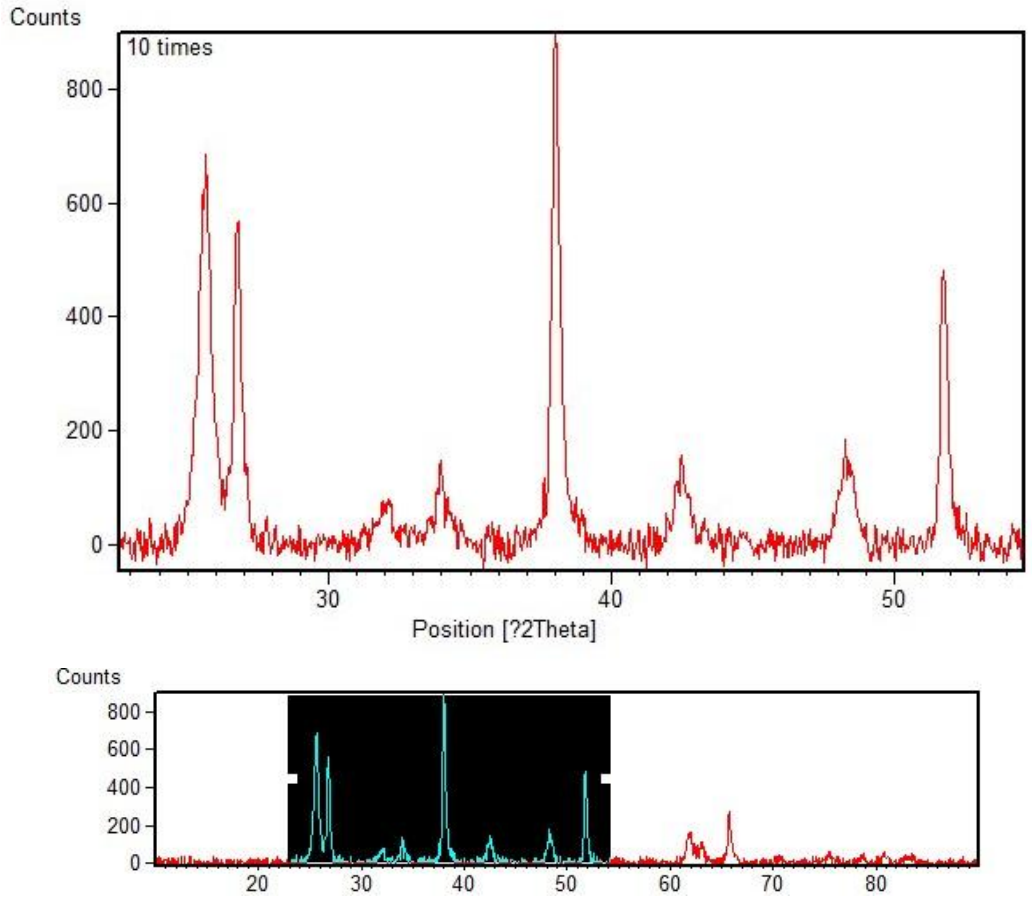
ภาคผนวก ค

แสดงการคำนวณขนาดของอนุภาค

1. คำนวณหาขนาดของอนุภาคโดยใช้สมการเชียเรอร์ (Scherrer)

$$B = \frac{0.9 \cdot \lambda}{FWHM \cdot \cos\theta}$$ เมื่อ B คือขนาดของอนุภาค (nm)



รูปที่ ค.1 แสดงรูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของชั้นไทเทเนียมไดออกไซด์บนกระจกนำไฟฟ้าของเซลล์ที่ทำการฉีดพ่นชั้นกระเจิงแสงไทเทเนียมไดออกไซด์ที่ 10 ครั้ง

หาค่า $FWHM = 0.41 = 2\theta$

$\theta = 0.20°$

เปลี่ยนเป็นหน่วยเรเดียน $\therefore FWHM = \frac{0.25\pi}{180} = 1.11 \times 10^{-3}\pi$

