ 18.98 มิลลิกรัม ละลายในน้ำกลั่น 5 มิลลิลิตร และดูดมาใช้ 4.06 มิลลิตร

<u>คาร์บอน</u>

สำหรับตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C จะมีปริมาณทอง 20 % ของน้ำหนักตัวเร่งปฏิกิริยา

เมื่อเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยา 100 มิลลิกรัม

ดังนั้นจะมีน้ำหนักคาร์บอน = 100-20 = 80 มิลลิกรัม

∴ ชั่งคาร์บอน 80 มิลลิกรัม ละลายในเอทานอลประมาณ 1-2 มิลลิลิตร

ก.2.2 การเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยาแบบควบคุมปริมาณโลหะรวมคงที่ 20%

การเตรียมด้วยวิธีนี้จะมีทองกับนิกเกิลรวมกัน 20% เช่น ถ้าเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยา 100 มิลลิกรัม

ปริมาณทองกับนิกเกิลรวมกันต้องมีค่าเท่ากับ 20 มิลลิกรัม

ตัวอย่างการคำนวณตัวเร่งปฏิกิริยา Au_4Ni_1/C

ที่ร้อยละ Au:Ni= 0.8:0.2

มวลโมเลกุล ของ Ni =58.7 กรัม มวลโมเลกุลของ Ni=58.7, Cl = 35.5, H=1

มวลโมเลกุลของสารเริ่มต้นนิกเกิล $NiCl_2 6H_2O$

= 237.71 กรัม

หามวลโมเลกุล เฉลี่ยของโลหะทองกับนิกเกิล $= (197 \times 0.8) + (58.7 \times 0.2)$

=169.31 กรัม โลหะ/โมล โลหะ

หา โมลรวมของโลหะ(ทองกับนิกเกิล) = (20 มิลลิกรัม โลหะ)/ (169.31 กรัมโลหะ/โมล โลหะ)

= 1.1813×10^{-4} โมล โลหะ

หา โมลของ Au = 1.1813×10^{-4} โมล โลหะ x 0.8

= 9.450×10^{-5} โมล Au

หา โมลของ Ni = 1.1813×10^{-4} โมล โลหะ x 0.2

= 2.3625×10^{-5} โมล Ni

คิดเป็นน้ำหนัก โดยนำ โมล x มวลโมเลกุล

Au = (9.450x10^{-5}โมล Au) x(197 กรัมAu/ โมล Au) = 18.6166 มิลลิกรัม Au

Ni = (2.3625 x 10 $^{-5}$โมล Ni)x (58.7 กรัมNi/ โมล Ni) = 1.3868 มิลลิกรัม Ni

ดังนั้นต้องชั่งสารเริ่มต้นของโลหะทั้งสองดังนี้

$HAuCl_4.3H_2O = \frac{(394 \times 18.6166)}{(197)}$ = 37.32 มิลลิกรัม

$NiCl_2 3H_2O = \frac{(237.7 \times 1.3686)}{(58.7)}$ = 5.5 มิลลิกรัม

ต้องชั่ง คาร์บอน = 100 -(18.62+1.38)= = 80 มิลลิกรัม

$\underline{NaBH_4}$

อัตราส่วนโดยโมลของ โลหะ:โซเดียมโบโรไฮไดรด์ = 1:4

โมลโลหะคือ 1.1813×10^{-4} โมล

ดังนั้นต้องใช้ โซเดียมโบโรไฮไดรด์ $= 1.1813 \times 10^{-4} \times 4$ = 4.73×10^{-4}โมล

ความเข้มข้นของ โซเดียมโบโรไฮไดรด์ สำหรับรีดักชัน Au คือ 0.1 โมลลาร์

ปริมาณของ $NaBH_4$ ที่ใช้ = $(4.73 \times 10^{-4} \times 1000)/0.1$

= 4.73 มิลลิลิตร

ดังนั้น ชั่งโซเดียมโบโรไฮไดรด์ 18.98 มิลลิกรัม ละลายในน้ำกลั่น 5 มิลลิลิตร

และดูดมาใช้ 4.73 มิลลิลิตร

$\underline{PVA}$

สำหรับ PVA ใช้ปริมาณเช่นเดียวกับการเตรียม Au/C

ก.2.3 การเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยาแบบควบคุมปริมาณทองคงที่ 20%

