

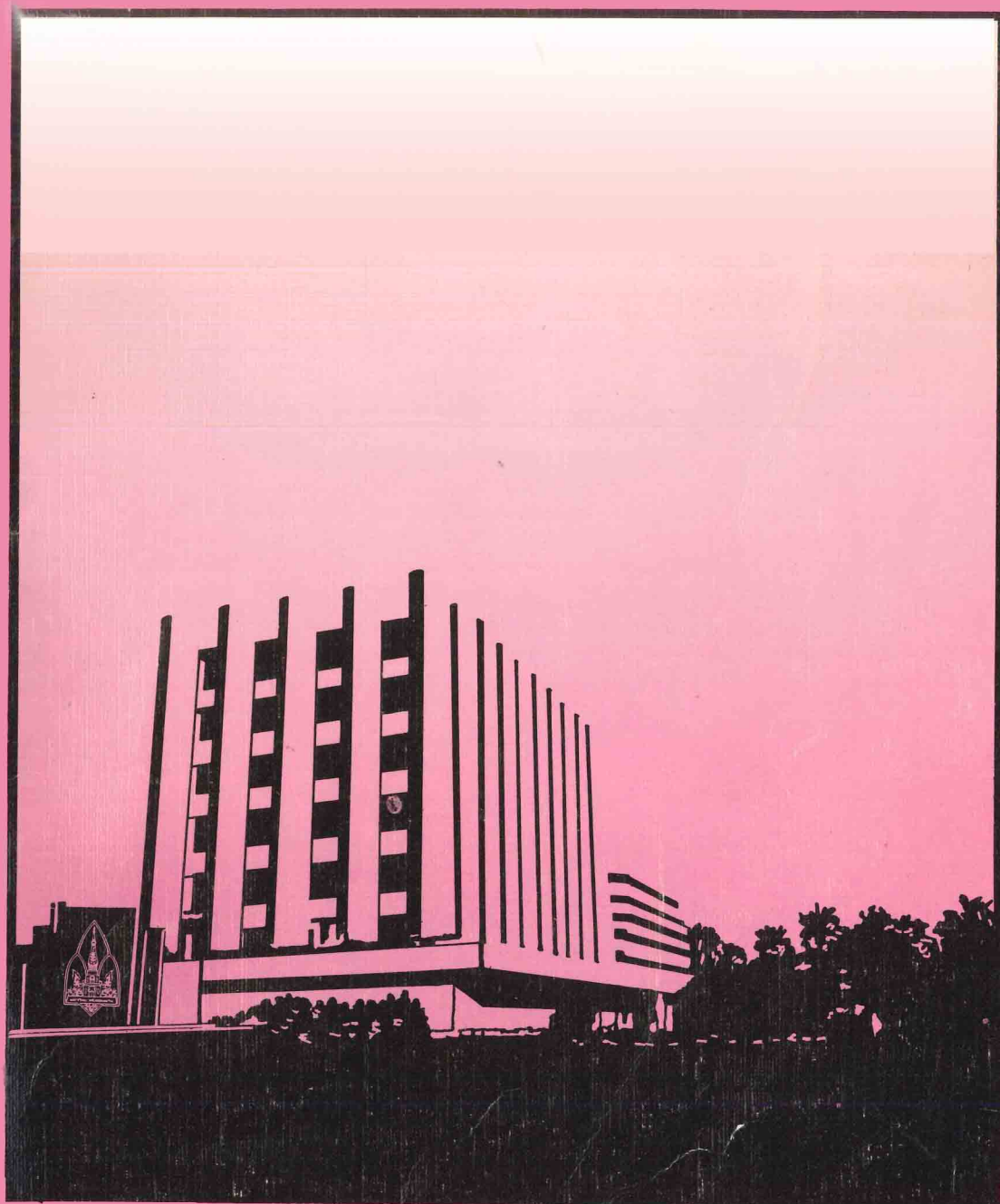


วารสาร

# วิทยาศาสตร์ชุมชน

THE JOURNAL OF SCIENCE KHONKAEN UNIVERSITY

ปีที่ 19 ฉบับที่ 3 กรกฎาคม - กันยายน 2534





วารสาร

ISSN 0125-2384

# วิทยาศาสตร์ปู.

THE JOURNAL OF SCIENCE KHONKAEN UNIVERSITY

## เจ้าของ

คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

## สำนักงาน

ตึก 6 ห้องสมุดคณะวิทยาศาสตร์

มหาวิทยาลัยขอนแก่น

## วัตถุประสงค์

1. เพื่อส่งเสริมและเผยแพร่วิชาการในสาขาวิชาต่าง ๆ ทางด้านวิทยาศาสตร์
2. เพื่อเผยแพร่ผลงานด้านการวิจัย และการศึกษา ค้นคว้าของอาจารย์และนักศึกษา
3. เพื่อเป็นสื่อกลางการแลกเปลี่ยนความรู้ และแนวความคิดทางวิชาการระหว่างอาจารย์ นักศึกษาและผู้สนใจ ทั้งภายในและภายนอกสถาบัน

## กำหนดออก

ปีละ 4 ฉบับ

ฉบับที่ 1 มกราคม – มีนาคม

ฉบับที่ 2 เมษายน – มิถุนายน

ฉบับที่ 3 กรกฎาคม – กันยายน

ฉบับที่ 4 ตุลาคม – ธันวาคม

ค่าบำรุง ปีละ 40 บาท ข่ายปลีกเล่มละ 12 บาท

## การบอกรับเป็นสมาชิก

แจ้งความจำนงค์เป็นจดหมาย หรือกรอกใบสมัครเป็นสมาชิก พร้อมส่งค่าบำรุงเป็นธนาคัตติ หรือเช็คไปรษณีย์ในนามของนางบุญคุ้ม เหลือล้ำ ฝ่ายจัดการ ส่งจ่ายป.ท.มหาวิทยาลัยขอนแก่น จ.ขอนแก่น 40002

## ที่ปรึกษา

บรรณาธิการ

บรรณาธิการผู้ช่วย

กองบรรณาธิการ

คณะบดีคณะวิทยาศาสตร์

รองคณบดีฝ่ายวิชาการ

สุวิน บุศราคัม

กรกช อินทราพิเชฐ

ปฤษณา กลัษอุดม

ขวัญใจ ดันสุวรรณ

พิสิฏฐ์ เจริญสุดใจ

สุวรรณ เนียมสนิท

สุพล บริพันธ์

วิชา ไชยศิรามงคล

สงวน พงศ์กิจวิฑูร

ฝ่ายศิลป์และภาพ

กิลิน ดิณนรเศรษฐ

ทรงเวทย์ เป้าชัย

ฝ่ายเหรียญก

ลักขณา สุขบาง

ฝ่ายจัดการ

บุญคุ้ม เหลือล้ำ

บุษราภรณ์ หงษ์แก้ว

สนธิ์ วรจินา

สมศักดิ์ อุ้นจันท์

พยอม เฉลิมพลาตย์



บทความหรือข้อคิดเห็นใด ๆ ในวารสารนี้เป็นของผู้เขียน ไม่จำเป็นต้องสอดคล้องกับทัศนะของกองบรรณาธิการ



### Publisher

Faculty of Science, Khon Kaen University,  
 Thailand.

### Office

Faculty of Science Library, Building 6, Khon  
 Kaen University.

### Objectives

1. To promote and propagate knowledge in  
 all fields of science.
2. To publish results from research and  
 studies by academic staff and students.
3. To be a medium for the exchange of  
 knowledge and ideas among staff, stu-  
 dents and those interested from both  
 inside and outside the institute.

### Publishing terms

four issues per annual volume  
 Issue no. 1 January - March  
 Issue no. 2 April - June  
 Issue no. 3 July - September  
 Issue no. 4 October - December

### Subscription rate

40 baht per annum. Single issue price 12  
 baht.

### Membership

Membership request can be made by letter  
 or by completing the membership form, with the  
 fee paid in the form of a postal order or postal  
 cheque sent to Mrs. Boonkoom Lualon, Managing  
 Committee, Khon Kaen University Post Office,  
 Khon Kaen University, Khon Kaen 40002.

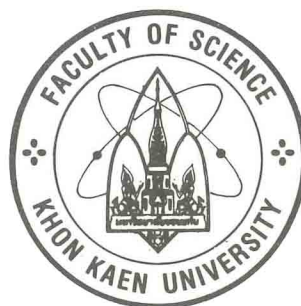
### Advisory Committee

Editor  
 Associate Editor  
 Editorial Board

Artis

Treasurer  
 Managing Committee

Dean, Faculty of Science  
 Associate Dean for Academic Affairs  
 Suwin Busaracome  
 Korakod Intrapichet  
 Prisana Klubudom  
 Kwanjai Tansuwan  
 Pisit Chareonsudchal  
 Suwantha Niamsanlt  
 Suphol Borlan  
 Vichuda Chaisivamonkol  
 Kilen Tinnoraset  
 Songwate Bousechal  
 Luckana Sukban  
 Sangaun Pongkltwittoon  
 Boonkoom Lualon  
 Bussaraporn Duangkornnai  
 Oan Mahamool  
 Somsak Unjantee  
 Payom Dejpoomataya



## บรรณาธิการแถลง

ในฉบับนี้ กองบรรณาธิการเพิ่มข่าววิทยาศาสตร์ โดยยังคงรักษารูปแบบการนำเสนอผลการวิจัยและบทความทางด้านการประยุกต์ทางวิทยาศาสตร์ไว้ด้วย ในเมื่อบทบาทของวารสาร วิทยาศาสตร์ มข. นั้นมาในแนวนี้ จำนวนบทความที่ส่งมายังกองบรรณาธิการจึงน้อยลงไปนิดตา ทั้งนี้ทำให้ต้องพิจารณาบทความสาระของวารสาร วิทยาศาสตร์ มข. เสียใหม่กระมัง

โดยคำนึงถึงว่า ผู้อ่านวารสารวิทยาศาสตร์ มข. ส่วนใหญ่เป็นนักวิทยาศาสตร์ และนักศึกษา รองลงไปเป็นนักศึกษา ดังนั้น เป้าหมายที่จะเปลี่ยนไป คือ การเสนอบทความที่มีสาระเชื่อมโยงระหว่างงานวิจัยระดับสูงกับตำราเรียน หรืออีกนัยหนึ่งคือ วารสารวิทยาศาสตร์ มข. จะเป็นสะพานเชื่อมต่อระหว่างผลการวิจัยระดับสูงกับตำราเรียน หนทางนี้กระมังที่จะทำให้มีผู้เขียน บทความส่งมาให้เราพิจารณามากขึ้น นักเรียนนักศึกษาจะได้อาศัยวารสารวิทยาศาสตร์ มข. เป็นข้อมูลเพื่อการค้นคว้าทำรายงานในการเรียนวิชาต่าง ๆ

ท่านผู้อ่านคิดอย่างไร กองบรรณาธิการของเราอยากทราบมาก

## ข่าววิทยาศาสตร์

### การตัดสินใจแบบเบย์

ปัจจุบันทฤษฎีการตัดสินใจแบบเบย์ (Bayesian) ถูกนำมาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์เรื่องค่าใช้จ่ายและผลกำไรของโรงงานอุตสาหกรรม เช่น อุตสาหกรรมเกี่ยวกับการผลิตยาและการจำหน่ายยารักษาโรค โดยใช้หลักเกณฑ์คือ พยายามทำให้ค่าสูญเสียที่คาดหวัง (Expected Lost) มีค่าต่ำสุดหรือพยายามทำให้ผลตอบแทนที่คาดหวัง (Expected Gain) มีค่าสูงสุด

จาก Constructing Release Targets for Drug Products: Bayesian Decision Theory Approach.  
Applied Statistics Vol 40 , No.3 , 1991 , Page 381-391 .

### คอมพิวเตอร์ PenPoint ความพยายามที่ไม่สูญเปล่า

Computer เป็นอุปกรณ์ที่มีประโยชน์ แต่หลายคนไม่กล้าใช้ด้วยเหตุผลหลายประการ และสำหรับงานที่ต้องการความคล่องตัว Computer ไม่สามารถให้สิ่งเหล่านี้ได้เลย แม้ว่าจะมีการพัฒนาเครื่องวางตั้ง (Laptop) ก็ตาม ปัจจุบันทั่วโลกกำลังตะลึงและจับตามองเทคโนโลยีใหม่ล่าสุด นั่นคือ Computer ที่ใช้ปากกา (Penbased Computer) สิ่งที่ถูกติดตัวมี 2 ชิ้น คือตัวเครื่องขนาด 9x13x1 นิ้ว น.น. 4 ปอนด์ครึ่ง และปากกา พัฒนาโดยบริษัท GO ซึ่งเป็นผู้เชี่ยวชาญทางด้านปัญญาประดิษฐ์ สามารถติดต่อกับโลกภายนอกได้ โดยผ่านอุปกรณ์บางอย่าง

จาก ไมโครคอมพิวเตอร์ ฉบับที่ 71 มิถุนายน 34 หน้า 214-221

วิชุดา รายงาน

## สารอินทรีย์ป้องกันการเหือกแข็ง

ทำไมปลาที่อยู่ในบริเวณขั้วโลกสามารถทนต่อสภาวะที่เป็นน้ำแข็งได้ ชื่อนาสงสัยนี้เป็นที่สนใจของนักวิทยาศาสตร์มานานแล้วในช่วงปี 1960-1970 นักวิทยาศาสตร์ได้ศึกษาและพบว่าปลาเหล่านั้นสร้างโปรตีนชนิดหนึ่งขึ้นเพื่อให้ร่างกายสามารถทนต่อสภาพเยือกแข็งได้ แต่ก็ได้คิดถึงการผลิตเพื่อนำไปประยุกต์ใช้ประโยชน์ต่อไป เมื่อเร็ว ๆ นี้มีกลุ่มนักวิทยาศาสตร์ จากสถาบัน Virginia Polytechnic และ State University นำโดย Thomas Caceci และผู้ร่วมงานได้รายงานถึงการใส่โปรตีนจากปลาดังกล่าวเป็นต้นแบบในการสร้างโปรตีนที่มีโมเลกุลใหญ่ขึ้นเรียกว่า PGX28L โดยการใส่ยีนที่จะสร้างโปรตีนนี้ลงในแบคทีเรีย *Escherichia coli* ซึ่งในขณะที่เขารายงานนี้พบว่าแบคทีเรียสามารถสร้างโปรตีน PGX28L ได้ในปริมาณเป็นไมโครกรัมเท่านั้น แต่เมื่อได้ก็ตามด้ามี่โรงงานที่สามารถผลิตโปรตีนชนิดนี้ในปริมาณมาก ๆ ก็สามารถนำไปพ่นบนถนน เครื่องบินหรือแม้แต่พืชไร่ พืชสวนเพื่อป้องกันการเหือกแข็งในสภาวะที่เย็นจัดได้ นอกจากนี้เขายังเชื่อว่าถ้าใส่ยีนนี้ในพืชแล้วพืชจะสามารถสร้างโปรตีนป้องกันการเหือกแข็งได้เอง

จาก Popular Science September 1991, p. 26-28.

ขวัญใจ รายงาน

## รับประทานบรอคคอลลีปรุงสุกหรือดิบดี ?

เมื่อปีที่แล้วนักวิทยาศาสตร์ชาวแคนาดารายงานว่า พบสารยับยั้งมะเร็ง(anticancer)ในบรอคคอลลีสด เมื่อไม่นานมานี้ นักวิทยาศาสตร์ชาวอเมริกันยังพบว่าการรับประทานบรอคคอลลีที่ปรุงสุกแล้วจะช่วยป้องกันโรคมะเร็งโลหิตแดงแข็งได้ นอกจากนี้ Joseph T. Vanderslice รายงานว่า บรอคคอลลีสด 4 ออนซ์ มีวิตามินซีมากเป็นสองเท่าของส้มคันแซ่แข็ง 100 มิลลิกรัมแต่ในบรอคคอลลีที่ปรุงสุกแล้วหรือแซ่แข็งจะมีปริมาณของวิตามินซีลดลงครึ่งหนึ่ง และเนื่องจากวิตามินซีเป็นแอนติออกซิแดนท์ในเลือดจึงช่วยป้องกันโรคมะเร็งโลหิตแดงแข็งได้ ดังนั้น ควรรับประทานบรอคคอลลีสดกันดีกว่า (ทั้งนี้ควรคำนึงถึงยาฆ่าแมลงที่ติดมากับพืชด้วย)

จาก Science News, June 9, 1990, p. 367.