$2\theta = 25.62°$

$\therefore \theta = 12.81°$

เปลี่ยนเป็นเรเดียนดังนี้ $= \frac{12.81\pi}{180} = 0.071\pi$

$\cos 0.071\pi = 0.999$

$$\lambda = 1.54 \times 10^{-10} m$$

แทนค่าลงในสมการ $B = \frac{0.9 \times 1.54 \times 10^{-10}}{1.11 \times 10^{-3} \times 0.999}$

$$B = \frac{1.386 \times 10^{-10}}{1.109 \times 10^{-3}}$$

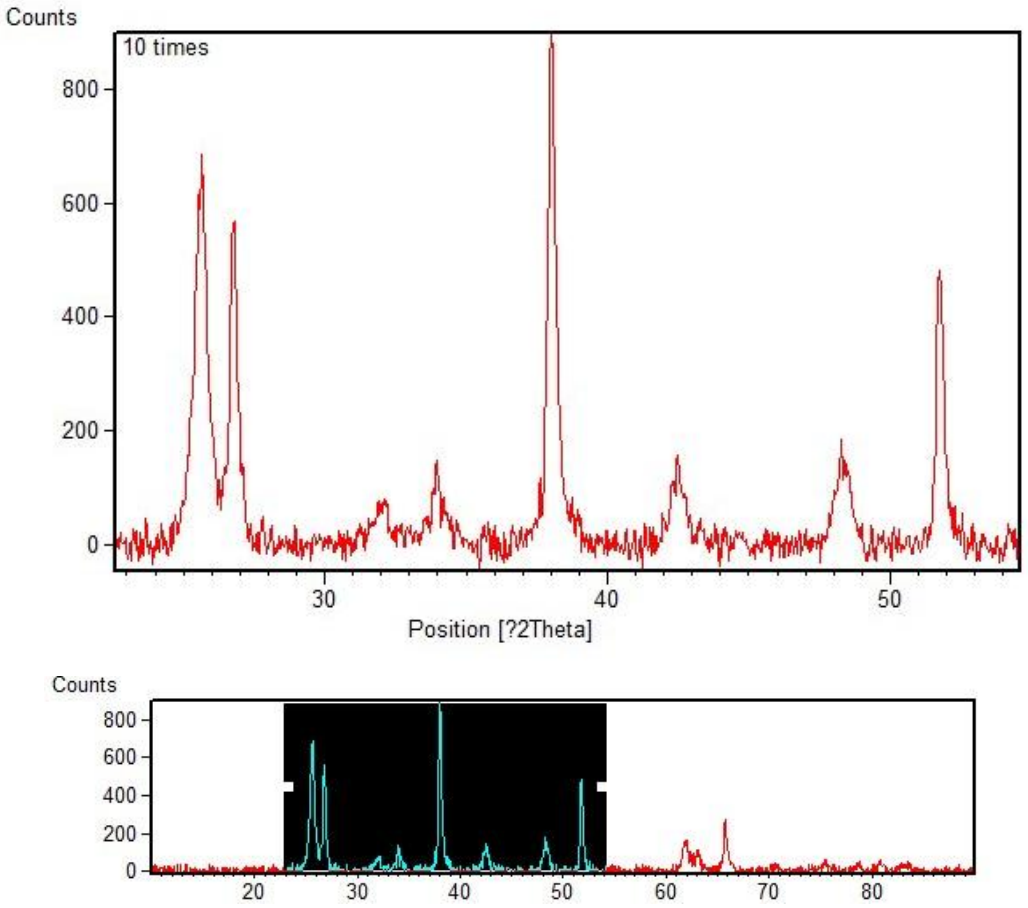
$$B = 1.249 \times 10^{-7}$$

$$B = 0.124 \times 10^{-6}$$

$$B = 124nm$$

2. แสดงการคำนวณหาระนาบของพีคไทเทเนียมไดออกไซด์

พีคที่ได้จากการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของชั้นไทเทเนียมไดออกไซด์บนกระจกนำไฟฟ้า สามารถนำมาหาระนาบ ได้ดังนี้



รูปที่ ค. 2 แสดงรูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของชั้นไทเทเนียมไดออกไซด์บนกระจกนำไฟฟ้าของเซลล์ที่ทำการฉีดพ่นชั้นกระเจิงแสงไทเทเนียมไดออกไซด์ที่ 10 ครั้ง