การเตรียมด้วยวิธีนี้ จะมีปริมาณทอง 20% ของน้ำหนักตัวเร่งปฏิกิริยา

เช่น เตรียมตัวเร่งปฏิกิริยา 100 มิลลิกรัม จะเท่ากับ

100 มิลลิกรัมตัวเร่งปฏิกิริยา – 20 มิลลิกรัมทอง = มิลลิกรัมนิกเกิล+ มิลลิกรัมคาร์บอน

ตัวอย่างการคำนวณ Au_4Ni_1/C

คือที่ร้อยละ Au:Ni= 0.8:0.2

หา โมล Au

เตรียม Au 20 มิลลิกรัม = (20 มิลลิกรัม Au)/ (197กรัม Au/โมล Au)

= 1.0152×10^{-4} โมล Au

จาก Au มีโมลมากกว่า Ni 4 เท่า

หาโมล Ni = $1.0152 \times 10^{-4} /4 = 2.5380 \times 10^{-5}$โมล Ni

คิดเป็นน้ำหนัก โดยนำ โมล x มวลโมเลกุล

Ni = (2.5380 x 10^{-5}โมล Ni) x (58.7 กรัมNi/ โมล Ni) = 1.4898 มิลลิกรัม Ni

ดังนั้นต้องชั่งสารเริ่มต้นของโลหะทั้งสองดังนี้

-$HAuCl_4.3H_2O$ $= \frac{(394\times20)}{(197)}$ = 40 มิลลิกรัม

-$NiCl_2 3H_2O$ $= \frac{(237.7\times1.4898)}{(58.7)}$ = 6.0328 มิลลิกรัม

-คาร์บอน = 100-(20+1.49) = 78.51 มิลลิกรัม

$\underline{NaBH_4}$

โซเดียมโบโรไฮไดรด์ ใช้ในปริมาณเดียวกับการเตรียมแบบควบคุมปริมาณโลหะรวม 20%

<u>PVA</u>

สำหรับ PVA ใช้ปริมาณเช่นเดียวกับการเตรียมแบบควบคุมปริมาณโลหะรวม 20%

ก.3 ปริมาณโลหะนิกเกิล ที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิค AAS

ตัวอย่างการคำนวณสำหรับตัวเร่งปฏิกิริยา Au_4Ni_1/C แบบควบคุมปริมาณโละรวมคงที่ 20%

โดยที่อัตราส่วนนี้จะมีปริมาณนิกเกิล 20%

ผลที่ได้จากการตรวจวัดปริมาณนิกเกิลด้วย AAS คือ 0.03 ppm

ปริมาตรของการกรองทั้งหมด คือ 129 มิลลิตร หรือ 0.129 ลิตร

น้ำหนักของนิกเกิลที่ได้จากการตรวจวัดด้วย AAS คือ

0.03 มิลลิกรัม/ลิตร x 0.129 ลิตร = 0.00387 มิลลิกรัม

ตอนเริ่มต้นในสารละลายของโซลของนิกเกิลมีปริมาณนิกเกิล 0.069266 มิลลิกรัม

คิดเป็น 20% นิกเกิล

ดังนั้น

(ปริมาณโลหะนิกเกิลที่ถูกดูดซับลงบนคาร์บอน = ปริมาณโลหะนิกเกิลเริ่มต้น – ปริมาณโลหะนิกเกิลที่หลงเหลืออยู่ในสารละลาย)

= 0.069266 มิลลิกรัม – 0.00387 มิลลิกรัม = 0.065369 มิลลิกรัม

เพราะฉะนั้น ปริมาณโลหะนิกเกิลที่ถูกดูดซับลงบนคาร์บอน = 0.065369 มิลลิกรัม

จากนิกเกิลเริ่มต้น 0.069266 มิลลิกรัม 20%

ถ้า 0.065369 มิลลิกรัม จะได้ 0.065369 มิลลิกรัม x (20%/0.069266 มิลลิกรัม)

= 18.89 %

ร้อยละปริมาณโลหะนิกเกิลที่ถูกดูดซับลงบนคาร์บอน 18.89 %

ตารางที่ ก.3 เปรียบเทียบปริมาณนิกเกิลที่ดูดซับลงบนคาร์บอนระหว่างต้องการเตรียมจริงกับเตรียมได้ของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบควบคุมปริมาณโลหะรวม 20%

ตัวเร่งปฏิกิริยา	ปริมาณโลหะนิกเกิลเริ่มต้นที่ต้องการเตรียมจริง (%)	ปริมาณโลหะนิกเกิลที่ถูกดูดซับลงบนคาร์บอนที่เตรียมได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค AAS (%)	ร้อยละความต่างของนิกเกิลระหว่างที่ต้องการเตรียมจริงกับที่เตรียมได้จริง (%)
Au_4Ni_1/C	20	18.89	5.55
Au_3Ni_1/C	25	23.04	7.84
Au_2Ni_1/C	33	31.63	4.15
Au_1Ni_1/C	50	45.19	9.62
Ni/C	100	97.32	2.68