ขวัญใจ รายงาน

## การวิเคราะห์ทางทฤษฎีเกี่ยวกับแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุล ฟอร์มามาไมด์-น้ำ

An intermolecular potential function for formamide-water  
derived from ab-initio molecular orbital calculation

ผศ.ดร.สุนันทา เสงรัมย์ \*

### บทคัดย่อ

ได้ทำการสร้างฟังก์ชันศักย์สำหรับระบบฟอร์มามาไมด์-น้ำขึ้น เพื่อใช้เป็นฟังก์ชันพื้นฐานในการศึกษาสมบัติของระบบนี้โดยวิธีการ Monte Carlo simulation เริ่มต้นจากการคำนวณหาแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลของฟอร์มามาไมด์และน้ำที่ตำแหน่งต่างๆโดยวิธี ab-initio molecular orbital self-consistent field calculation เป็นจำนวนทั้งสิ้น 448 ตำแหน่ง และได้สร้างฟังก์ชันศักย์เพื่อใช้แทนแรงดึงดูดทั้งหมดของระบบ โดยใช้วิธี Multidimensional non-linear least square procedure ฟังก์ชันศักย์ที่เหมาะสมมีลักษณะดังนี้

$$E(F,W) = \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^3 \left( \frac{A_{ij}}{r_{ij}^4} + \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{C_{ij}}{r_{ij}^{10}} \right)$$

เมื่อ  $r_{ij}$  คือระยะห่างระหว่างอะตอม  $i$  ของฟอร์มามาไมด์ และอะตอม  $j$  ของน้ำ  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , และ  $C_{ij}$  คือตัวแปร (fitting constant)

\* ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

### Abstract

An intermolecular potential function for the system formamide-water has been constructed for using in Monte Carlo simulation of this system. The procedure started with the calculation of intermolecular potentials using ab-initio molecular orbital self consistent field calculations. There were 448 energy points calculated and these were fitted by the Multidimensional non-linear least square procedure into a function

$$E(F,W) = \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^3 \left( \frac{A_{ij}}{r_{ij}^4} + \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{C_{ij}}{r_{ij}^{10}} \right)$$

where  $r$  is the distance between atom  $i$  of formamide and atom  $j$  of water.  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , and  $C_{ij}$  are fitting constants.

### 1. บทนำ

เป็นที่ทราบกันดีว่าการคำนวณทางทฤษฎีควอนตัมโดยใช้คอมพิวเตอร์มีบทบาทที่สำคัญในการวิเคราะห์โครงสร้างทางโมเลกุลของสารทั้งสารบริสุทธิ์และสารประกอบ การคำนวณทางควอนตัมสามารถทำได้ในระดับ ab-initio ซึ่งให้ผลการคำนวณที่ถูกต้องแน่นอน และในระดับ semiempirical ซึ่งจะให้ผลการคำนวณในระดับโดยประมาณ ปัจจุบันนักวิทยาศาสตร์ได้พัฒนาแนวทางการคำนวณในลักษณะอื่น เพื่อนำไปใช้ในการคาดคะเนพฤติกรรมอื่นๆของสาร เช่นได้พัฒนาระบบการ Monte Carlo Simulation(MC) และระบบการ Molecular Dynamics Simulation(MD) เพื่อใช้ในการศึกษาเกี่ยวกับโครงสร้างและสถานะของสารเชิงซ้อนและของเหลว ซึ่งเป็นสถานะที่ได้รับการศึกษาน้อยที่สุด ข้อมูลเกี่ยวกับของเหลวที่จะสามารถหาได้จาก MC และ MD simulation ได้แก่ โครงสร้างในสถานะของเหลว โครงสร้างของน้ำโดยรอบโมเลกุลของตัวถูกละลาย พฤติกรรมเกี่ยวกับการดูดและการผลักดัน สมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์ และทิศทางการเคลื่อนที่ของของเหลว ข้อมูลเหล่านี้ไม่สามารถหาได้โดยวิธีการทดลองเนื่องจากมีความซับซ้อนในการแปลผลสูงมาก

ระบบการ MC และ MD simulation สามารถนำมาใช้ในการศึกษาระบบที่มีโมเลกุลขนาดใหญ่เช่น โปรตีน เอนไซม์ และกรดนิวคลีอิกได้ดี น้ำและไอออนต่างๆเช่น  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$  และ  $\text{Ca}^{2+}$  จัดว่ามีความสำคัญทั้งในทางเคมี และทางชีวภาพ ดังนั้นจึงมีความจำเป็นต้องศึกษาพฤติกรรมของน้ำและไอออนเหล่านี้ กับสารประกอบชีวภาพโดยระบบการ MC และ MD simulation

การคำนวณทาง MC และ MD simulation ของระบบใดๆก็ตาม จะต้องต้องมีข้อมูลเกี่ยวกับแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลของสารแต่ละคู่ที่ตำแหน่งต่าง ๆ เป็นข้อมูลพื้นฐานที่จะใช้ในการคำนวณ แรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลจะเปลี่ยนแปลงตามระยะห่างระหว่างโมเลกุล และสามารถเขียนได้ในรูปของฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์ ซึ่งเราเรียกฟังก์ชันนี้ว่าฟังก์ชันศักย์ (potential function) ตัวอย่างของ ฟังก์ชันศักย์ที่รู้จักกันดีได้แก่ ฟังก์ชันศักย์ของ Lennard-Jones (2) ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่แสดงถึงแรงกระทำระหว่างอนุภาคสองอนุภาค

$$E(r) = ar^{-n} - br^{-6} \quad (1)$$

เมื่อ  $r$  เป็นระยะห่างระหว่างจุดศูนย์กลางของอนุภาค แรงดึงดูดระหว่างอนุภาคจะแปรตาม  $r^{-6}$  และแรงผลักจะแปรตาม  $r^{-n}$  ซึ่งโดยปกติ  $n$  จะถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับ 12 แต่ในบางครั้ง  $n$  อาจเปลี่ยนแปลงได้ขึ้นอยู่กับสมบัติของแต่ละอนุภาค  $a$  และ  $b$  เป็นตัวแปรที่สามารถปรับให้เข้ากับลักษณะของอนุภาค

ปัจจุบันข้อมูลเกี่ยวกับฟังก์ชันศักย์ยังมีน้อย และมีความจำเป็นที่จะต้องสร้างขึ้นเพื่อใช้เป็นวัตถุดิบในการคำนวณทาง MC และ MD simulation ฟังก์ชันศักย์ที่ดีจะต้องสามารถกำหนดแรงดึงดูดและแรงผลักระหว่างโมเลกุลได้อย่างถูกต้องทุก ๆ ตำแหน่ง ไม่ว่าโมเลกุลจะอยู่ใกล้เคียงหรือห่างกัน Clementi และผู้ร่วมงาน (3) เป็นนักวิทยาศาสตร์กลุ่มแรกที่ได้พัฒนาฟังก์ชันศักย์ของคู่มอเลกุลของน้ำ (water dimer) และต่อมาได้พัฒนาฟังก์ชันศักย์ของโมเลกุลทางชีวภาพและโมเลกุลของน้ำเป็นจำนวนมาก Beveridge และผู้ร่วมงาน (4) ได้พัฒนาระเบียบวิธีที่มี ประสิทธิภาพขึ้นในการสร้างฟังก์ชันศักย์ของโมเลกุลคู่ใด ๆ ก็ตาม ปัญหาของวิธีการ นี้ก็คือ จะต้องมีการคำนวณแรงดึงดูดและพลังงานของโมเลกุลคู่นั้นที่ตำแหน่งต่าง ๆ โดยที่จะต้องคำนึงถึงการจัดตัวในรูปแบบที่แตกต่างกันเป็นจำนวนมาก เนื่องจากความสามารถในการหมุนของโมเลกุลด้วย ดังนั้นที่ตำแหน่งใด ๆ ก็ตามเพียงตำแหน่งเดียว เราจะต้องคำนวณค่าพลังงานศักย์ของโมเลกุลในการจัดตัวในแบบต่าง ๆ เป็นจำนวนมาก ขั้นตอนนี้จะต้องอาศัยการคำนวณทางควอนตัมในระดับ ab-initio ซึ่งต้องใช้เวลาคำนวณเป็นเวลานาน ถึงแม้ว่าจะใช้คอมพิวเตอร์ช่วยในการคำนวณ ทำให้มีค่าใช้จ่ายค่อนข้างสูง ได้มีผู้พยายามลดการคำนวณระดับ ab-initio ลงเป็นระดับ semiempirical (5,6,7) แต่ฟังก์ชันศักย์ที่ได้ก็มีความถูกต้องลดน้อยลง

งานวิจัยชิ้นนี้ ผู้วิจัยมีความประสงค์ที่จะสร้างฟังก์ชันศักย์ของระบบ ฟอร์มามาไมด์-น้ำ (formamide-water) ขึ้นจากการคำนวณระดับ ab-initio เพื่อใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานในการคำนวณทาง MC ต่อไป ฟอร์มามาไมด์เป็นโมเลกุลที่ได้รับความสนใจทางทฤษฎีอย่างสูงเนื่องจากเป็นโมเลกุลที่ประกอบด้วยกลุ่ม  $-NH_2$  ซึ่งเป็นกลุ่มฟังก์ชันพื้นฐานของโปรตีนและสารประกอบชีวภาพอื่น ๆ การศึกษาพฤติกรรมของกลุ่ม  $-NH_2$  เมื่ออยู่ในสิ่งแวดล้อมที่ประกอบด้วยน้ำหรือไอออน  $Na^+$ ,  $K^+$  จะ ทำให้เข้าใจถึงกลไกของปฏิกิริยาทางชีวภาพต่างๆที่เกิดขึ้นในระบบของสิ่งมีชีวิต

## 2. การคำนวณ

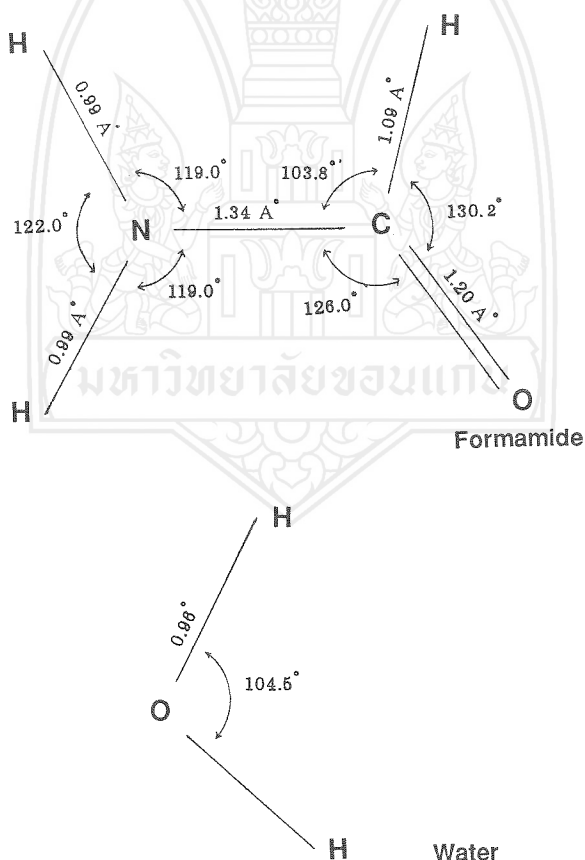
งานวิจัยนี้ผู้วิจัยได้ใช้การคำนวณทางควอนตัมในระดับ ab-initio โดยได้คำนวณแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลของฟอร์มามาไมด์และน้ำที่ 448 ตำแหน่ง โดยมีฟอร์มามาไมด์เป็นศูนย์กลาง และให้โมเลกุลของน้ำเคลื่อนที่ไปโดยรอบโมเลกุลของ ฟอร์มามาไมด์ โครงสร้างทางเรขาคณิตของฟอร์มามาไมด์ดังแสดงในรูปที่ 1 คือ

$$r_{\text{NC}} = 1.34 \text{ \AA}, r_{\text{CH}} = 1.09 \text{ \AA}, r_{\text{NH}} = 0.99 \text{ \AA}, r_{\text{CO}} = 1.20 \text{ \AA}$$

$$\hat{\text{H}}\text{N}\hat{\text{H}} = 122.0^\circ, \hat{\text{H}}\text{N}\hat{\text{C}} = 119.0^\circ, \hat{\text{H}}\text{C}\hat{\text{N}} = 103.8^\circ, \hat{\text{N}}\text{C}\hat{\text{O}} = 126.0^\circ$$

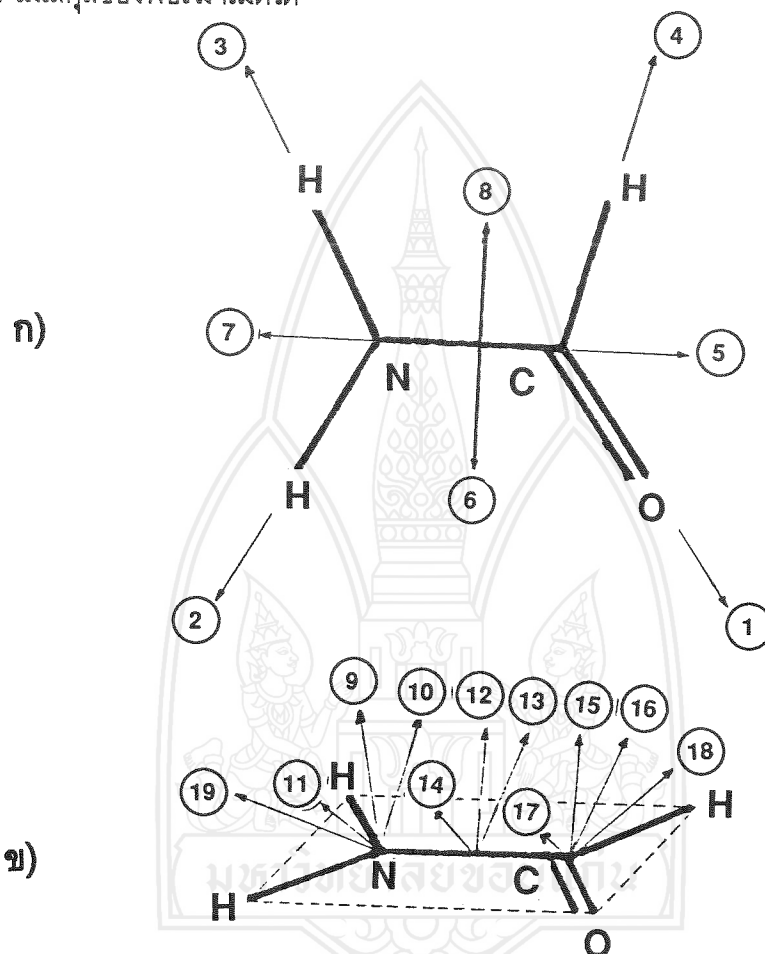
และโครงสร้างทางเรขาคณิตของน้ำคือ

$$r_{\text{OH}} = 0.96 \text{ \AA}, \text{HOH} = 104.5^\circ$$



รูปที่ 1 : แสดงโครงสร้างทางเรขาคณิตของฟอร์มามาไมด์และน้ำ

กำหนดให้ฟอร์มามาไมด์เป็นศูนย์กลาง และให้โมเลกุลของน้ำเคลื่อนที่เข้าหาโมเลกุล ของฟอร์มามาไมด์ได้ใน 19 ทิศทาง โดยมี 8 ทิศทางที่อยู่ในระนาบเดียวกับโมเลกุล (รูปที่ 2ก) และ 11 ทิศทางที่อยู่นอกระนาบของโมเลกุล (รูปที่ 2ข) ในแต่ละทิศทางได้กำหนดให้โมเลกุลของน้ำสามารถวางตัวได้ในลักษณะที่จะดึงดูดหรือผลักกับ โมเลกุลของฟอร์มามาไมด์ได้



รูปที่ 2 : ภาพแสดงทิศทางของการวางตัวของโมเลกุลของน้ำโดยรอบโมเลกุลของฟอร์มามาไมด์

- ก. ในระนาบเดียวกับโมเลกุล  
ข. นอกระนาบของโมเลกุล

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการคำนวณหาแรงกระทำระหว่างโมเลกุล ในระดับ ab-initio คือ GAUSSIAN 82 (8) โดยเลือกใช้เซตพื้นฐาน(basis set)ของฟังก์ชันคลื่น STO-3G เพื่อประหยัดเวลาในการคำนวณ โดยปกติการคำนวณโดยใช้เซตพื้นฐานของฟังก์ชันคลื่น STO-3G จะให้ค่าความยาวพันธะเคมีที่ ถูกต้อง แต่จะมีความคลาดเคลื่อนทางด้านค่าที่แท้จริงของพลังงาน การวิเคราะห์ของ Pople