เลือกมุม 2θ จากกราฟ XRD

หาค่า d_{hkl} และ f

เมื่อ $\theta = 12.81°$

$\lambda = 1.54 \times 10^{-10}$

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

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

$$= \frac{1.54 \times 10^{-10}}{2\sin(12.81)}$$

$$= \frac{1.54 \times 10^{-10}}{2(0.2217)}$$

$$= \frac{1.54 \times 10^{-10}}{0.443}$$

$\therefore d_{hkl} = 3.476A°$

$= 0.347 \times 10^{-9}$

หาค่า f จาก $2d_{hkl} \sin\theta = \lambda$ เมื่อ F คือ แฟคเตอร์โครงสร้าง

$$\frac{\sin\theta}{\lambda} = \frac{1}{2d_{hkl}}$$

$$= \frac{1}{2}(0.347)$$

$\therefore \frac{\sin\theta}{\lambda} = 0.173$

โดยการคำนวณจากตาราง Atomic Scattering Factor f_0 (พรชัย ชิณสา, 2559)

เมื่อ $0.1 \rightarrow 17.0$

$0.2 \rightarrow 14.4$

ดังนั้น $0.1 \rightarrow -2.6$

และ $0.073 = x$

$$0.1x = (-2.6) \times 0.073$$

$$0.1x = \frac{-0.1898}{0.1}$$

$x = -1.898$

ได้ $\therefore 17.0 + (-1.898) = 15.102$

$\therefore f = 15.102$

จาก $F = 2f$

$= 2(15.024)$

$\therefore F = 30.204$

ไทเทเนียมไดออกไซด์มีโครงสร้างผลึกแบบ tetragonal ชนิด bcc จากเซลล์หน่วยแบบ bcc ประกอบด้วยอะตอมชนิดเดียวกัน 2 อะตอมที่ตำแหน่ง 000 และ $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ สามารถเขียนแฟคเตอร์โครงสร้างได้เป็น

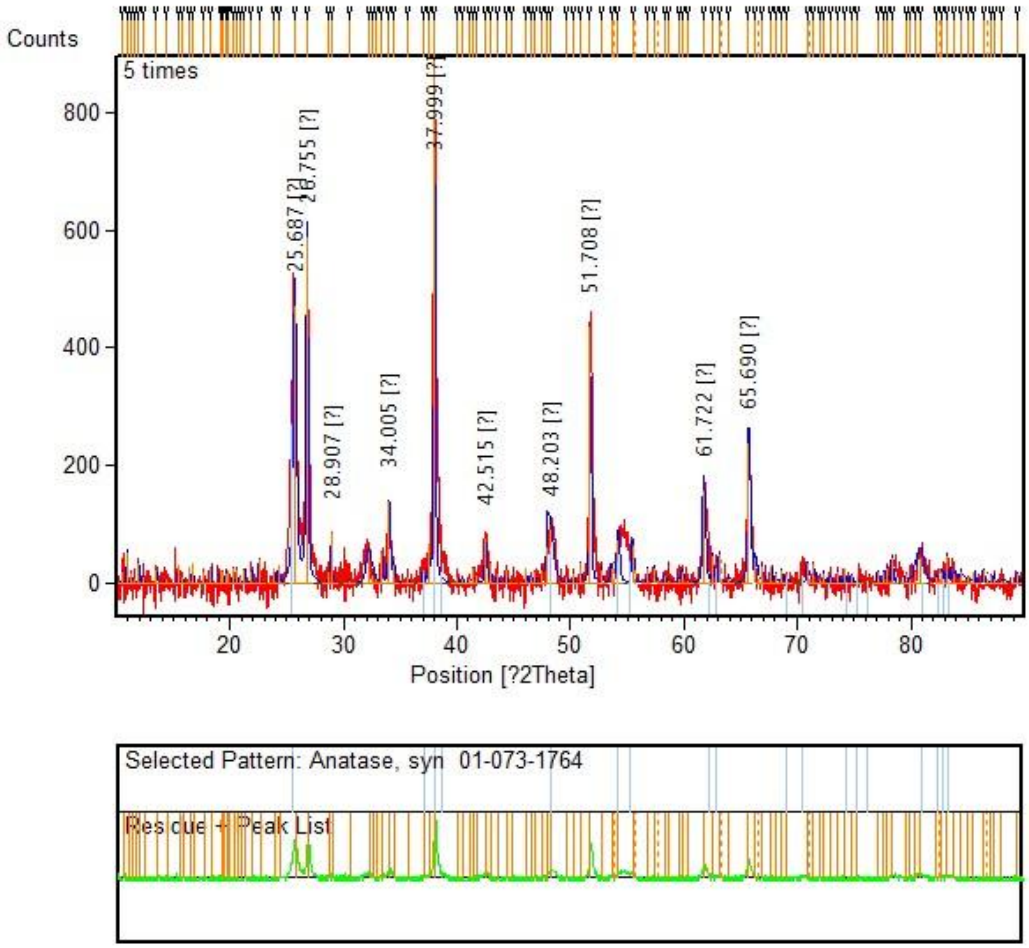
$$F = fe^{2\pi(0)} + fe^{2\pi i(\frac{h}{2}+\frac{h}{2})} = f(1+e^{\pi i(hkl)}) \quad \text{.....(ก. 1)}$$