ตารางที่ ก.4 เปรียบเทียบปริมาณนิกเกิลที่ดูดซับลงบนคาร์บอนระหว่างต้องการเตรียมจริงกับเตรียมได้ของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบควบคุมปริมาณทองคงที่ 20%

ตัวเร่งปฏิกิริยา	ปริมาณโลหะนิกเกิลเริ่มต้นที่ต้องการเตรียมจริง (%)	ปริมาณโลหะนิกเกิลที่ถูกดูดซับลงบนคาร์บอนที่เตรียมได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค AAS (%)	ร้อยละความต่างของนิกเกิลระหว่างที่ต้องการเตรียมจริงกับที่เตรียมได้จริง (%)
Au_4Ni_1/C	20	18.34	8.30
Au_3Ni_1/C	25	22.82	8.72
Au_2Ni_1/C	33	31.67	4.03
Au_1Ni_1/C	50	46.88	6.24
Ni/C	100	97.32	2.68

ก.4 วงการเลี้ยวเบนของอิเล็กตรอน

การเลี้ยวเบนของอิเล็กตรอน (electron diffraction) ใน TEM เกิดจากการที่ลำอิเล็กตรอนตกกระทบระนาบหนึ่งๆ ในแผ่นชิ้นงานและเกิดการเลี้ยวเบนเป็นมุมเท่าๆกัน เป็นไป

ตามสมการของแบรกก์ (Bragg's equation) ดังนี้

$2 d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$

โดยที่ d_{hkl} คือ ระยะห่างระหว่างระนาบ (hkl)

θ คือ มุมตกกระทบ

λ คือ ความยาวคลื่น

สำหรับภาพการเลี้ยวเบนที่ศึกษากันโดยทั่วไปในกล้อง TEM จะใช้ค่า n=1

$r_{hkl} / L = \tan 2\theta$

และจากเงื่อนไข Bragg จะได้

$\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta$

ปกติ θ จะมีค่าน้อยมากสำหรับกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องผ่าน

ดังนั้น $\tan 2\theta \approx 2\theta$ และ $\sin\theta \approx \theta$

จะได้เป็น

$$L\lambda = r_{hkl} d_{hkl}$$

โดยที่ $L\lambda$ คือ camera constant และความสัมพันธ์ระหว่าง แลตทิซพารามิเตอร์ (*a*) กับระยะระนาบ (d-spacing; d_{hkl}) ของวัสดุที่มีโครงสร้างแบบคิวบิก คือ simple cubic, body center cubic และ face center cubic [32]

<u>ตัวอย่างการคำนวณ Au/C</u>

จากรูปการเลี้ยวเบนของ A/C แสดงดังรูปที่ 4.11

และ L = 30 เซนติเมตร ; λ = 0.0251 อังสตรอม ; a = 4.0526 อังสตรอม

จากรูป มีค่า r = 330.8342 พิเซล = 3.3083 อังสตรอม

จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค TEM ค่า $L\lambda$ เป็นค่าคงที่ที่ได้มาจากการขยายของกล้องโดยจะมีค่าคงที่เท่ากับ 775 หากหารด้วย r ที่มีหน่วยเป็น พิกเซล จะได้ d_{hkl} ที่มีหน่วยเป็นอังสตรอม

$d_{hkl} = L\lambda / r_{hkl}$

$= 775 / 330.8342$

$= 2.3426$ อังสตรอม

จาก $d_{hkl} = L\lambda / r_{hkl} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$\sqrt{h^2+k^2+l^2}$ $= d_{hkl} / a$

$\sqrt{h^2+k^2+l^2}$ = 2.3426 อังสตรอม/4.0526 อังสตรอม

= 1.7230 ซึ่งมีค่าประมาณ $\sqrt{3}$

เพราะฉะนั้น

$\sqrt{h^2+k^2+l^2} = \sqrt{1^2+1^2+1^2}$

= ระนาบ (111)