(9) พบว่าค่าความคลาดเคลื่อนของพันธะเคมีสำหรับโมเลกุลที่มี H,C,N,O เป็นองค์ประกอบจะผิดไปเพียง 0.030 Å เท่านั้นเมื่อใช้เซตพื้นฐาน STO-3G ในด้านความคลาดเคลื่อนของพลังงาน Jorgenson (10) พบว่าค่าที่แท้จริงของพลังงานไม่มีผลต่อคุณภาพของฟังก์ชันศักย์ เนื่องจากสิ่งที่จำเป็นในการสร้างฟังก์ชันศักย์คือตำแหน่งที่เกิดแรงดึงดูดสูงสุดของโมเลกุลแต่ละคู่เท่านั้น อย่างไรก็ตามผู้วิจัยได้ทำการเปรียบเทียบคุณภาพของการคำนวณที่ใช้เซตพื้นฐาน STO-3G กับเซตพื้นฐานอื่นที่มีตัวแปรมากกว่าเช่น 3-21G, 4-31G, และ 6-31G โดยการคำนวณหาพลังงานของคู่ของโมเลกุลฟอร์มาไมด์และน้ำในทิศทางหนึ่งที่ระยะห่างต่างๆกัน และทำการสร้างกราฟแสดงพลังงาน (energy profile) โดยใช้เซตพื้นฐานที่ต่างกัน พบว่า ไม่ว่าจะใช้เซตพื้นฐานใด ๆ ก็ตาม กราฟของพลังงานศักย์จะมีรูปร่างคล้ายคลึงกัน และให้ตำแหน่งของแรงดึงดูดสูงสุดที่ตำแหน่งเดียวกัน แต่พลังงานที่คำนวณได้โดยใช้เซตพื้นฐาน STO-3G จะต่ำกว่า นอกจากนั้นยังได้เปรียบเทียบผลการคำนวณค่าโมเมนต์ขั้วซึ่งแสดงถึงการกระจายของอิเล็กตรอนโดยรอบโมเลกุล พบว่าค่าโมเมนต์ขั้วที่คำนวณได้โดยใช้เซตพื้นฐาน STO-3G จะมีค่า 2.91 D และ 1.72 D สำหรับ ฟอร์มาไมด์และน้ำตามลำดับ ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากการทดลอง 3.71 D สำหรับฟอร์มาไมด์ (11) และ 1.85 D สำหรับน้ำ (12) จะเห็นได้ว่าค่าโมเมนต์ ขั้วที่คำนวณได้จากการใช้เซตพื้นฐาน STO-3G จะมีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลองมากกว่าค่าที่คำนวณได้โดยใช้เซตพื้นฐานอื่น รายละเอียดของการเปรียบเทียบมีแสดงใน ตารางที่ 1

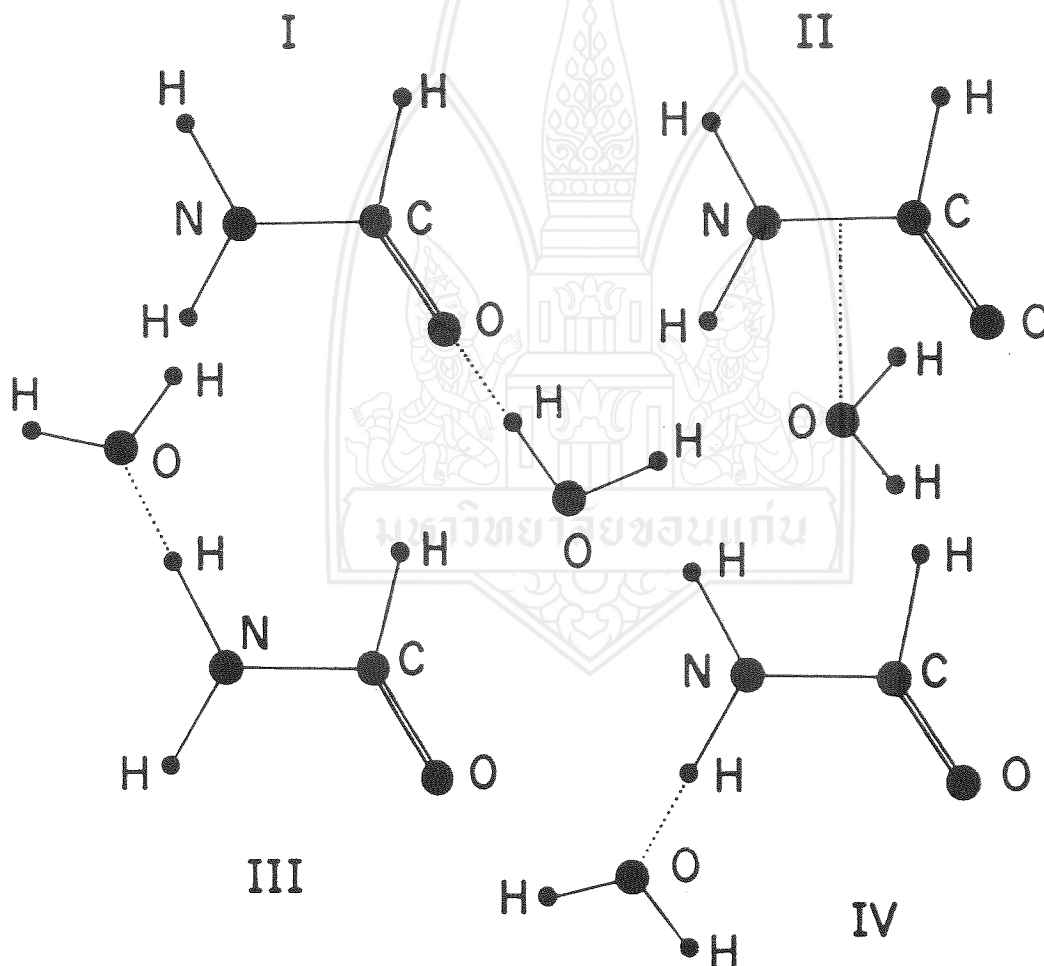
**ตารางที่ 1:** เปรียบเทียบผลการคำนวณค่าโมเมนต์ขั้วของฟอร์มาไมด์และน้ำ ตำแหน่งที่แรงดึงดูดมีค่าสูงสุด (optimal distance) และขนาด ของแรงดึงดูด (interaction energy) ระหว่างโมเลกุลของฟอร์มาไมด์และน้ำในทิศทางหนึ่งโดยใช้เซตพื้นฐาน STO-3G, 3-21G, 4-31G, และ 6-31G

| Basis set     | Dipole moment (D) |           | Energy<br>(k cal mol <sup>-1</sup> ) | Optimal<br>distance (Å) |
|---------------|-------------------|-----------|--------------------------------------|-------------------------|
|               | Water             | Formamide |                                      |                         |
| STO-3G        | 1.72              | 2.91      | 3.79                                 | 2.0                     |
| 3-21G         | 2.43              | 4.28      | 8.53                                 | 2.0                     |
| 4-31G         | 2.60              | 4.64      | 7.56                                 | 2.                      |
| 6-31G         | 2.63              | 4.68      | 5.49                                 | 2.0                     |
| Expt. results | 1.85 (12)         | 3.71 (11) | —                                    | —                       |

### 3. ผลการคำนวณและการแปลความหมาย

#### 3.1 ตำแหน่งของการจับคู่ของโมเลกุล

จากการคำนวณแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลของฟอร์มมาไมด์และน้ำที่ 448 ตำแหน่ง โดยมีฟอร์มมาไมด์เป็นจุดศูนย์กลางและมีการจัดตัวของโมเลกุลของน้ำโดยรอบโมเลกุลฟอร์มมาไมด์พบว่า แรงดึงดูดระหว่างฟอร์มมาไมด์และน้ำภายนอกกระนาบของโมเลกุลฟอร์มมาไมด์จะต่ำกว่าแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลในระนาบของ โมเลกุล เมื่อพิจารณาขนาดของแรงดึงดูดพบว่า มี 4 ตำแหน่งที่แรงดึงดูดมีค่าสูง ดังแสดงในรูปที่ 3 เมื่อพิจารณาโครงสร้างในรูปที่ 3 จะเห็นได้ว่า แรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลเป็นแรงดึงดูดชนิดพันธะไฮโดรเจน พันธะไฮโดรเจนที่เกิดขึ้นคือ พันธะไฮโดรเจนระหว่าง O ของกลุ่มคาร์บอนิล (-CHO) ของฟอร์มมาไมด์และ H ของน้ำดังโครงสร้าง I และ II ของรูปที่ 3 และพันธะไฮโดรเจนระหว่าง H ของกลุ่มเอไมด์ (-NH<sub>2</sub>) ของฟอร์มมาไมด์และ O ของน้ำ ดังโครงสร้าง III และ IV ของรูปที่ 3



รูปที่ 3 : รูปแสดงตำแหน่งที่สามารถเกิดแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลฟอร์มมาไมด์และโมเลกุลน้ำได้

เมื่อเปรียบเทียบขนาดของแรงดึงดูดจะพบว่าโครงสร้าง III และ IV จะมีขนาดของแรงดึงดูดใกล้เคียงกัน และมีค่าเท่ากับ 5.68 และ 5.22 k cal mol<sup>-1</sup> (ตารางที่ 2) ในทางตรงกันข้าม ขนาดของแรงดึงดูดในโครงสร้าง I และ II จะมีค่าแตกต่างกัน โดยมีค่าเท่ากับ 3.80 และ 6.03 k cal mol<sup>-1</sup> ตามลำดับ โครงสร้าง II จะมีแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลสูงกว่าโครงสร้าง I ผลการคำนวณนี้สอดคล้องกับผลการคำนวณในระดับ semi-empirical ของ Jorgensen (7) ข้อมูลเปรียบเทียบมีแสดงในตารางที่ 2

ตารางที่ 2: ตารางเปรียบเทียบแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลฟอร์มามาไมด์และน้ำ

| โครงสร้าง<br>ตามรูปที่ 3 | ขนาดของแรงดึงดูด ( K cal mol <sup>-1</sup> ) |               |      |
|--------------------------|----------------------------------------------|---------------|------|
|                          | งานวิจัยนี้                                  | Jorgensen (7) |      |
|                          | STO-3G                                       | 3-21G         | OPLS |
| I                        | 3.80                                         | 10.50         | 6.50 |
| II                       | 6.03                                         | 12.90         | 8.60 |
| III                      | 5.68                                         | 10.19         | 6.79 |
| IV                       | 5.22                                         | 11.39         | 6.71 |

เมื่อพิจารณาแรงดึงดูดที่สูงที่สุด จะเห็นว่าได้แก่โครงสร้าง II โดยพันธะไฮโดรเจนเกิดจากแรงดึงดูดระหว่าง O ของกลุ่มคาร์บอนิลและ H ของ น้ำ เราจึงสามารถสรุปได้ว่า โมเลกุลของน้ำสามารถดึงดูดกับกลุ่มคาร์บอนิลได้ดีกว่ากลุ่มเอไมด์ข้อสรุปนี้สอดคล้องกับผลการวิจัยของ Johansson et.al.(13) และ Spencer et.al.(14)

### 3.2 การสร้างฟังก์ชันศักย์

ในการสร้างฟังก์ชันศักย์เพียงหนึ่งฟังก์ชันเพื่อใช้ทดแทนแรงดึงดูดทั้งหมดของระบบ ไม่ว่าโมเลกุลทั้งสองในระบบจะอยู่ห่างกันเท่าไรและมีการจัดตัวทางเรขาคณิตแบบใดก็ตาม จะสามารถทำได้

โดยการใช้กระบวนการที่เรียกว่า multidimensional non-linear least square procedure<sup>(15)</sup> ฟังก์ชันที่ได้เลือกใช้เป็นฟังก์ชันคัลยคือ

$$E(F,W) = \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^3 \left( \frac{A_{ij}}{r_{ij}^4} + \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{C_{ij}}{r_{ij}^{10}} \right) \quad (2)$$

เมื่อ  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , และ  $C_{ij}$  เป็นตัวแปรที่สามารถปรับให้สอดคล้องกับผลการคำนวณ มีชื่อเรียกว่า fitting constant  $r_{ij}$  คือระยะห่างระหว่างอะตอม  $i$  ของฟอร์มามาไต์ และอะตอม  $j$  ของน้ำ

กระบวนการ multidimensional non-linear least square procedure จะเริ่มต้นจากการกำหนดค่าตัวแปร  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , และ  $C_{ij}$  และโปรแกรมจะทำการคำนวณหาค่าแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลฟอร์มามาไต์และโมเลกุลน้ำ ( $E_{FIT}$ ) ที่ตำแหน่งต่างๆ และทำการเปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากการคำนวณโดยกระบวนการ ab-initio molecular orbital calculation ( $E_{MO}$ ) ที่ได้คำนวณมาแล้วทั้ง 448 ตำแหน่ง ความสอดคล้องกันของ  $E_{FIT}$  และ  $E_{MO}$  จะพิจารณาได้จากค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (standard deviation) หากค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานมีค่าสูง โปรแกรมจะปรับค่า  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , และ  $C_{ij}$  และ เริ่มต้นทำการคำนวณใหม่ โปรแกรมจะหยุดเมื่อค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานมีค่าต่ำสุด

ในการสร้างฟังก์ชันคัลยของระบบฟอร์มามาไต์-น้ำโดยใช้ฟังก์ชัน (2) พบว่า  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , และ  $C_{ij}$  สำหรับอะตอม  $i$  ของฟอร์มามาไต์ และอะตอม  $j$  ของ น้ำมีค่าดังแสดงในตารางที่ 3 และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานมีค่าเท่ากับ  $1.00 \text{ k cal mol}^{-1}$

ตารางที่ 3: ตารางแสดงค่าตัวแปร  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , และ  $C_{ij}$  สำหรับฟังก์ชันคัลย

$$E(F,W) = \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^3 \left( \frac{A_{ij}}{r_{ij}^4} + \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{C_{ij}}{r_{ij}^{10}} \right)$$

เมื่อ  $i$  คือสัญลักษณ์แสดงอะตอมของฟอร์มามาไต์

และ  $j$  คือสัญลักษณ์แสดงอะตอมของน้ำ

$q_i$  และ  $q_j$  คือประจุของอะตอม  $i$  และอะตอม  $j$  ในหน่วยอะตอม

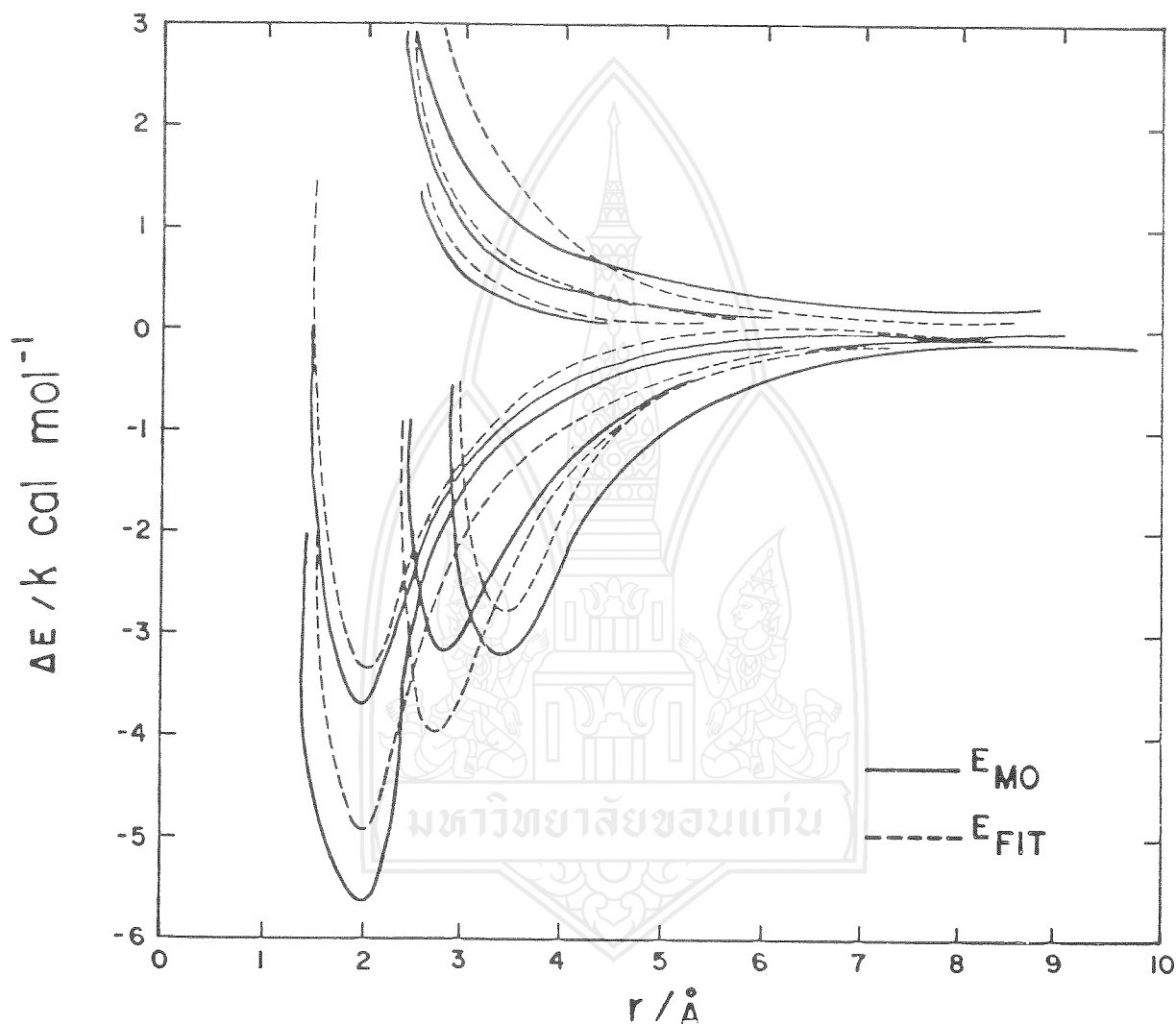
หาได้จาก Mulliken population analysis ของโมเลกุลอิสระ