จากสมการ (ก. 1) สามารถวิเคราะห์หาได้ว่า

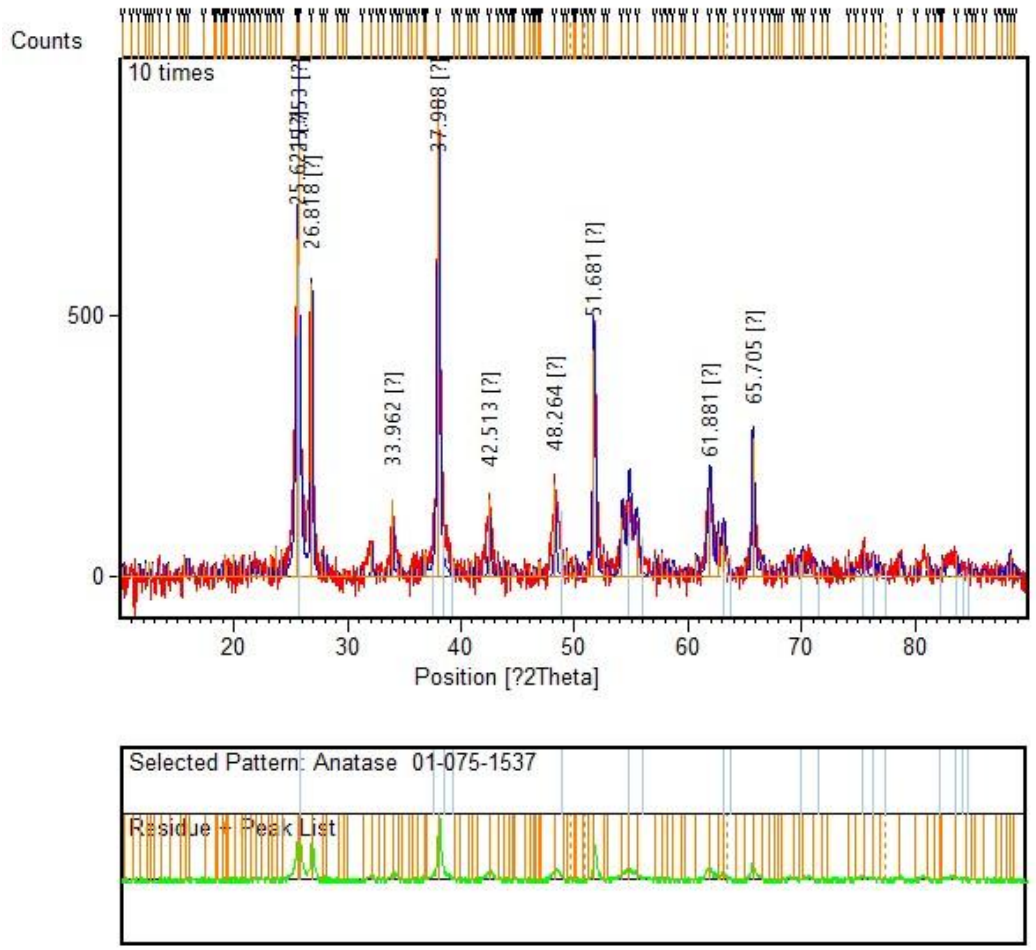
$F = 2f$ หรือ $F^2 = 4f^2$ ถ้า $h+k+l$ เป็นเลขคู่