และที่ระนาบ (200), (220), และ (311) คำนวณเช่นเดียวกัน

ก.5 การหาพื้นที่ผิวว่องไว

งานวิจัยนี้ใช้ SI 1287 potentiostat of Solatron และโปรแกรม Corrwar
ในการทดสอบเทคนิคไซคลิกโวแทมเมทรี (cyclic voltametry ; CV) และโครโนแอมเปอร์โรเมทรี (Chronoamperometry; CA)
และคำนวณพื้นที่ผิวว่องไว (ESA) ของตัวเร่งปฏิกิริยาจากพีครีดักชัน 2D-AuO ที่ความต่างศักย์ประมาณ 0 โวลต์
ค่าประจุในสารละลายโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์มีค่า $0.000386\ \text{coul/cm}^2_{\text{Au}}$ [35]
ปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยาบนพื้นผิวของขั้วอิเล็กโทร $(cm^2_{electrode})$ มีค่า $200\ \mu\text{g}_{\text{Cat}}$
ตัวเร่งปฏิกิริยา $100\ \text{mg}_{\text{Cat}}$ มีปริมาณทอง $20\ \text{mg}_{\text{Au}}$

$$\text{พื้นที่ของพีครีดักชัน} = \frac{\text{ค่าประจุของตัวเร่งปฏิกิริยาที่ได้จากการอินทิเกรต (charge) coul/cm}^2_{\text{electrode}}}{0.000386\ \text{coul/cm}^2_{\text{Au}}}$$

$$\text{พื้นที่ผิวว่องไว} = \frac{\text{พื้นที่ของพีครีดักชัน cm}^2_{\text{Au}}}{\text{cm}^2_{\text{electrode}}} \times \frac{\text{cm}^2_{\text{electrode}}}{200\ \mu\text{g}_{\text{Cat}}} \times \frac{100\ \text{mg}_{\text{Cat}}}{20\ \text{mg}_{\text{Au}}} \times \frac{\text{m}^2}{10^4\text{cm}^2_{\text{Au}}}$$

ตัวอย่างการคำนวณค่าพื้นที่ผิวว่องไวของตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C

พื้นที่ของพีครีดักชันของตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C หาได้จากโปรแกรม Corr war $= 0.00354\ \text{coul/cm}^2_{\text{electrode}}$

$$\text{พื้นที่ของพีครีดักชัน} = \frac{0.00354\ \text{coul/cm}^2_{\text{electrode}}}{0.000386\ \text{coul/cm}^2_{\text{Au}}}$$

$$= 9.17098\ \text{cm}^2_{\text{Au}}/\text{cm}^2_{\text{electrode}}$$

$$\text{ดังนั้น พื้นที่ผิวว่องไว} = \frac{9.17098\ \text{cm}^2_{\text{Au}}}{\text{cm}^2_{\text{electrode}}} \times \frac{\text{cm}^2_{\text{electrode}}}{200\ \mu\text{g}_{\text{Cat}}} \times \frac{100\ \text{mg}_{\text{Cat}}}{20\ \text{mg}_{\text{Au}}} \times \frac{\text{m}^2}{10^4\text{cm}^2_{\text{Au}}}$$

$$\text{เพราะฉะนั้นพื้นที่ผิวว่องไวของทอง} = 43.78\frac{m^2}{g_{Au}}$$

ก.6 การคำนวณค่าอัตราเสื่อม

ความเสถียรของตัวเร่งปฏิกิริยาหาได้จากอัตราการเสื่อมระยะยาวของตัวเร่งปฏิกิริยา (δ) ซึ่งคำนวณจากกราฟ (dI/dt) โดยกราฟจะมีความเสถียรที่เวลา 600 วินาที [37]

$$\delta = (100/I_0) \times (dI/dt)_{t>600} \qquad (3.4)$$

โดยที่ δ คือ อัตราเสื่อม ($\%s^{-1}$)

I_0 คือ ค่ากระแสเริ่มต้น

$(dI/dt)_{t>600}$ คือ ค่าความชันเฉลี่ยของค่ากระแสตั้งแต่ช่วงเวลา 600 วินาทีขึ้นไป

ตัวอย่างการคำนวณหาค่าอัตราเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C ที่ความต่างศักย์ 0.3V

ค่า I_0 และค่า $(dI/dt)_{t>600}$ ได้จากโปรแกรม Corrwar

$I_0 = 0.002053$

$(dI/dt)_{t>600} = -1.7481 \times 10^{-7}$

$$\delta = \frac{100}{0.002053} \times -1.7481 \times 10^{-7}$$

$$= 0.00851 \ \%s^{-1} \text{ หรือ } 8.51 \ (10^{-3} \ \% \ s^{-1})$$

เพราะฉะนั้นอัตราเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา Au/C $8.51 \ (10^{-3} \ \% \ s^{-1})$