| Formamide |       | Water |       | Parameters   |              |              |
|-----------|-------|-------|-------|--------------|--------------|--------------|
| I         | $q_i$ | j     | $q_j$ | $A_{ij}$     | $B_{ij}$     | $C_{ij}$     |
| N         | -0.45 | O     | -0.36 | -0.98720E+03 | -0.52559E+04 | -0.88901E+05 |
| C         | 0.25  |       |       | -0.24497E+04 | 0.14253E+05  | -0.10230E+06 |
| Hc        | 0.05  |       |       | 0.11654E+03  | -0.23309E+03 | 0.53179E+03  |
| Hn        | 0.21  |       |       | -0.12520E+03 | 0.20873E+03  | -0.11720E+03 |
| O         | -0.27 |       |       | 0.70436E+03  | -0.33847E+04 | 0.40672E+05  |
| N         | -0.45 | H     | 0.18  | -0.62989E+03 | 0.23560E+04  | -0.38937E+0  |
| C         | 0.25  |       |       | 0.15165E+04  | -0.75762E+04 | 0.42727E+05  |
| Hc        | 0.05  |       |       | -0.24053E+03 | 0.95113E+03  | -0.21127E+04 |
| Hn        | 0.21  |       |       | 0.80674E+02  | -0.10677E+03 | 0.33297E+02  |
| O         | -0.27 |       |       | -0.37414E+03 | 0.10754E+04  | -0.14104 04  |

เมื่อเปรียบเทียบคุณภาพของฟังก์ชันคัลยี่ที่ได้สร้างขึ้นสำหรับฟอร์มามิด และน้ำกับฟังก์ชันคัลยี่ที่ได้สร้างขึ้นสำหรับระบบอื่น จะเห็นได้ว่าค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานสำหรับระบบฟอร์มามิด-น้ำจะต่ำกว่าค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของฟังก์ชันคัลยี่ในระบบอื่นๆเช่น ระบบของน้ำ-เมทานอล(16), น้ำ-ยูเรีย(17), และน้ำ-บิว ทานอล(18) โดยจะมีค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานสำหรับระบบเหล่านี้เท่ากับ 1.56, 2.00, และ 2.57 k cal mol<sup>-1</sup>ตามลำดับ

เมื่อพิจารณา  $E_{MO}$  ที่ได้คำนวณไว้โดยกระบวนการ ab-initio molecular orbital calculation ทั้ง 448 ตำแหน่งกับ  $E_{FIT}$  ที่คำนวณได้ โดยใช้ฟังก์ชัน (2) ในการเปรียบเทียบกันทีละตำแหน่งพบว่า  $E_{FIT}$  และ  $E_{MO}$  มีค่าใกล้เคียงกันมากในทุก ๆ ตำแหน่ง ยกเว้นในบริเวณที่แรงดึงดูดมีค่าสูงสุดเท่านั้น ที่  $E_{FIT}$  และ  $E_{MO}$  มีค่าแตกต่างกันประมาณ 1-2 k cal mol<sup>-1</sup> یشنที่ตำแหน่งที่  $E_{MO}$  มีค่าเท่ากับ -3.8,-6.03,-5.68,และ-5.22 k cal

$\text{mol}^{-1} E_{\text{FIT}}$  ที่คำนวณ ได้ที่ตำแหน่งเดียวกันจะมีค่าเท่ากับ -3.42, -3.62, -4.83, และ -3.12 k cal  $\text{mol}^{-1}$  ตามลำดับ ความแตกต่างและความสอดคล้องกันนี้ จะสามารถมองเห็นได้ ชัดเจนเมื่อเขียนกราฟแสดง พลังงาน (energy profile) ดังแสดงในรูปที่ 4

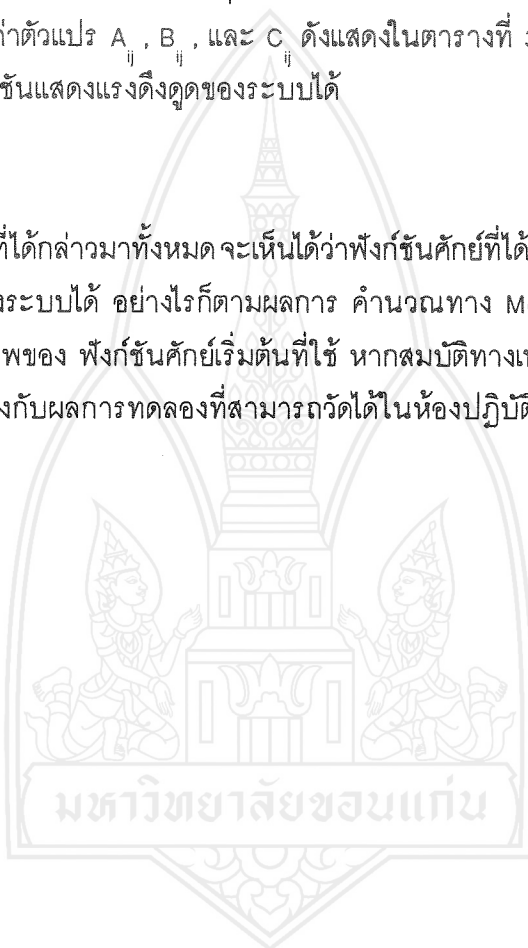


**รูปที่ 4:** เปรียบเทียบกราฟแสดงพลังงาน (energy profile) ระหว่างกราฟที่ได้จากการคำนวณในระดับ ab-initio ( $E_{\text{MO}}$ ) และกราฟที่ได้จากฟังก์ชันศักย์ ( $E_{\text{FIT}}$ ) สำหรับคู่ของโมเลกุลฟอร์มามาไมด์-น้ำในบางทิศทาง

จากรูปที่ 4 เราจะเห็นได้ว่ากราฟของ  $E_{FIT}$  และ  $E_{MO}$  แสดงตำแหน่ง ที่เกิดแรงดึงดูดสูงสุดที่บริเวณใกล้เคียงกัน ถึงแม้ว่าในกราฟบางค่าพลังงานจะแตกต่างกัน ดังที่ได้กล่าวมาแล้วในตอนต้นว่าค่าที่แท้จริงของพลังงานไม่มีอิทธิพลต่อคุณภาพของฟังก์ชันศักย์ สิ่งที่มีบทบาทที่สำคัญคือ ตำแหน่งของแรงดึงดูดสูงสุด ดังนั้นเมื่อพิจารณาถึงความสอดคล้องกันของตำแหน่งที่เกิดแรงดึงดูดสูงสุด และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของพลังงาน เราสามารถสรุปได้ว่าฟังก์ชันศักย์สำหรับระบบฟอร์มาไมด์-น้ำที่สร้างขึ้นดังสมการ (2) และมีค่าตัวแปร  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ , และ  $C_{ij}$  ดังแสดงในตารางที่ 3 เป็นฟังก์ชันศักย์ที่มีคุณภาพดีและสามารถใช้เป็นฟังก์ชันแสดงแรงดึงดูดของระบบได้

#### 4. สรุป

จากข้ออภิปรายที่ได้กล่าวมาทั้งหมดจะเห็นได้ว่าฟังก์ชันศักย์ที่ได้สร้างขึ้นมานี้มีคุณภาพดี และน่าจะใช้แทนแรงดึงดูดของระบบได้ อย่างไรก็ตามผลการ คำนวณทาง Monte Carlo simulation จะเป็นตัวบ่งชี้ได้อย่างดีถึงคุณภาพของ ฟังก์ชันศักย์เริ่มต้นที่ใช้ หากสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์ที่คาดคะเนจากการคำนวณ สอดคล้องกับผลการทดลองที่สามารถวัดได้ในห้องปฏิบัติการ เราจึงจะสรุปได้ว่าฟังก์ชันศักย์นี้มีคุณภาพดีจริง



## การศึกษาสมบัติทางเคมีของสีผสมอาหาร และการวิเคราะห์สีในอาหารบางชนิด

รัตนา มหาชัย \*

วิรัช ว่องพัฒนากุล \*

### บทคัดย่อ

ได้ศึกษาสมบัติของสีผสมอาหารสังเคราะห์ 8 ชนิดและสีย้อมต่าง ๆ เปรียบเทียบกัน พบว่าระยะทางการเคลื่อนที่ของสีทั้งสองกลุ่มได้ต่างกันเมื่อใช้เฟสเคลื่อนที่ 8 ชนิดจากเทคนิคเปเปอร์ และทินเลเยอร์โครมาโทกราฟี ลักษณะสเปกตรัมและตำแหน่งก็แตกต่างกันเมื่อใช้เทคนิควิสิเบลสเปกโทสโกปี และได้ทำตารางเปรียบเทียบไว้ เมื่อวิเคราะห์หาปริมาณสีในตัวอย่างอาหาร 65 ตัวอย่าง พบว่าตัวอย่างน้ำหวานทุกตัวอย่างใส่สีผสมอาหารมีปริมาณ 2.9 ถึง 1162.0 มก ต่อ 1000 ซม<sup>3</sup> ตัวอย่างผลไม้ดองและแช่อิ่มมีบางตัวอย่างที่ใส่สีอยู่ในช่วง 18.6 ถึง 232.2 มก ต่อ กก. และหาปริมาณโลหะบางตัว เช่น เหล็ก โคบอลต์ โครเมียม ทองแดง แคดเมียม และตะกั่ว พบว่าเหล็กตรวจพบบ้างมีปริมาณเพียงเล็กน้อย ส่วนโลหะ อื่น ๆ แทบตรวจไม่พบเลย

### Abstract

Paper and Thin Layer Chromatography were used to study the properties of eight types of food colouring agents and various dye colouring agents. The mobility of both colouring agents in eight mobile phase showed different retention time distance. Their electronic spectra were recorded and found to be different both in shape and position. Sixty five samples were also identified. It was found that their were food colouring agents in all syrup samples and were in the range 2.9-1162.0 mg/1000 cm<sup>3</sup>. And for preserved fruits samples, some samples were found to contain the colouring agents ranging from 18.6 to 232.2 mg/kg. In addition, some metals such as Fe, Co, Cr, Cu, Cd and Pb were determined and all metals found to be nil except Fe to be small amount.

\* ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

## บทนำ

ในปัจจุบันนี้นิยมปรุงแต่งอาหารให้มีคุณสมบัติต่าง ๆ ตามที่ต้องการ เช่น ให้มีสีสวย ๆ ก็ให้สีลงไปที่ใช้ในอาหารที่ปลอดภัยคือสีจากธรรมชาติรองลงมาคือสีผสมอาหารที่มีเลขทะเบียนอาหารและยาของกระทรวงสาธารณสุขกำกับรวม 8 ชนิด<sup>(1)</sup> ได้แก่ ทาร์ตราซีนปองซ์ 4 อาร์ ซันเซทเยลโลว์เอฟ ซีเอฟ อรีโทซีน คาร์เมอริน บริลเลียนบลูเอฟซีเอฟ ฟาสกรีนเอฟซีเอฟ และ อินดิโกคาร์มิน ส่วนสีอื่น ๆ เช่น สีย้อมผ้าใส่ในอาหารจะเกิดอันตรายจากความเป็นพิษของสีเอง และโลหะที่เจือปนเช่น Cr และ Pb เป็นต้น

## วิธีการทดลอง

### ก. ศึกษาสมบัติสีผสมอาหารและสีย้อม

สุ่มตัวอย่างสีผสมอาหารมาตรฐานจากองค์การเภสัชกรรม 8 ชนิดละลายน้ำและสีย้อมจากบริษัทต่าง ๆ 27 ชนิด แล้วทำการวิเคราะห์

1. เทคนิคเปเปอร์และทินเลเยอร์โครมาโทกราฟีโดยใช้กระดาษโครมาโทกราฟีเบอร์ 1 และแผ่นซิลิกาเจลชนิดเคลือบเสร็จ โมบายเฟลที่ใช้ 8 ชนิดตาม AOAC คือ

| ลำดับที่ | ส่วนประกอบ                                                                                                                 |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1        | ไตรโซเดียมซิเตรท, น้ำและแอมโมเนีย 2 ก. 85 ซม <sup>3</sup> : 15 ซม <sup>3</sup>                                             |
| 2        | เมทิลโพรเพน-2-อล, น้ำ, เอทานอล, แอมโมเนีย 25 ซม <sup>3</sup> : 25 ซม <sup>3</sup> : 50 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup> |
| 3        | โพรเพน-1-อล, เอทิลอะซิเตรท, น้ำ 6 ซม <sup>3</sup> : 1 ซม <sup>3</sup> : 3 ซม <sup>3</sup>                                  |
| 4        | บิวเทน-1-อล, น้ำ, กรดเกลซีลอะซิติก 20 ซม <sup>3</sup> : 12 ซม <sup>3</sup> : 10 ซม <sup>3</sup>                            |
| 5        | บิวเทน-1-อล, น้ำ, ไพรดีน, เอทานอล 4 ซม <sup>3</sup> : 4 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup>            |
| 6        | บิวเทน-1-อล, น้ำ, เอทานอล, ควิโนลีน 4 ซม <sup>3</sup> : 4 ซม <sup>3</sup> : 3 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup>          |
| 7        | เมทานอล, คลอโรฟอร์ม, น้ำ, ควิโนลีน 4 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup>           |
| 8        | เมทานอล, คลอโรฟอร์ม, ควิโนลีน 4 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup> : 2 ซม <sup>3</sup>                                    |

2. เทคนิควิธีเบลสเปกโทรสโกปี ทำโดยบันทึกสเปกตรัมในช่วง 340 ถึง 900 นาโนเมตร และสร้างกราฟมาตรฐานของสีมาตรฐานนั้น ๆ

3. เทคนิคอะตอมมิกแอบซอร์ปชันสเปกโทรสโกปี ทำโดยนำตัวอย่างสีมาย่อยด้วยกรดไนตริกเข้มข้นแล้วปรับปริมาตร แล้วนำเข้าเครื่องมือเทียบหาปริมาณโลหะต่าง ๆ กับกราฟมาตรฐาน

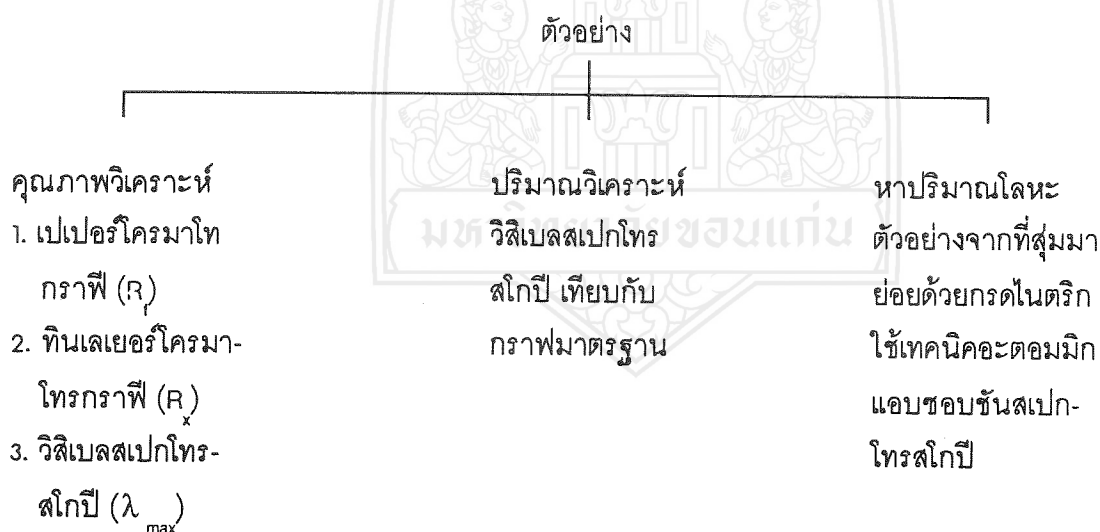
## ข. การวิเคราะห์ในตัวอย่างอาหาร

สุ่มตัวอย่างอาหารได้แก่ น้ำหวาน 35 ตัวอย่างและผลไม้ดองและแช่อิ่ม 30 ตัวอย่างแล้วทำการเตรียมตัวอย่างอาหารก่อน