ดังนั้นสำหรับระนาบ (hkl) ที่ให้ค่าผลรวมของเลขดัชนีมิลเลอร์ ถ้า $h+k+l$ เป็นเลขคู่ จะเป็นระนาบที่ทำให้เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ได้ระนาบเหล่านี้ได้แก่ (110) (101) (200) (211)เป็นต้น (พรชัย ชิณสา, 2559)

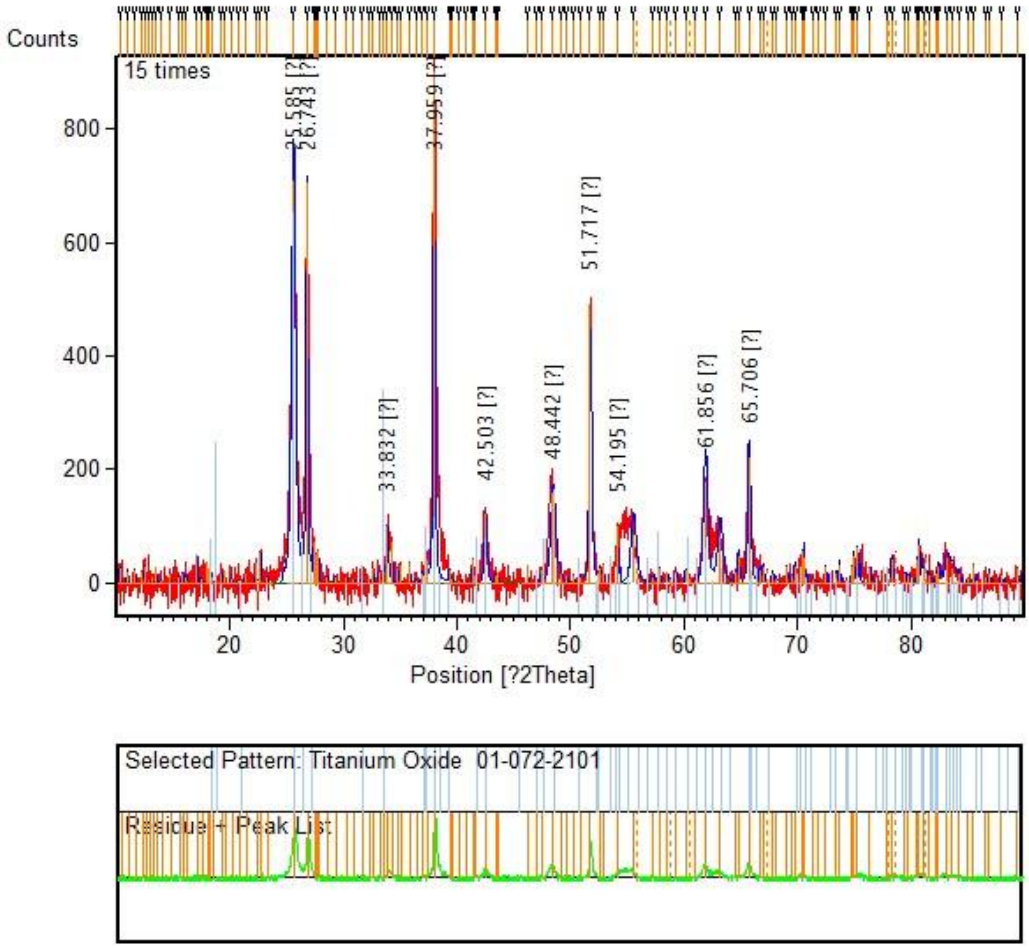
ดังนั้น จากการคำนวณสามารถบอกได้ว่า ระนาบที่ได้จากกราฟ XRD คือ ระนาบ (101) ซึ่งให้ค่าผลรวมของเลขดัชนีมิลเลอร์ ถ้า $h+k+l$ เป็นเลขคู่



