

สัญญาเลขที่ **MRG5280073**

ชื่อโครงการ การสังเคราะห์, จลนพลศาสตร์และเทอร์โมไดนามิกส์ของการสลายตัวของสาร

โลหะฟอสเฟตไฮเดรต

ชื่อหัวหน้าโครงการวิจัยผู้รับทุน ดร.บรรจง บุญชม

ชื่อหน่วยวิจัยที่ปรึกษา ผศ.ดร.ไฉนพร ด้านวิทย์

ระยะเวลาโครงการ 24 เดือน (15 มีนาคม พ.ศ. 2552 ถึงวันที่ 15 มีนาคม พ.ศ. 2554)

บทคัดย่อ

ได้สังเคราะห์ไฮเดรตของโลหะ (II) ฟอสเฟต ได้แก่ $Mn_{0.5}Ca_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot H_2O$, $Mn_{0.5}Fe_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ และ $Co_{0.5}Fe_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ ด้วยวิธีอย่างง่าย รวดเร็วและประหยัดผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการสลายตัวของสารเหล่านี้พบว่าเป็น $MnCaP_4O_{12}$, $MnFeP_4O_{12}$ และ $MnFeP_4O_{12}$ ตามลำดับ ได้คำนวณพลังงานกระตุ้นของการสลายตัวของสารเหล่านี้โดยหลักการไอโซคอนเวอร์ชันของ Kissinger เพื่ออธิบายกลไกการสลายตัวและพิกัดจลนพลศาสตร์ของแข็งไฮเดรต พบว่าตัวแปรจลนพลศาสตร์ (พลังงานกระตุ้น; E_a , แฟกเตอร์พรีเอกซ์โปเนนเชียล; A , และรูปแบบจลนพลศาสตร์) และฟังก์ชันเทอร์โมไดนามิกส์ (เอนทัลปี; ΔH^* , เอนโทรปี; ΔS^* , พลังงานอิสระกิบส์; ΔG^*) ของการสลายตัวของสารที่เตรียมขึ้นให้ค่าที่สอดคล้องกัน ได้นำสารที่เตรียมขึ้นและผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการสลายตัวของสารไปตรวจสอบด้วยเทคนิค กล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราด, การเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์, พูเรียร์แทรนซ์ฟอร์มอินฟราเรด อธิบายสเปกตรัมของสารที่เตรียมขึ้นและผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการสลายตัวของสารในรูปแบบการสั่นของหน่วยย่อย $H_2PO_4^-$, $P_4O_{12}^{4-}$ และ H_2O ที่เป็นองค์ประกอบหลักภายในสารที่เตรียมขึ้นได้ ได้นำเสนอความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิจลนพลศาสตร์การสลายตัวกับความยาวคลื่นของการสั่นพันธะที่ก่อให้เกิดการสลายพันธะในแต่ละกลไกทางความร้อน ซึ่งให้ผลการเปรียบเทียบกับผลการทดลองสเปกโทรสโกปีการสั่นเป็นอย่างดี ได้รายงานสมบัติทางกายภาพและเคมีของสารที่เตรียมได้ทั้งหมดนี้เป็นครั้งแรก ซึ่งมีความสำคัญต่อการนำไปประยุกต์ใช้อย่างจำเพาะเจาะจง

คำสำคัญ: ทวีโลหะ(II)ไดไฮโดรเจนฟอสเฟตไฮเดรต; ทวีโลหะไฮโคเลเตตระฟอสเฟต; การสลายตัวของความร้อน; จลนพลศาสตร์การสลายตัว; เทอร์โมไดนามิกส์การสลายตัว;

สัญญาเลขที่ **MRG5280073**

Research title: Synthesis, Kinetics and Thermodynamics of Thermal Decomposition of Metal Phosphate Hydrates

Investigator Dr. Banjong Boonchom

Mentor Asst. Prof. Dr. Chanaiporn Danvirutai

Research periods 24 mouths (15 March 2009 -15 March 2011)

ABSTRACT

Metal(II) phosphates hydrates namely $\text{Mn}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and $\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ were synthesized by a simple, rapid and cost-effective method. Their thermal decomposition products were found to be $\text{MnCaP}_4\text{O}_{12}$, $\text{MnFeP}_4\text{O}_{12}$ and $\text{CoFeP}_4\text{O}_{12}$, respectively. The activation energies of the decomposition reactions of three phosphates hydrates were calculated by isoconversional methods of Kissinger, which were used to determine the mechanism and identify the type of water in solid hydrates. The kinetic parameters (activation energies; E_a , pre-exponential factor; A , kinetic models, n) and thermodynamic functions (enthalpy; ΔH^* , entropy; ΔS^* , Gibb's free energy; ΔG^*) calculated for the decomposition of the synthesized solids were found to be consistent. The synthesized solids and their thermal transformation products were characterized by scanning electron microscopy (SEM), X-ray powder diffraction (XRD) and Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. FTIR spectra of the synthesized solids and their thermal transformation products were assigned based on the H_2PO_4^- , $\text{P}_4\text{O}_{12}^{4-}$ and H_2O subunits in each structure. The relations between thermal decomposition temperatures and wavenumbers of breaking bond in each thermal mechanism were proposed, which give to be a good agreement with spectroscopic result. Chemical and physical properties of the synthesized solids and their thermal transformation products were reported for the first time, which are important for specific applications.

Keywords: Binary metal (II) dihydrogen phosphate hydrates, Binary cyclotetraphosphate, Thermal decomposition, Thermal decomposition kinetic, Thermal decomposition thermodynamics