ตัวอย่างน้ำหวาน (ห้วนน้ำหวาน 1 ซม<sup>3</sup>, น้ำหวานถุง 100 ซม<sup>3</sup>) ทำให้เป็นกรดด้วย 10% KHSO<sub>4</sub> ย้อมสีด้วยไหมพรมที่ปราศจากไขมันจนติดไหมพรมหมดแล้ว ละลายสีออกจากไหมพรมให้หมด ในสารละลายต่างระเหยเกือบแห้งแล้วปรับปริมาตร

ตัวอย่างผลไม้ดองและแช่อิ่ม (ชิ้นหนัก 10 กรัม) ละลายน้ำทำให้เป็นกรดด้วย 1% CH<sub>3</sub>COOH ย้อมสีด้วยไหมพรมที่ปราศจากไขมันจนติดไหมพรมหมดแล้วละลายสีออกจากไหมพรมในสารละลายต่างระเหยเกือบแห้งและปรับปริมาตร

การวิเคราะห์พอสรุปได้ดังแผนผังข้างล่าง



## ผลการทดลอง

ได้สุ่มตัวอย่างสีผสมอาหาร 8 ชนิดและสีย้อมต่าง ๆ 27 ชนิดแล้วทำการศึกษสมบัติบางประการของมันโดยพิจารณาค่า  $R_f$  จากเทคนิคเปเปอร์-ทินเลเยอร์โครมาโทกราฟี (PC-TLC) และดูลักษณะสเปกตรัม,  $\lambda_{\max}$  จากวิสเปกโตรสโกปี (VIS) ทำตารางเปรียบเทียบกันไว้ผลการศึกษาดังตัวอย่างในตารางที่ 1 และทำการวิเคราะห์หาปริมาณโลหะหนักบางตัวดังตารางที่ 2

ตารางที่ 1 \* แสดงค่า  $R_f$ ,  $R_x$  และลักษณะสเปกตรัม,  $\lambda_{\max}$  ของสีผสมอาหาร

| ตัวอย่าง                        | PC    |      |      |      | TLC   |      | VIS  |      |               |                          |
|---------------------------------|-------|------|------|------|-------|------|------|------|---------------|--------------------------|
|                                 | $R_f$ |      |      |      | $R_x$ |      |      |      |               |                          |
|                                 | 1     | 2    | 3    | 4    | 5     | 6    | 7    | 8    | สเปกตรัม      | $\lambda_{\max}$<br>(nm) |
| สีแดงปองซ์ 4 อาร์               | 0.57  | 0.67 | 0.45 | 0.31 | 0.50  | 0.64 | 0.70 | 0.45 | แหลมคม        | 510                      |
| สีม่วงแดงคาร์โมอีรีน            | 0.20  | 0.52 | 0.71 | 0.56 | 0.73  | 0.78 | 0.78 | 0.75 | แหลมคม        | 514                      |
| สีม่วงครามอริโทซีน              | 0.84  | 0.85 | 0.75 | 1.00 | 0.77  | 0.91 | 0.84 | 0.93 | แหลมคม        | 528                      |
| สีน้ำเงินบิลเลียนบลูเอฟซีเอฟ    | 0.94  | 0.97 | 0.74 | 0.77 | 0.83  | 0.68 | 0.77 | 0.70 | แหลมคม        | 632                      |
| สีเขียวฟาสกรีนเอฟซีเอฟ          | 0.97  | 0.92 | 0.73 | 0.60 | 0.70  | 0.64 | 0.75 | 0.71 | แหลมคม        | 626                      |
| สีน้ำเงินแอมเขียวอินดิโกคาร์มิน | 0.22  | 0.55 | 0.37 | 0.13 | 0.45  | 0.63 | 0.73 | -    | กว้างเล็กน้อย | 630                      |
| สีเหลืองซันเซทเยลโลว์เอฟซีเอฟ   | 0.46  | 0.55 | 0.63 | 0.47 | 0.67  | 0.69 | 0.79 | 0.66 | แหลมคม        | 425                      |
| สีเขียวแอมเหลืองทาร์ทราซีน      | 0.75  | 0.55 | 0.32 | 0.27 | 0.43  | 0.48 | 0.67 | 0.33 | แหลมคม        | 420                      |

หมายเหตุ โมบายเฟส 1-6 ทำ PC และ 7-8 ทำ TLC ค่า - หมายถึงไม่มีการเคลื่อนที่

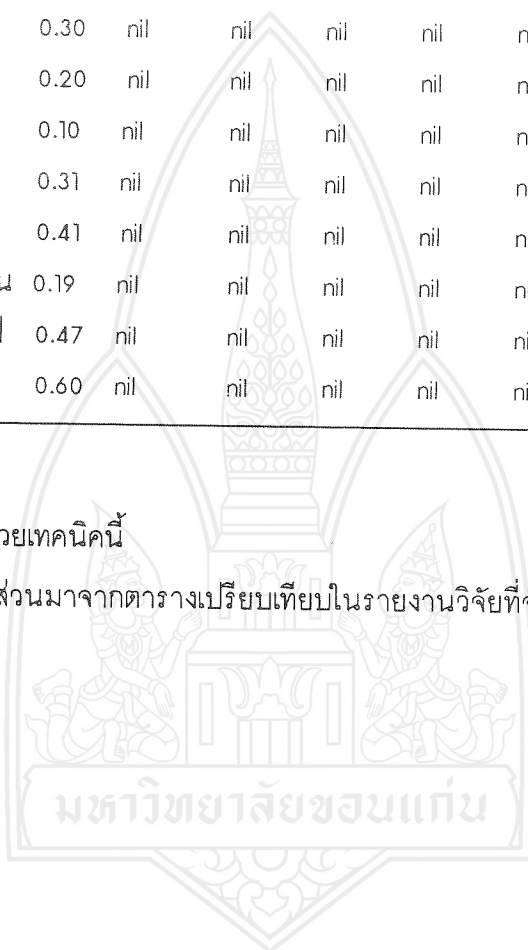
\* ที่มา ข้อมูลคัดบางส่วนมาจากตารางเปรียบเทียบในรายงานผลการวิจัยที่จัดทำส่ง

ตารางที่ 2 \* แสดงปริมาณโลหะบางตัว (ก/กก)

| ตัวอย่าง                        | เหล็ก | โคบอลต์ | ทองแดง | สังกะสี | โครเมียม | แคดเมียม | ตะกั่ว | แมงกานีส |
|---------------------------------|-------|---------|--------|---------|----------|----------|--------|----------|
| แดงปองข้าว 4 อาร์               | 0.30  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |
| สีม่วงแดงคาร์เบอร์น             | 0.20  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |
| สีม่วงครามอริโทซีน              | 0.10  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |
| สีน้ำเงินบิลเลียนบลูเอฟซีเอฟ    | 0.31  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |
| สีเขียวฟาสกรีนเอฟซีเอฟ          | 0.41  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |
| สีน้ำเงินแกมเขียวอินดิโกคาร์มิน | 0.19  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |
| สีเหลืองชันเซทเยลโลว์เอฟซีเอฟ   | 0.47  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |
| สีเขียวแกมเหลืองทาร์ทราซีน      | 0.60  | nil     | nil    | nil     | nil      | nil      | nil    | nil      |

หมายเหตุ nil หาไม่พบด้วยเทคนิคนี้

\* ที่มา ข้อมูลคัดบางส่วนมาจากตารางเปรียบเทียบในรายงานวิจัยที่จัดทำส่ง



เมื่อทำการวิเคราะห์สีในตัวอย่างอาหารทั้งหมด 65 ตัวอย่าง โดยทำคุณภาพวิเคราะห์เพื่อตรวจสอบว่ามีการใส่สีหรือไม่และควรเป็นสีประเภทใดและสีชนิดใด พิจารณาจากค่า  $R_t$  และ  $R_x$  ลักษณะสเปกตรัมและ  $\lambda_{max}$  เทียบกับสีมาตรฐาน ผลการวิเคราะห์พบว่าในตัวอย่างน้ำหวานมีการใส่สีทุกตัวอย่าง ส่วนตัวอย่างผลไม้ดองและแช่อิ่มมี 10 ตัวอย่างที่ใส่สี และเมื่อทำปริมาณวิเคราะห์ผลดังแสดงในตารางที่ 3

ตารางที่ 3 สรุปแสดงปริมาณสีและโลหะบางตัวในตัวอย่างอาหาร

| ตัวอย่าง           | ปริมาณสี (ก)    | ปริมาณโลหะ (ข) *** |          |           |          |          |        |
|--------------------|-----------------|--------------------|----------|-----------|----------|----------|--------|
|                    |                 | เหล็ก              | โคบอลต์  | ทองแดง    | โครเมียม | แคดเมียม | ตะกั่ว |
| หัวน้ำหวาน         | 2.0-116.2 *     | nil-0.50           | nil-0.40 | nil       | nil-0.20 | nil-0.20 | nil    |
| น้ำหวานดอง         | 0.29-3.95 *     | nil-0.30           | nil-0.10 | nil       | nil-0.1  | nil-0.30 | nil    |
| ผลไม้ดองและแช่อิ่ม | 18.70-232.20 ** | 0.07-0.70          | nil      | 0.33-2.33 | nil      | nil      | nil    |

- ก. ใช้เครื่องมือวิธีเบลสเปกโทรโฟโตมิเตอร์  
 ข. เครื่องมืออะตอมมิกแอบซอร์ปชันสเปกโทรโฟโตมิเตอร์  
 ค. nil หาค่าไม่ได้, \* หน่วยเป็นมก ต่อ 100ซม<sup>3</sup>, \*\* หน่วยเป็น มก ต่อ กก  
 \*\*\* หน่วยเป็น มก ต่อ ลบดม

### บทสรุปและวิจารณ์

ตัวอย่างสีที่สุ่มมาเป็นสีผสมอาหารที่เป็นสีสังเคราะห์ ที่กระทรวงสาธารณสุขอนุญาตให้ใช้ผสมอาหารได้ 8 สี ได้แก่ ปองซ์ 4 อาร์, คาร์เมอริน, อริโทนซิน, บริลเลียนบลูเอฟซีเอฟ, ฟาสกรีนเอฟซีเอฟ, อินดิโกคาร์มิน, ชันเซทเทลโลว์เอฟซีเอฟ และ ทาร์ทราซีน และตัวอย่างสีย้อม 27 ตัวอย่าง แล้วนำมา

ศึกษาสมบัติบางอย่าง ได้แก่ใช้เทคนิคเปเปอร์-ทินเลเยอร์โครมาโตกราฟีอาศัยหลักการดูดซับและการละลายโดยใช้โมบายเฟสที่มีความเข้มข้นต่าง ๆ กันทั้งหมด 8 ชนิด เรียงลำดับความเข้มข้นจากมากไปน้อยคือลำดับ 1 ถึง 8 พบว่าสีเกือบทุกตัวมีการเคลื่อนที่ได้ระยะทางมากในโมบายเฟสที่มีขั้วสูง แสดงว่าสีมีโครงสร้างเป็นสารประกอบที่ค่อนข้างมีขั้วและเมื่อพิจารณารูปร่างสเปกตรัมและหา  $\lambda_{\max}$  พบว่าสีย้อมและสีผสมอาหารให้รูปร่างแตกต่างกันและตำแหน่ง  $\lambda_{\max}$  ก็ต่างกันของสีทั้งสองกลุ่มในโทน สีเดียวกัน แต่สีผสมอาหารให้ลักษณะสเปกตรัมแหลมคมส่วนสีย้อมค่อนข้างกว้างและได้ทำการวิเคราะห์หาปริมาณโลหะหนักบางตัว ได้แก่ เหล็ก, โคบอลต์, ทองแดง, โครเมียม, แคดเมียม และตะกั่ว พบว่าทุกตัวอย่างสีมีปริมาณเหล็กน้อยกว่า 0.5 กรัม ต่อ กิโลกรัมสี ส่วนโลหะอื่น ๆ มีปริมาณน้อยมากจนถึงตรวจไม่พบ

และเมื่อวิเคราะห์สีในตัวอย่างอาหารทั้งหมด 65 ตัวอย่างแบ่งเป็นตัวอย่างน้ำหวาน 35 ตัวอย่างพบว่าเกือบทุกตัวอย่างมีการใส่สีและเป็นสีผสมอาหารทั้งหมดปริมาณสีที่ตรวจพบในหัวน้ำหวานและน้ำหวานถุงมีค่า 27.0 - 1162.0 และ 2.9 - 39.5 มิลลิกรัมต่อ 1000 ลูกบาศก์เซนติเมตรตามลำดับ จะเห็นได้ว่าปริมาณสีในหัวน้ำหวานมีค่าค่อนข้างสูงมากแต่เวลารับประทานเรามักเจือจางก่อน และสีที่ตรวจพบสีแดงเป็นสีคาร์เมอรินหรือปองซ์ 4 อาร์สีเหลืองเป็นหรือชันเซพเทิลโลว์เฟซีเคฟหรือทาร์ทราซีน นอกนั้นเป็นสีผสมของแมสตีต่าง ๆ ในตัวอย่างผลไม้ดองและแช่อิ่มพบว่ามียู 33 เปอร์เซนต์ที่ใส่สีในอาหารกลุ่มนี้และเป็นสีผสมอาหารคิดเป็น 80 เปอร์เซนต์ที่เหลือเป็นสีย้อมซึ่งจะเป็นอันตรายต่อร่างกาย ปริมาณสีมีค่า 18.6-232.2 มิลลิกรัมต่อกิโลกรัมอาหาร และได้ทำการวิเคราะห์หาปริมาณโลหะหนักบางตัวในตัวอย่างอาหารทั้งหมดเช่นเดียวกับในตัวอย่างสี พบว่า โลหะที่ตรวจพบในตัวอย่างสีที่สกัดจากผลไม้ดองและแช่อิ่มมีปริมาณธาตุเหล่านี้บ้างอาจเป็นเพราะธาตุเหล่านี้พืชใช้เป็นธาตุอาหาร

## กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณมหาวิทยาลัยขอนแก่น ที่ได้ให้ทุนอุดหนุนการวิจัยครั้งนี้ ขอขอบคุณภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่นที่อนุญาตให้ใช้สถานที่ อุปกรณ์ และเครื่องมือ

## เอกสารอ้างอิง

1. เอกสารประชุมพิษวิทยาแห่งประเทศไทย, 2530, ณ ดิกสันติไมตรี ทำเนียบรัฐบาล
2. Sidney Williams, 1984, Official Methods of Analysis of the Association of Official Analysis Chemistry 14<sup>th</sup> Edition, Arlington Virginia 22209, U.S.A.
3. Furia, T.E, 1968, Handbook of Food Additive the chemical Rublber
4. Abbott David, and Andrew R.S., 1970 An Introduction to Chromatography, 2nd, Great Britian, Hazell Watson & Vincy