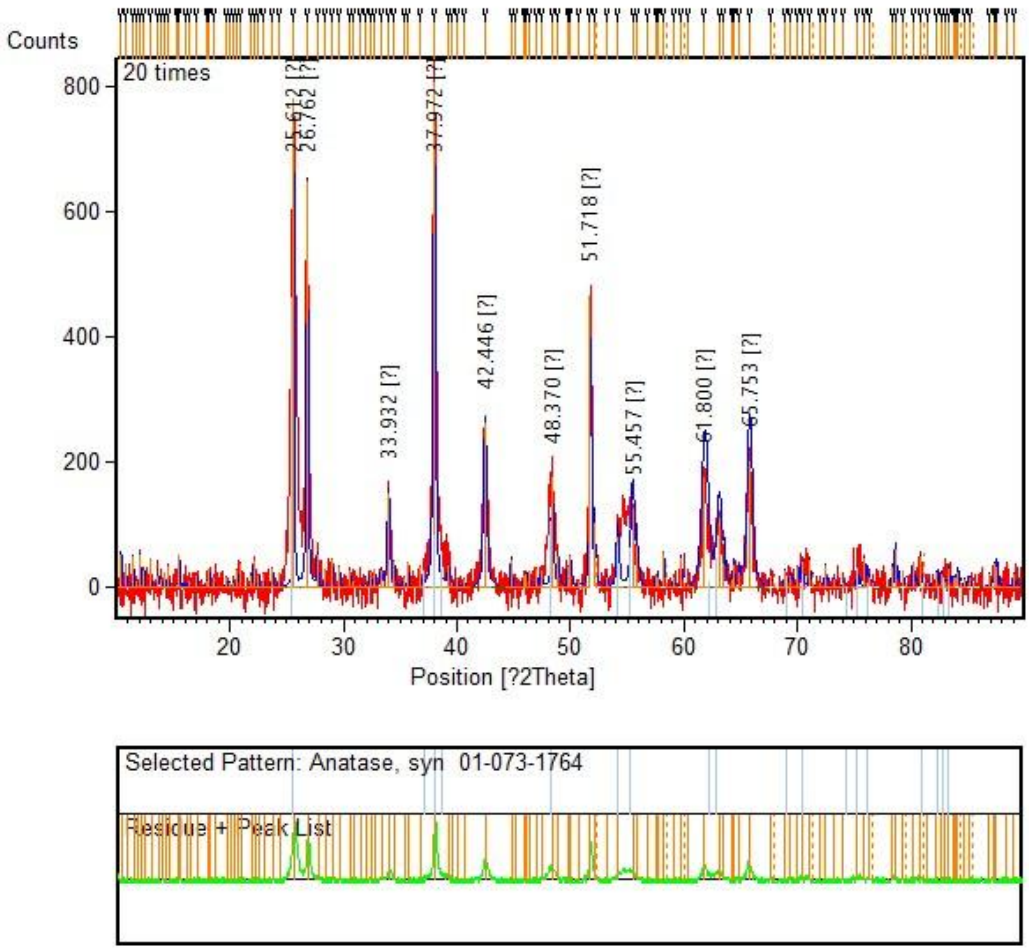
รูปที่ ค.3 แสดงกราฟการวิเคราะห์ระนาบของไทเทเนียมไดออกไซด์ที่ฉีดพ่น 5 ครั้ง