# การตัดสินใจแก้ปัญหาการจัดสรร โดยใช้กำหนดการเชิงเส้น

สุณี อัมภายูธ \*

หลังจากมีการปฏิวัติด้านอุตสาหกรรมเป็นต้นมา องค์กรต่าง ๆ ได้มีการขยายขนาดและเพิ่มความซับซ้อนมากขึ้น การตัดสินใจในการดำเนินงานเป็นปัจจัยสำคัญอย่างหนึ่งในการบริหารให้องค์กร มีความเจริญก้าวหน้าและประสบผลตามเป้าหมายที่กำหนดไว้ ซึ่งเป็นหน้าที่ของผู้บริหารที่จะต้องหาวิธีการที่ดีที่สุด นอกเหนือไปจากการอาศัยความชำนาญหรือประสบการณ์เป็นเครื่องมือในการตัดสินใจ ซึ่งบางครั้งยังขาดเหตุผลที่ถูกต้องอย่างแท้จริง หลักการที่นำมาซึ่งวิธีการตัดสินใจดังกล่าว เป็นหลักการที่เกิดขึ้นโดยอาศัยปรัชญาและแนวคิดทางคณิตศาสตร์ เรียกว่า *การวิจัยการดำเนินงาน* (Operations Research) ซึ่งหลายคนยังเข้าใจผิดคิดว่าเป็นหลักการวิจัยเพื่อค้นคว้าหาข้อเท็จจริง แต่แท้จริงแล้วการวิจัยการดำเนินงานมีวัตถุประสงค์เพื่อจะหาวิธีที่ดีที่สุดในการแก้ปัญหาต่างๆ ในกิจการหรือองค์กรซึ่งผลลัพธ์ที่ได้จะแสดงออกมาในเชิงตัวเลข หลักการนี้นอกจากจะถูกนำไปประยุกต์ใช้ในการบริหารงานในวงการอุตสาหกรรม ทั้งด้านการผลิต สินค้าคงคลัง ฯลฯ แล้ว ปัจจุบันยังมีการนำไปประยุกต์ใช้ในวงการธุรกิจ การเกษตร สถาบันการเงิน รัฐวิสาหกิจ โรงพยาบาล และอื่น ๆ ที่มีปัญหาในรูปแบบที่เกี่ยวข้องกับการจัดสรร การรอกอย สินค้าคงคลัง การควบคุม การแข่งขัน หรือการทดแทน

\* อาจารย์ภาควิชาคณิตศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

## การตัดสินใจแก้ปัญหาการจัดสรร โดยใช้กำหนดการเชิงเส้น

ในการที่จะเลือกใช้เทคนิค หรือวิธีการใดของการวิจัยการดำเนินงานเพื่อแก้ปัญหานั้น ขึ้นอยู่กับว่าปัญหาอยู่ในรูปแบบใด. ดังที่ได้กล่าวมาแล้ว ในกรณีที่ปัญหาอยู่ในรูปแบบเกี่ยวกับการจัดสรร โดยที่มีทรัพยากรจำกัดอยู่จำนวนหนึ่ง ซึ่งจะต้องใช้ในการปฏิบัติกิจกรรมหลาย ๆ กิจกรรมพร้อมกัน แล้วต้องการหาวิธีการที่จะใช้ทรัพยากรที่มีอยู่นี้ให้เกิดประโยชน์สูงสุด ตัวอย่างเช่น ทางด้านการผลิต ทรัพยากรอาจหมายถึง วัตถุดิบ เครื่องจักร เวลา แรงงาน สถานที่ เงินทุน เป็นต้น ซึ่งผู้ลงทุนต้องตัดสินใจว่าควรจะผลิตสินค้าแต่ละชนิดอย่างไร จึงจะเกิดประโยชน์สูงสุดตามต้องการซึ่งอาจจะเป็นในแง่ค่าใช้จ่ายต่ำสุดหรือกำไรสูงสุดก็ได้ หรือทางด้านการเกษตรเกี่ยวกับอาหารผสมที่ใช้ในการเลี้ยงสัตว์ ทรัพยากรอาจหมายถึง อาหารชนิดต่าง ๆ ที่จะนำมาทำเป็นอาหารผสม เช่น ข้าวโพด ถั่ว น้ำมัน ฯลฯ เจ้าของฟาร์มต้องตัดสินใจว่าจะต้องใช้ส่วนผสมซึ่งเป็นอาหารชนิดต่าง ๆ อย่างไม่รู้จะได้อาหารผสมที่มีสารอาหารครบถ้วนตามต้องการโดยที่เสียค่าใช้จ่ายต่ำสุด จากตัวอย่างที่กล่าวมาแล้ว **กำหนดการเชิงเส้น (Linear Programming)** เป็นเทคนิคหนึ่งที่จะช่วยแก้ปัญหาการจัดสรรในลักษณะที่การตัดสินใจอยู่ภายใต้เงื่อนไขหรือข้อจำกัดของทรัพยากร และมีเป้าหมายเพื่อให้เกิดประโยชน์มากที่สุด โดยที่ทั้งเป้าหมายและข้อจำกัดของทรัพยากรต่าง ๆ เหล่านี้ สามารถกำหนดไว้ในรูปแบบทางคณิตศาสตร์ที่มีความสัมพันธ์เป็นแบบเชิงเส้นและแน่นอน เพื่อให้เกิดความเข้าใจในการใช้เทคนิคการกำหนดการเชิงเส้นในการแก้ปัญหาการจัดสรร ขอยกตัวอย่างปัญหาประกอบดังนี้ เกษตรกรผู้หนึ่ง มีที่ดินสำหรับใช้ในการเพาะปลูก 40 ไร่ เขาต้องการปลูกพืช 2 ชนิด ซึ่งพืชทั้ง 2 ชนิดนี้มีช่วงเวลาเก็บเกี่ยวผลผลิตพร้อมกัน เวลาที่ใช้ในการเก็บเกี่ยวผลผลิตของพืชที่ปลูกทั้ง 2 ชนิดนี้จะต้องไม่เกิน 180 ชั่วโมง และเขามีเงินทุนที่จะใช้เป็นค่าจ้างในการเก็บเกี่ยวผลผลิตเป็นเงิน 24,000 บาท พืชชนิดที่ 1 ใช้เวลาเก็บเกี่ยว 3 ชั่วโมงต่อไร่ พืชชนิดที่ 2 ใช้เวลาเก็บเกี่ยว 5 ชั่วโมงต่อไร่ ค่าจ้างในการเก็บเกี่ยวพืชชนิดที่ 1 เป็นเงิน 700 บาทต่อไร่ และพืชชนิดที่ 2 เป็นเงิน 300 บาทต่อไร่ เกษตรกรผู้นี้ควรจะตัดสินใจปลูกพืชแต่ละชนิด ๆ ละกี่ไร่ เขาจึงจะได้กำไรจากการขายผลผลิตของพืชทั้ง 2 ชนิดนี้มากที่สุด ถ้ากำไรจากการขายพืชชนิดที่ 1 และชนิดที่ 2 เป็นเงิน 600 และ 800 บาทต่อไร่ ตามลำดับ จากปัญหาที่ใช้เป็นตัวอย่างนี้ เมื่อพิจารณาแล้วจะเห็นว่าเป้าหมาย คือต้องการได้กำไรมากที่สุดจากการขายผลผลิตของพืช 2 ชนิด ภายใต้ข้อจำกัดของทรัพยากรที่มีอยู่ในที่นี้ได้แก่ เนื้อที่ในการเพาะปลูก เวลาในการเก็บเกี่ยว และเงินทุนค่าจ้างเก็บเกี่ยวผลผลิต

สมมติให้      ปลูกลูกพีชชนิดที่ 1      เป็นเนื้อที่  $x_1$  ไร่

                                 ปลูกลูกพีชชนิดที่ 2      เป็นเนื้อที่  $x_2$  ไร่

                                 และกำไรทั้งหมดจากการขายผลผลิตเป็นเงิน  $Z$  บาท

สามารถเขียนความสัมพันธ์ของกำไรทั้งหมดจากการขายผลผลิตเป็นสมการเป้าหมาย (Objective Function) คือ

$$\text{ค่าสูงสุด} \quad Z = 600x_1 + 800x_2 \quad \dots\dots\dots(1)$$

และสามารถเขียนความสัมพันธ์ของทรัพยากรที่มีจำกัดเป็นสมการข้อจำกัด (Constraints) ได้ดังนี้

$$\text{เนื้อที่เพาะปลูก} \quad x_1 + x_2 \leq 40 \quad \dots\dots\dots(2)$$

$$\text{เวลาเก็บเกี่ยว} \quad 3x_1 + 5x_2 \leq 180 \quad \dots\dots\dots(3)$$

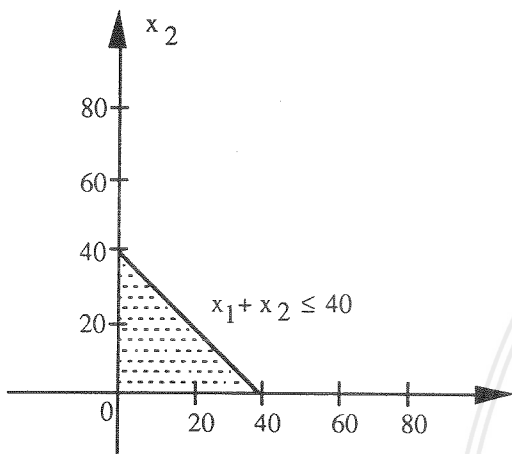
$$\text{เงินค่าจ้าง} \quad 700x_1 + 300x_2 \leq 24,000 \quad \dots\dots\dots(4)$$

$$x_1 \geq 0 \quad \dots\dots\dots(5)$$

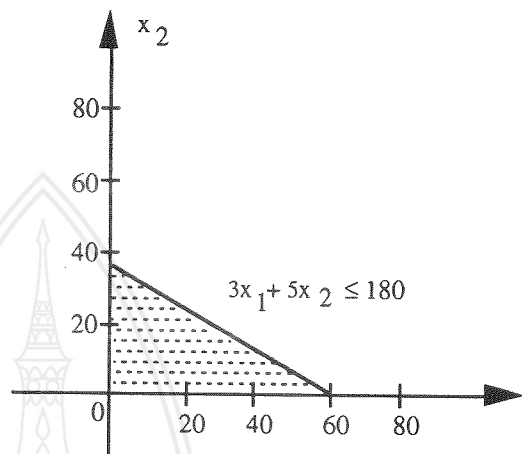
$$x_2 \geq 0 \quad \dots\dots\dots(6)$$

อสมการ (2) - (4) อยู่ในรูป  $\leq$  เนื่องจากเนื้อที่ในการเพาะปลูก เวลาในการเก็บเกี่ยวและเงินทุนค่าจ้างจะต้องไม่เกินจำนวนจำกัดตามที่กำหนดไว้ ส่วนอสมการ (5) - (6) แสดงให้เห็นว่า จำนวนเนื้อที่ที่จะใช้ปลูกพืชทั้ง 2 ชนิดเป็นจำนวนติดลบไม่ได้ นั่นคือ ค่าของ  $x_1$  และ  $x_2$  ซึ่งเรียกว่า *ตัวแปรตัดสินใจ* (Decision Variables) มีค่าเป็นลบไม่ได้

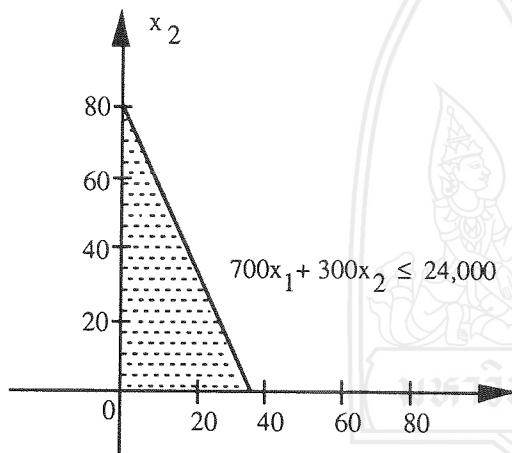
ในกรณีที่มีตัวแปรตัดสินใจเพียง 2 ตัว การหาค่าของตัวแปร สามารถทำได้โดยวิธีการง่าย ๆ คือวิธีการกราฟ (Graphing Method) เมื่อเขียนความสัมพันธ์ของเป้าหมายและข้อจำกัดของทรัพยากรต่าง ๆ ได้แล้ว นั่นคือ สมการ (1) และอสมการ (2) - (6) ซึ่งเรียกว่า *ตัวแบบทางคณิตศาสตร์* ที่ใช้จำลองปัญหาจากนั้นนำอสมการข้อจำกัดมาเขียนกราฟดังนี้



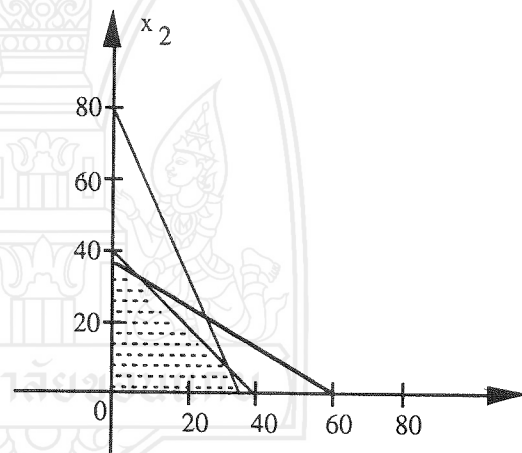
รูปที่ 1 (a) พื้นที่แรเงาแสดงขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้ตามข้อจำกัดข้อสมการ (2)



รูปที่ 1 (b) พื้นที่แรเงาแสดงขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้ตามข้อจำกัดข้อสมการ (3)



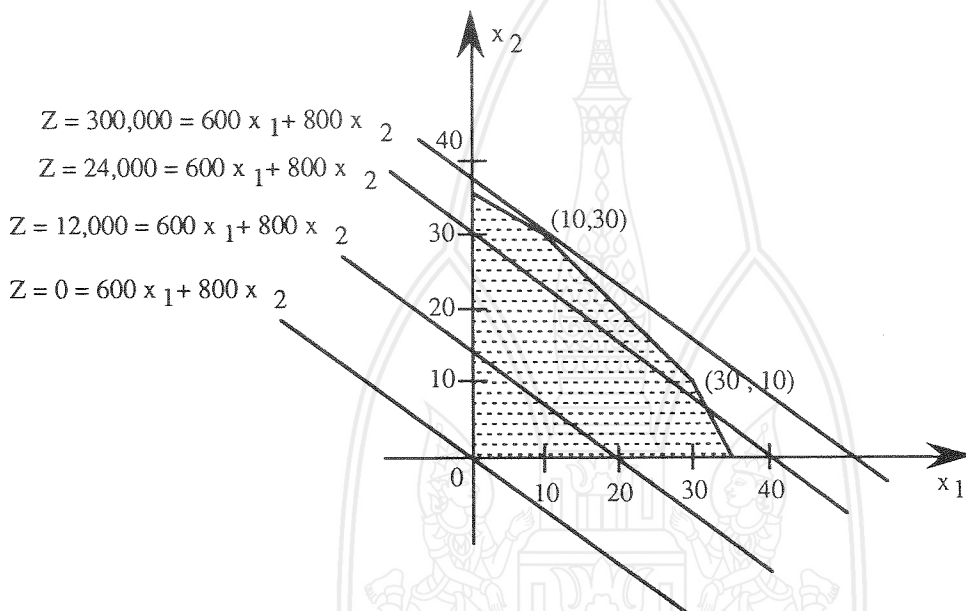
รูปที่ 1 (c) พื้นที่แรเงาแสดงขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้ตามข้อจำกัดข้อสมการ (4)



รูปที่ 1 (d) พื้นที่แรเงาแสดงขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้ตามข้อจำกัดข้อสมการ (2) - (6)

(a) - (c) พื้นที่แรเงาแสดงขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้ตามข้อจำกัดข้อสมการ (2) - (4) ตามลำดับ สำหรับรูปที่ 1(d) พื้นที่แรเงาแสดงขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้ตามข้อจำกัดทั้งหมด ตั้งแต่ข้อสมการ (2) - (6) จะเห็นได้ว่า ค่าของ  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้มีมากมายหลายค่า แต่ค่าของ  $x_1$  และ  $x_2$  ที่จะ

ทำให้ได้ค่า  $Z$  มากที่สุดจะอยู่บนเส้นขอบของพื้นที่ที่เราเท่านั้น เมื่อเขียนกราฟแสดงขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ได้แล้ว จากนั้นนำสมการเป้าหมายมาเขียนกราฟ โดยกำหนดให้  $Z$  มีค่าเท่ากับศูนย์เสียก่อน ดังนั้นกราฟของสมการ (1) จะเป็นเส้นตรงซึ่งผ่านจุดกำเนิด  $O$  ดังรูปที่ 2 จากนั้น ทดลองเพิ่มค่า  $Z$  เป็น 12,000 , 24,000 และ 30,000 ตามลำดับ



รูปที่ 2 แสดงกราฟของสมการ (1) ซึ่งผ่านจุดกำเนิด  $O$  และบริเวณขอบเขตของค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่เป็นไปได้

จะเห็นว่าเส้นตรงซึ่งใช้แทนสมการเป้าหมายจะมีลักษณะขนานกันไป จนกระทั่งเส้นตรงไปตัดกับจุด  $(x_1, x_2)$  คือจุดพิกัด  $(10, 30)$  เป็นจุดที่อยู่บนเส้นขอบของบริเวณขอบเขตของค่า  $x_1, x_2$  และเป็นจุดที่เส้นตรงของสมการเป้าหมายไปตัดในระยะที่ไกลจากจุดกำเนิด  $O$  มากที่สุด จุดนี้เป็นจุดที่ให้ค่า  $x_1$  และ  $x_2$  ที่ทำให้ค่า  $Z$  มีค่ามากที่สุด ดังนั้นเกษตรกรผู้นี้ควรจะปลูกพืชชนิดที่ 1 เป็นเนื้อที่จำนวน 10 ไร่ และชนิดที่ 2 เป็นเนื้อที่จำนวน 30 ไร่ จะทำให้เขาได้กำไรจากการขายผลผลิตของพืชทั้ง 2 ชนิดมากที่สุด เป็นเงิน 30,000 บาท ภายใต้ข้อจำกัดต่าง ๆ ดังที่กล่าวมาแล้ว

จะเห็นว่า ในการตัดสินใจแก้ปัญหาการจัดสรรซึ่งต้องการผลลัพธ์ในเชิงตัวเลข กำหนดการเชิงเส้นจะเป็นเทคนิคอย่างหนึ่งที่จะช่วยสนับสนุนการตัดสินใจได้อย่างมีเหตุผล แม้ว่าในปัญหาจริง อาจจะมีปัจจัยอื่นที่มีผลต่อการดำเนินงาน หรือมีผลให้ทรัพยากรบางอย่างไม่มีความแน่นอนเกิดขึ้นได้ เช่น ราคาวัตถุดิบเปลี่ยนแปลง หรือราคาผลผลิตทางเกษตรตกต่ำ เป็นต้น อย่างไรก็ตาม เทคนิคกำหนดการเชิงเส้นนี้ก็สามารถนำมาพิจารณาเป็นส่วนประกอบหนึ่งในการตัดสินใจร่วมกับความชำนาญหรือประสบการณ์ของผู้บริหารได้ และสำหรับปัญหาที่เกี่ยวกับการจัดสรรบางปัญหาที่มีความสัมพันธ์ไม่เป็นแบบเชิงเส้น ก็ยังมีเทคนิคอื่นๆ ของการวิจัยการดำเนินงาน เช่น กำหนดการที่ไม่เป็นเชิงเส้น (Nonlinear Programming) ที่จะนำมาใช้ในการช่วยแก้ปัญหาได้

### เอกสารอ้างอิง

1. Williams, Gareth., Mathematics with Applications in the Management, Natural and Social Sciences. Massachusetts : Allyn and Bacon, Inc., (1981).
2. Hillier Frederick S. and Lieberman Gerald J., Introduction to Operations Research. San Francisco : Holden-Day, Inc., 3 rd edition (1980).
3. นราศรี ไววนิชกุล, การวิจัยขั้นดำเนินงาน 1, สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย (2527).

มหาวิทยาลัยขอนแก่น

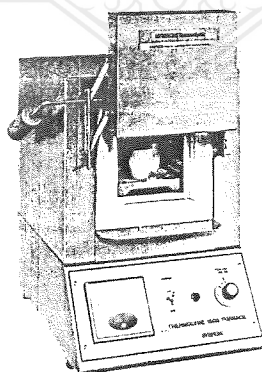
# เคมีของการเผาพลอย: เน้นพลอยสกุลคอรันดัม

## ( Chemistry in Heat Treatment of Gemstones : Emphasized on the Corundum Family )

สุวิน บุตรคำ\*

### บทนำ

พลอย เป็นคำรวม ๆ หมายถึง อัญมณี หรือรัตนชาติ ซึ่งส่วนใหญ่เป็นสารอนินทรีย์เกิดขึ้นเองตามธรรมชาติโดยกระบวนการทางอนินทรีย์เคมีในภาษาไทย คำว่า “ พลอย ” แยกเป็นต่างหากออกจากคำว่า “ เพชร ” ซึ่งมีความหมายเฉพาะอัญมณี ที่มีองค์ประกอบทางเคมีประกอบด้วยธาตุคาร์บอน ที่อยู่ในลักษณะเป็นผลึกเท่านั้น ถ้าเป็นอัญมณีที่มีองค์ประกอบเป็นอย่างอื่น หาเรียกว่า “ เพชร ” ไม่ ในบทความนี้จะกล่าวถึงเคมีของการเผาพลอยโดยเฉพาะ ไม่รวมไปถึงเพชรหรือฟลูอออิกอย่างหนึ่งว่า ในบทความนี้ กล่าวถึง “ พลอย ” ตามความหมายที่คนไทยเข้าใจกันดีอยู่แล้วนั่นเอง ส่วนการเผาพลอยนั้น คนไทยมักเรียกกระบวนการเผาพลอยว่า “ หุงพลอย ” อุปกรณ์ที่ใช้เผา มีเตาไฟฟ้าที่สามารถใช้เผาได้ถึงอุณหภูมิ 1,700 องศาเซลเซียส โดยพลอยที่จะนำมาเผา ใส่ในเบ้าอะลูมินา ( alumina crucible ) บทความนี้จะกล่าวถึง มูลเหตุของการเผาพลอย วิธีการเผาพลอย และกระบวนการเปลี่ยนแปลงทางเคมีที่เกิดขึ้นในขณะที่มีการเผาพลอย รวมถึงลักษณะของพลอยที่ผ่านกระบวนการเผามาแล้วด้วย



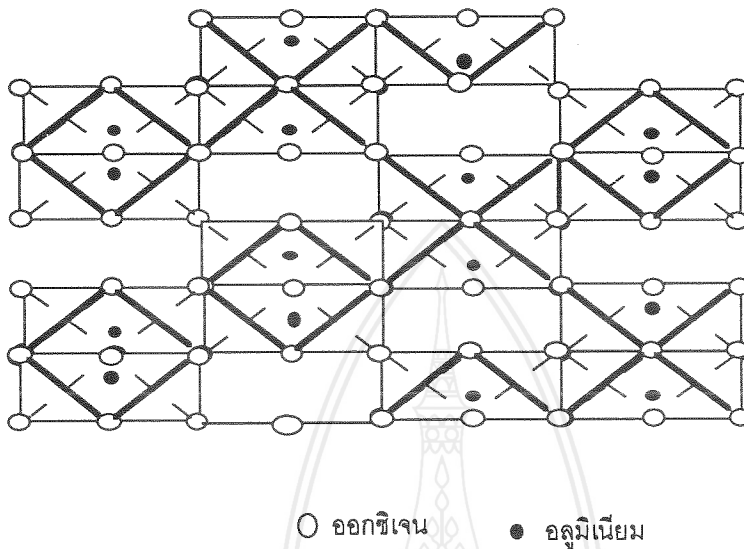
รูปที่ 1 : เตาไฟฟ้าที่ใช้ในการเผาพลอย

\* อาจารย์ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

จริงอยู่ พลอยหลายชนิด สามารถนำมาเผา เพื่อการปรับปรุงคุณภาพได้ แต่พลอยที่คนไทยนิยมนำมาเผามากที่สุด คือ พลอยสฤคอรันดัม (Corundum) ซึ่งที่มีองค์ประกอบทางเคมีเป็น อะลูมิเนียมออกไซด์ ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) พลอยสฤคนี้ มีหลายสีด้วยกัน ถ้ามีสีแดงเรียกว่า “ ทับทิม (Ruby) ” ถ้ามีสีอื่น ๆ เช่น เหลือง เขียว และน้ำเงิน เรียกรวม ๆ ว่า “ แซฟไฟร์ (sapphire) ” หรือที่คนไทยนิยมเรียกขานกันด้วยชื่อตามสีของพลอย เช่น พลอยที่มีสีอย่างที่เคยมาแล้ว เรียก บุษราคัม เขียวส่อง และไพลิน ตามลำดับ การเผาผลายในสฤคนี้ ทำกันมากในจังหวัดที่มีการขุดพลอยชนิดนี้ เช่น จันทบุรี ตราดและกาญจนบุรี ในกรุงเทพฯ มีหลายแห่งที่มีการเผาผลาย โดยมีพ่อค้าซื้อพลอยจากแหล่งต่าง ๆ นำมาเผาเพื่อการปรับปรุงคุณภาพของพลอย บทความนี้ให้ความสำคัญกับพลอยชนิดนี้มากกว่าพลอยชนิดอื่น ๆ ด้วยว่าเป็นที่สนใจกันมากในวงการค้าพลอย ในปัจจุบันข้อมูลเกี่ยวกับสมบัติของพลอยในสฤคอรันดัมได้แสดงไว้ในตารางที่ 1 ข้างล่างนี้

ตารางที่ 1 สมบัติที่สำคัญของพลอยในสฤคอรันดัม

|                                 |                                        |
|---------------------------------|----------------------------------------|
| สูตรเคมี                        | $\text{Al}_2\text{O}_3$                |
| รูปผลึก                         | ระบบไตรโกนอล ( Trigonal system )       |
| ความหนาแน่น                     | 3.95 - 4.05                            |
| ดัชนีหักเหในลำแสง c             | 1.762 - 1.764                          |
| ดัชนีหักเหในลำแสง o             | 1.770 - 1.779                          |
| ค่าไบรฟริงเจน ( Birefringence ) | 0.008 - 0.009                          |
| ค่าการกระจายแสง ( Dispersion )  | 0.018                                  |
| ความแข็ง                        | 9 ตามมาตรของโมฮ์ร ( Mohr ' s hardness) |
| จุดหลอมเหลว                     | 2050 องศาเซลเซียส                      |



รูปที่ 2 โครงสร้างของคอแรนด์ม

[ ดัดแปลงจาก Battey, M.H.(1984) *Mineralogy for Students*, Longman. p.200 ]

## มูลเหตุของการเผาพลอย

เราคาดหลักฐานว่า ใครเป็นคนแรกที่รู้จักกรรมวิธีในการเผาพลอย แต่ก็มีข้อสันนิษฐานว่า การเผาพลอยคงมีมานานแล้ว โดยแรกทีเดียว คนเราคงสังเกตเห็นว่า เมื่อเกิดเพลิงไหม้ในบ้านเรือนหรือที่เก็บสมบัติมีค่าขึ้น อัญมณีที่เผอิญอยู่ในกองไฟ บางชนิดมีสีสรรงดงามกว่าเดิม ดังนั้น ประสพการณ์เช่นนี้ จึงนำไปสู่กระบวนการเผาพลอย เพื่อปรับปรุงคุณภาพของพลอยให้ดังงามกว่าเดิม มีหลักฐานยืนยันได้ว่า พลอยหลายชนิดที่พบ ในโบราณสถานฮารัปปา (Harappa) ของอินเดีย ซึ่งก่อสร้างในราว 1,500 ปีก่อนพุทธกาล หรือในสุสานของทุทังคาเมน (Tutankhamen) เจ้าชายของอียิปต์โบราณ ราว 1,200 ปีก่อนพุทธกาลก็ตี มีพลอยที่ผ่านกระบวนการเผามาแล้ว ดังนั้น จึงอาจจะกล่าวได้ว่า กระบวนการเผาพลอย เป็นกรรมวิธีปรับปรุงคุณภาพของพลอยที่เก่าแก่ที่สุดวิธีหนึ่ง

ในเมืองไทย เรารู้จักการเผาพลอยมานานแล้ว โดยเฉพาะอย่างยิ่ง พลอยเพทาย (Zircon,  $ZrSiO_4$ ) คนไทยในจังหวัดจันทบุรี ตราด สามารถเผาปรับปรุงคุณภาพ จากสีน้ำตาลแดงคล้ายสีของน้ำปลา กลายเป็นใสไม่มีสีคล้ายเพชร หรือใสเจือด้วยมีสีฟ้า ชมพู อันงดงาม ความสามารถของคนไทยในการเผาพลอยประเภทนี้ เป็นที่ยกย่องไปทั่วโลกว่าเป็นเอกอุที่ชาติอื่นไม่สามารถทำได้

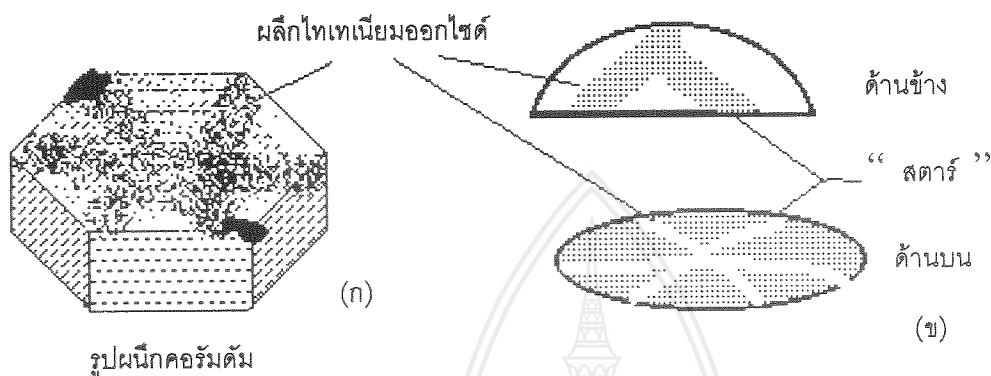
มูลเหตุที่มีการเผาผลาย สืบเนื่องมาจากผลยที่พบในธรรมชาติ มีลักษณะไม่เหมาะสม เช่น มีสีไม่งดงาม ชุ่มมัว มีรอยร้าว เป็นต้น ดังนั้น เพื่อขจัดลักษณะอันไม่พึงปรารถนาเหล่านี้ จึงนำผลยมาเผาด้วยอุณหภูมิต่าง ๆ กัน แล้วแต่ชนิดของผลย คือ ตั้งแต่อุณหภูมิ 100 องศาเซลเซียส จนถึง 1,800 องศาเซลเซียส ณ อุณหภูมิเหล่านี้ ผลยที่นำมาเผา ยังอยู่ในสถานะเป็นของแข็งเหมือนเดิม หรือไม่มีการหลอมเหลว อิทธิพลของความร้อน ทำให้ผลยชนิดใดชนิดหนึ่งเมื่อนำเผา ณ อุณหภูมิอันเหมาะสม อาจเกิดการเปลี่ยนแปลงลักษณะใดลักษณะหนึ่งหรือหลาย ๆ ลักษณะพร้อม ๆ คือ

1. เปลี่ยนโครงสร้างทางเคมีของผลย
2. เปลี่ยนรอยร้าว
3. เปลี่ยนความใสสะอาด
4. เปลี่ยนจากจากสีเข้มเป็นจางลง หรือจากสีจางให้เข้มขึ้น
5. เปลี่ยนสีจากสีหนึ่งเป็นอีกสีหนึ่ง

เหตุผลเกี่ยวกับการเปลี่ยนแปลงลักษณะดังกล่าว พอจะแสดงได้โดยสังเขป คือ

## 1. เปลี่ยนโครงสร้างทางเคมีของผลย

การเปลี่ยนโครงสร้างทางเคมีของผลย ในที่นี้ หมายถึง กระบวนการซึ่งองค์ประกอบทางเคมีของผลยเปลี่ยนแปลงไปจากเดิม เช่น ในกรณีของผลยในสฤคอรันดัม บางครั้งพบว่า มีไอออนของธาตุไทเทเนียม ( $Ti^{4+}$ ) แทรกตัวอยู่ แทนที่  $Al^{3+}$  ในโครงสร้างของ  $Al_2O_3$  ครั้นได้รับอิทธิพลของความร้อน ในช่วง 800 - 1,500 องศาเซลเซียส เป็นเวลานานพอสมควร จะทำให้ไอออนของธาตุไทเทเนียม แยกตัวออกมาจับกับอะตอมของธาตุออกซิเจนกลายเป็น  $TiO_2$  หากว่าปริมาณของไอออนของธาตุไทเทเนียมมีมากพอ จะทำให้มันรวมตัวกันเป็นผลึก ที่มองด้วยกล้องจุลทรรศน์กำลังขยายสูง ๆ จะเห็นเป็นรูปเข็ม แทรกอยู่ระหว่างเส้นแบ่งครึ่งมุมของรูปผลึกของผลยในสฤคอรันดัม ซึ่งเมื่อนำมาเจียรไนให้เป็นผลยทรงหลังเบี้ย (Cabochon cut) อาจเห็นเป็นรูปที่เรียกกันในกลุ่มคนรักผลยว่า “ สตาร์ ( Star ) ” ดังแสดงในรูปที่ 3 การเปลี่ยนแปลงโครงสร้างในลักษณะที่ทำให้เกิดสตาร์นี้ นับว่าเป็นที่พึงปรารถนา เพราะทำให้มูลค่าของผลยมีราคาสูงขึ้น