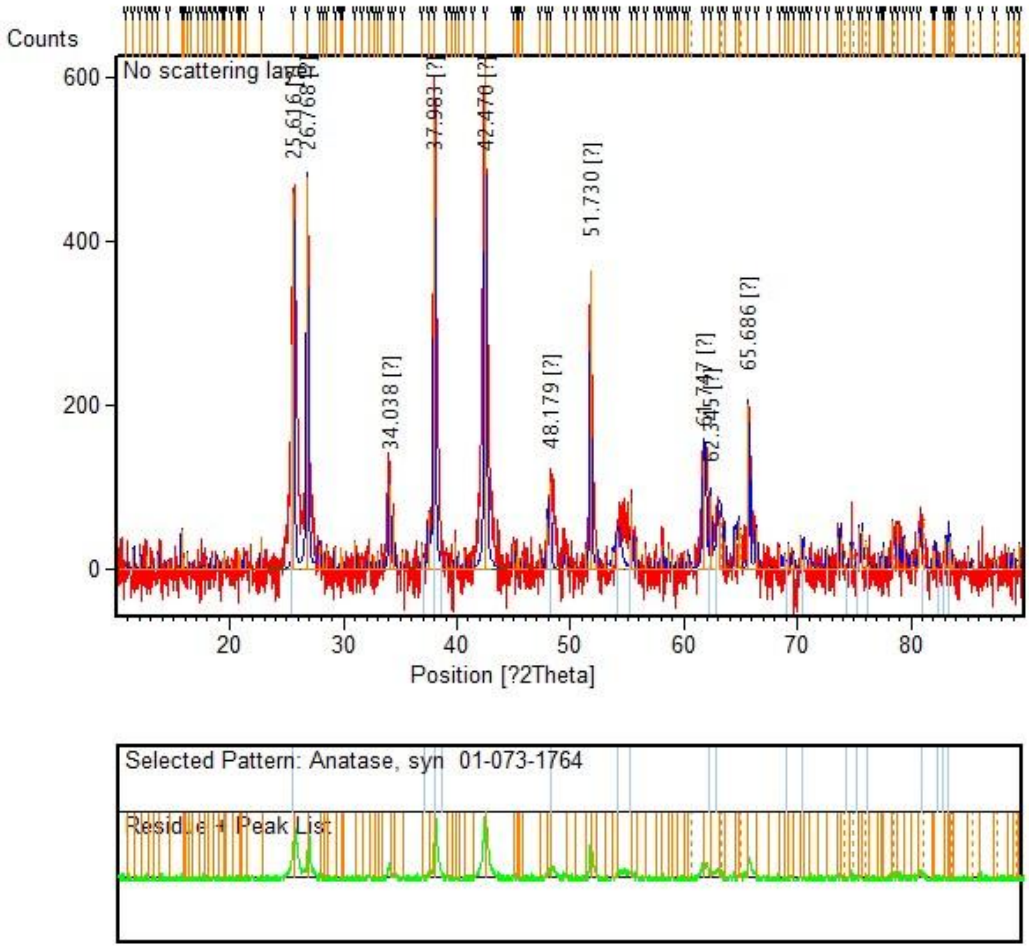
รูปที่ ค.4 แสดงกราฟการวิเคราะห์ระนาบของไทเทเนียมไดออกไซด์ที่ฉีดพ่น 10 ครั้ง



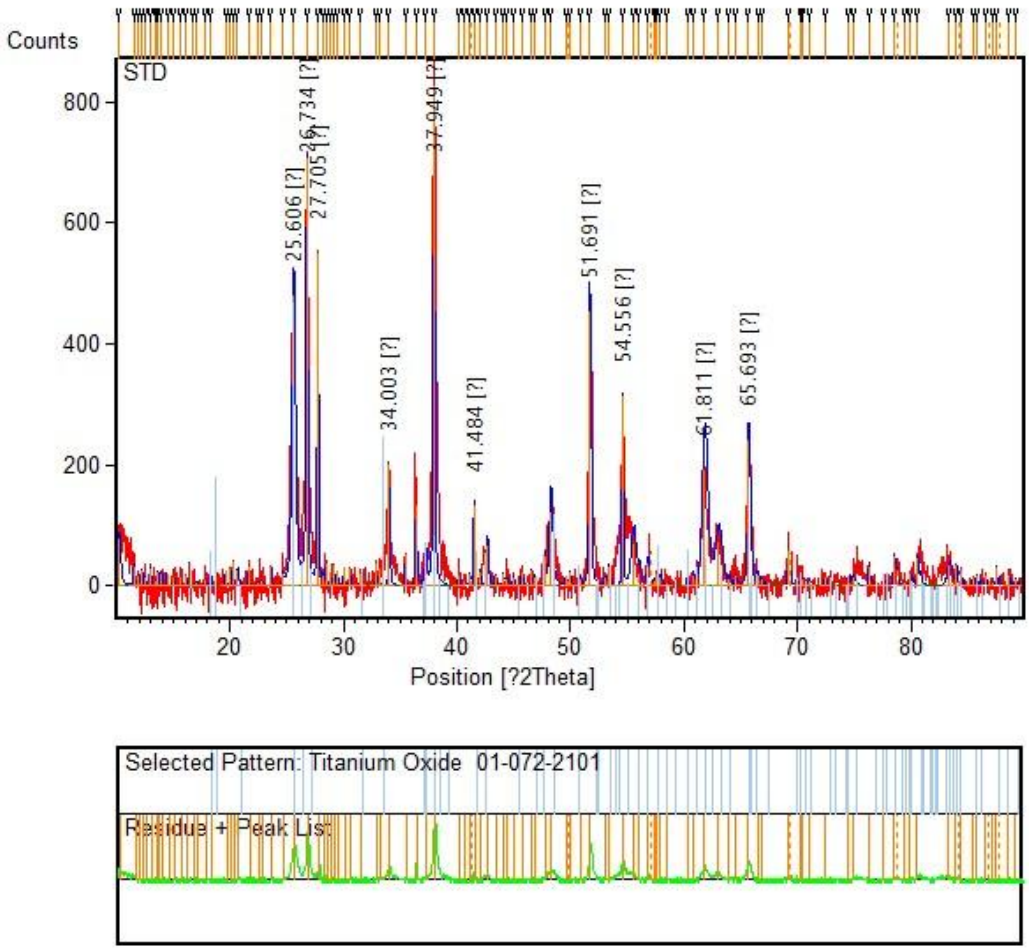
รูปที่ ค.5 แสดงกราฟการวิเคราะห์ระนาบของไทเทเนียมไดออกไซด์ที่ฉีดพ่น 15 ครั้ง



รูปที่ ค. 6 แสดงกราฟการวิเคราะห์ระนาบของไทเทเนียมไดออกไซด์ที่ฉีดพ่น 20 ครั้ง



รูปที่ ค. 7 แสดงกราฟการวิเคราะห์ระนาบของไทเทเนียมไดออกไซด์ที่ไม่มีชั้นกระเจิงแสง



รูปที่ ค. 8 แสดงกราฟการวิเคราะห์ระนาบของไทเทเนียมไดออกไซด์ของเซลล์มาตรฐาน

2.1 การอ้างอิงรูปแบบข้อมูลมาตรฐานของเซลล์มาตรฐาน (Reference Pattern 01-075-1537)

Name and formula

Reference code:	01-075-1537
Mineral name:	Anatase
ICSD name:	Titanium Oxide
Empirical formula:	O_2Ti
Chemical formula:	TiO_2

Crystallographic parameters

Crystal system:	Tetragonal
Space group:	I41/amd
Space group number:	141
a (?):	3.7300
b (?):	3.7300
c (?):	9.3700
Alpha (?):	90.0000
Beta (?):	90.0000
Gamma (?):	90.0000
Calculated density (g/cm^3):	4.07
Volume of cell (10^6 pm^3):	130.36
Z:	4.00
RIR:	5.20

Subfiles and Quality

Subfiles:	Inorganic
	Mineral
	Alloy, metal or intermetalic
	Corrosion
	Pharmaceutical
	ICSD Pattern
Quality:	Calculated (C)

Comments

ICSD collection code:	031064
Test from ICSD:	No R value given.
	At least one TF missing.

References

Primary reference:	*Calculated from ICSD using POWD-12++*, (1997)
Structure:	Parker, R.L., *Z. Kristallogr., Kristallgeom.,Kristallphys., Kristallchem.*, **59**, 1, (1924)

Peak list

No.	h	k	l	d [A]	2Theta[deg]	I [%]
1	1	0	1	3.46551	25.686	100.0
2	1	0	3	2.39467	37.528	4.2
3	0	0	4	2.34250	38.396	13.8
4	1	1	2	2.29833	39.164	7.3
5	2	0	0	1.86500	48.791	21.4
6	1	0	5	1.67454	54.775	13.2
7	2	1	1	1.64228	55.944	13.2
8	2	1	3	1.47140	63.137	1.7
9	2	0	4	1.45905	63.734	7.6
10	1	1	6	1.34378	69.952	5.1

No.	h	k	l	d [A]	2Theta [deg]	I [%]
11	2	2	0	1.31875	71.481	4.1
12	1	0	7	1.25990	75.381	0.5
13	2	1	5	1.24599	76.373	6.2
14	3	0	1	1.23253	77.361	1.7
15	0	0	8	1.17125	82.245	0.2
16	3	0	3	1.15517	83.645	0.3
17	2	2	4	1.14916	84.183	2.5
18	3	1	2	1.14383	84.666	1.2

Stick Pattern