รูปที่ 3 ก) ผลึกรูปหกเหลี่ยมของแร่คอร์มดัม ซึ่งมี  $\text{TiO}_2$  แยกตัวออกมา  
เมื่อเจียรในแล้วเป็นทรงหลังเบียร์ จะเห็น “สตาร์” ดังรูป ข)

## 2. เปลี่ยนรอยร้าว

รอยร้าว ไม่ว่าจะเกิดขึ้นบนผิว หรือเนื้อในของพลอยเป็นสิ่งที่ไม่พึงปรารถนา รอยร้าวที่เกิดขึ้นภายในเนื้อพลอย อาจเกิดเนื่องจากการได้รับแรงเค้น (stress) เพราะการเปลี่ยนแปลงของมวลหินที่พลอยนั้นบรรจุอยู่ รอยร้าวภายในพลอย อาจเกิดจากความไม่ต่อเนื่องของการเจริญเติบโตของผลึกพลอย เมื่อนำพลอยมาเผาในอุณหภูมิต่ำกว่าจุดหลอมเหลว เป็นเวลานานพอสมควร อาจมีผลทำให้เกิดการลดความเครียด (Strain) ในบางจุด หรือเกิดการปรับการเจริญของผลึก ทำให้ลดรอยแตกที่ไม่พึงปรารถนาได้ กรรมวิธีจัดรอยร้าวเช่นนี้ นักแก้ววิทยาเรียกว่า “การสมานพลอย (Healing)” การเผาพลอยเพื่อวัตถุประสงค์นี้ มักใช้ได้ดีในพลอยสกุลโกเมน (Garnets) แต่พลอยในสกุลคอร์นดัม วิธีนี้อาจไม่เกิดผลดีนัก ที่เป็นเช่นนี้ เชื่อว่า เป็นเพราะพลังงานการที่ทำให้เกิดการแตกร้าวในพลอย หรือเกิดการเคลื่อนที่ระหว่าง อนุภาคที่อยู่ในระนาบต่าง ๆ ของพลอยในสกุลคอร์นดัมสูงมาก จนเกินกว่าการสมานด้วยการให้ความร้อนได้

## 3. เปลี่ยนความใสสะอาด

พลอยชนิดต่าง ๆ ที่พบในธรรมชาติ ส่วนใหญ่แล้วอาจไม่ใสสะอาดทั่วทั้งเม็ดพลอย ที่เป็นเช่นนี้ เพราะเนื้อพลอยห่อหุ้มสิ่งต่าง ๆ เข้าไว้ สิ่งเหล่านั้นในภาษาอังกฤษเรียกว่า “อินคลูชัน (Inclusion)” ส่วนพ่อค้าพลอยในบ้านเราเรียกกันว่า “หม่า” ซึ่งคำ ๆ นี้มีที่มาอย่างไร ผู้เขียน

กำลังค้นคว้าอยู่ หากใครทราบจะกรุณาบอกมาผู้เขียนจะถือเป็นพระคุณสูงยิ่ง อินคลุชันหรือหม่าที่มีอยู่ในพลอยมีอยู่หลายประเภทด้วยกัน ในทางมณีวิทยาแบ่งออกเป็น 3 ประเภท ประเภทแรกเป็นของแข็ง อันได้แก่แร่หรือองค์ประกอบทางเคมีต่าง ๆ เช่นที่พบใน พลอยสกุลคอรันดัม ในเมืองไทยมักเป็น แร่อะพาไทต์ [ Apatite ,  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{OH}, \text{Cl})_2$  ], แร่อัลแมนดิน ( almandine,  $\text{Mg}_3\text{Fe}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ ), และไพไรโรไทต์ ( Pyrrhotite,  $\text{FeS}_x$  ) เป็นต้น ประเภทที่สอง เป็นของเหลว ซึ่ง มักเป็นน้ำ (  $\text{H}_2\text{O}$  ) โดยอาจเป็นน้ำบริสุทธิ์ หรือเป็นน้ำที่ละลายเกลือบางชนิด เช่น  $\text{NaCl}$ ,  $\text{NH}_4\text{Cl}$  เป็นต้น อินคลุชันหรือหม่าที่เป็นของเหลวนี้นี้ มักพบเป็นรูปทรงต่าง ๆ เช่น อาจเป็นรูปไข่ หรืออาจจะแผ่ออกแตกเป็นแขนงคล้ายกิ่งไม้หรือขนนกก็ได้ ในกรณีหลังนี้ มักพบมากในพลอยสกุลคอรันดัมที่พบในประเทศไทย ศรีลังกา และ ออสเตรเลีย อินคลุชันหรือหม่าประเภทที่สาม เป็นก๊าซ มักเป็นก๊าซ  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$  ก๊าซเหล่านี้ อยู่ในเนื้อพลอยในลักษณะเป็น ฟองอากาศมีรูปร่างต่าง ๆ

พลอยชนิดใดมีอินคลุชันหรือหม่ามาก ย่อมทำให้ขุนมัวไม่งดงาม การเผาผลายในอุณหภูมิสูงพอสมควร อาจทำให้อินคลุชันหรือหม่าเหล่านั้นสลายตัวไป พลอยจึงดูงดงามมากขึ้น อินคลุชันหรือหม่าที่ทำให้พลอยขุนมัว ซึ่งสลายไปโดยง่าย โดยมากเป็นอินคลุชันหรือหม่าประเภทก๊าซหรือของเหลว โดยความร้อนจะช่วยทำให้มันกลายเป็นไอ ระบายออกจากเม็ดพลอย ตามรอยแตกต่าง ๆ ส่วนอินคลุชันหรือหม่าประเภทที่เป็นของแข็ง การเผาอาจไม่ช่วยให้พลอยสดใสขึ้นมากนัก

มีข้อนำสังเกตประการหนึ่งเกี่ยวกับผลของการเผาผลายที่ทำให้พลอยมีความใสมากขึ้น ในกรณีที่พลอยบางชนิด รวมไปถึงพลอยในสกุลคอรันดัมด้วย บางบริเวณในเนื้อพลอย มีสีเข้มเกินไป ทั้งนี้ เนื่องจากบริเวณนั้นมีอินคลุชันหรือหม่าที่เป็นของแข็งอยู่ในลักษณะซึ่งเมื่อมองในกล้องจุลทรรศน์ เห็นเป็นผงกระจายอยู่ภายในเนื้อพลอย เช่น มีผงฮีมาไทต์ ( Hematite,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  ) หรือ โครไมต์ ( Chromite,  $\text{FeCr}_2\text{O}_3$  ) เมื่อนำพลอยมาเผา ที่อุณหภูมิสูง ๆ ถึง 1,500 - 1,700 องศาเซลเซียส ทำให้ผงเหล่านั้นสลายตัว ไอออน  $\text{Fe}^{2+}$  หรือ  $\text{Cr}^{3+}$  ที่เคยเป็นองค์ประกอบของอินคลุชัน สามารถแพร่กระจายเข้าไปแทนที่  $\text{Al}^{3+}$  ในโครงสร้างของพลอย ทำให้พลอยที่ผ่านการเผาแล้ว มีความใสมากขึ้น

#### 4. เปลี่ยนจากสีเข้มเป็นจางลง หรือจากสีจางให้เข้มขึ้น

พลอยที่มีสีเข้มหรือจางจนเกินงาม เป็นปัญหาหนึ่งที่ทำให้พ่อค้าพลอยนิยมนำพลอยมาเผา โดยหวังว่าพลอยที่ผ่านกระบวนการเผาแล้วจะมีสีสดร่ากว่าเดิม จริงอยู่พลอยที่ผ่านกระบวนการเผาแล้ว บางชนิดมีสีจางกว่าเดิม แต่บางชนิดหาได้เปลี่ยนแปลงอย่างใดไม่ ทำไมจึงเป็นเช่นนั้น ? เป็นปัญหาที่นักมณีวิทยาจำนวนไม่น้อย กำลังชวนขวายนาคำตอบอยู่จนทุกวันนี้ ส่วนหนึ่งของคำตอบที่เป็นที่รับรองความถูกต้องแล้วในปัจจุบัน คือ การที่พลอยต่าง ๆ มีสีได้นั้น เป็นผลมาจากในโครงสร้างของพลอย การมีไอออนของธาตุทรานซิชัน ( Transition elements ) หรือ ไอออน

ของธาตุในกลุ่มชาโคเจนไนด์ (Chalcogenide) ตัวอย่างของไอออนของธาตุทรานซิชัน เช่น  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{V}^{4+}$ ,  $\text{Ti}^{4+}$  และ  $\text{Zr}^{4+}$  และตัวอย่างของไอออนของธาตุในกลุ่มชาโคเจนไนด์ เช่น  $\text{S}^{2-}$ , และ  $\text{Se}^{2-}$  เป็นต้น ธาตุที่ทำให้เกิดสีในพลอยเหล่านี้ ผู้เขียนขอเสนอให้เรียกว่า “รงคภาค (Chromophore)” พลอยบางชนิด มีรงคภาคเป็นองค์ประกอบอันจะขาดเสียมิได้ เช่น โกเมนประเภท อัลแมนดิน ( $\text{Mg}_3\text{Fe}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ ) และพลอยมาลาไคต์ ( $\text{CuCO}_3 \cdot (\text{OH})_2$ ) เป็นต้น สีของพลอยเหล่านี้ ผู้เขียนขอเสนอให้เรียกว่า “สีแท้ (Idiochromatic)” การเผาพลอยประเภทนี้ ยากที่จะทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงความเข้มของสีให้เข้มข้นหรือจางลงได้ แต่พลอยบางชนิด หากมีความบริสุทธิ์แล้ว จะปราศจากสี แต่ที่พบเห็นมีสีได้ เพราะบังเอิญมีรงคภาคแทรกอยู่ในโครงสร้างของพลอย ขอเสนอให้เรียกสีของพลอยประเภทนี้ว่า “สีจำแลง (Allochromatic)” ตัวอย่างพลอยที่มีสีจำแลง เช่น ทับทิม ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) มีสีแดงเพราะมี  $\text{Cr}^{3+}$  เป็นรงคภาค, มรกต ( $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$ ) มีสีเขียวเพราะมี  $\text{Cr}^{3+}$  เป็นรงคภาค ตามตัวอย่างที่ผู้เขียนยกมาแสดงนี้ ตั้งใจจะชี้ให้เห็นว่า รงคภาคชนิดเดียวกันสามารถให้สีแตกต่างกัน เมื่ออยู่ในโครงสร้างต่างชนิดกัน พลอยที่มีสีจำแลงเหล่านี้ เมื่อผ่านกระบวนการเผาแล้วความเข้มหรือจางของสี อาจเปลี่ยนไปในทางที่น่าพึงพอใจได้

กระบวนการที่ทำให้ความเข้มของพลอยเปลี่ยนไปด้วยการเผา อาศัยสมบัติประการสำคัญของธาตุทรานซิชัน คือ การเปลี่ยนแปลงสถานะออกซิเดชัน (Oxidation state) ได้ เมื่ออยู่ในภาวะเหมาะสม ผลที่ตามมาของการเปลี่ยนแปลงออกซิเดชัน คือ การเปลี่ยนแปลงสี หรือการเปลี่ยนแปลงความเข้มของสีพลอย

## 5. เปลี่ยนสีจากสีหนึ่งเป็นอีกสีหนึ่ง

พลอยบางชนิด มีสีสรรไม่เป็นที่พึงใจ มูลค่าจึงต่ำ ถ้านำมาเผา ณ อุณหภูมิต่าง ๆ สามารถเปลี่ยนสีของพลอยให้เป็นที่น่าพึงพอใจได้ และเป็นการเพิ่มคุณค่าให้กับพลอย การเผาพลอยเพื่อให้เปลี่ยนสีนี้ จึงเป็นกิจกรรมที่พ่อค้าพลอยจำนวนมากลงทุนดำเนินการ มีมูลค่ารายละเอียดแสนบาทอยู่ทุกวันนี้ พลอยสีต่าง ๆ ที่เมื่อเผาแล้ว ทำให้เปลี่ยนสีไปได้นำมาแสดงในตารางที่ 2 นี้

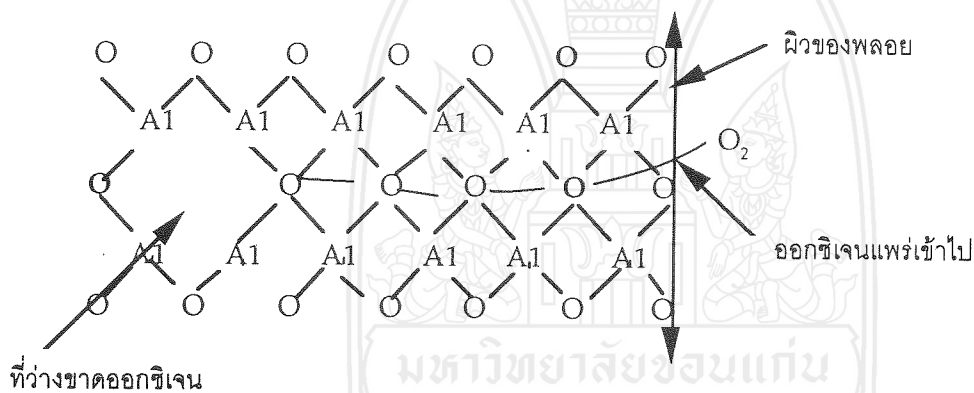
ตารางที่ 2 พลอยที่เผาแล้วเปลี่ยนสี

| พลอย               | สูตรเคมี                                         | สีก่อนเผา | สีหลังเผา | อุณหภูมิที่ใช้เผา °C |
|--------------------|--------------------------------------------------|-----------|-----------|----------------------|
| แซฟไฟร์จากศรีลังกา | $\text{Al}_2\text{O}_3$                          | น้ำเงิน   | เหลือง    | 400                  |
| แซฟไฟร์จากศรีลังกา | $\text{Al}_2\text{O}_3$                          | ม่วง      | ชมพู      | 450                  |
| เบอริล (Beryl)     | $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$ | ส้ม       | ชมพู      | 500                  |
| เบอริล             | $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$ | เขียว     | น้ำทะเล   | 420                  |
| เบอริล             | $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$ | เหลือง    | ฟ้า       | 400                  |

กลไกหรือปฏิกิริยาที่ทำให้ผลยเปลี่ยนจากสีหนึ่งกลายเป็นอีกสีหนึ่งโดยการเผา อธิบายได้เป็น 2 ลักษณะ คือ

### 1. โดยกระบวนการออกซิเดชัน-รีดักชัน ใช้การแพร่ของก๊าซออกซิเจน ( Diffusion of oxygen gas )

ในโครงสร้างของผลยสฤคอรันคัม อย่างที่กล่าวมาแล้วว่า มักมีรงคภาค เช่น  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ , หรือ  $\text{Fe}^{2+}$  แทนที่  $\text{Al}^{3+}$  ในกรณีที่  $\text{Cr}^{3+}$  แทนอยู่ จะทำให้ผลยมีสีแดง คือ ทับทิม แต่ในกรณีที่  $\text{Fe}^{2+}$  อยู่ ผลยจะไม่มีสี ยิ่งไปกว่านั้น ในโครงสร้างของผลย จะขาดแคลนอะตอมของธาตุออกซิเจน ทุก ๆ 2 อะตอมของ  $\text{Fe}^{2+}$  ที่มีอยู่ เมื่อนำผลยมาเผา ในบรรยากาศของก๊าซออกซิเจนเป็นเวลานานพอสมควร โดยเชื่อได้ว่า จะมีอะตอมของก๊าซออกซิเจนแพร่เข้าไปในเนื้อผลย และทำให้เกิดกระบวนการออกซิเดชัน ดังปฏิกิริยา



รูปที่ 4 แสดงจินตนาการการแพร่ของอะตอมของธาตุออกซิเจนเข้าไปในเนื้อผลย

ผลของการเปลี่ยนแปลงนี้ ทำให้มีการเปลี่ยนสนามผลึก ( Crystal field ) ที่ล้อมรอบ  $\text{Fe}^{3+}$  สีของผลยจึงเปลี่ยนจากไม่มีสีเป็น สีเหลือง โดยที่ความเข้มของสีจะมากน้อยเพียงไร ขึ้นอยู่กับปริมาณของ  $\text{Fe}^{3+}$  ที่มีอยู่ในเนื้อผลย กล่าวคือ ถ้ามี  $\text{Fe}^{3+}$  อยู่มาก สีเหลืองยิ่งเข้มมาก

### 2. โดยกระบวนการออกซิเดชัน - รีดักชัน

สำหรับผลยสฤคอรันคัม ซึ่งมี  $\text{Ti}^{4+}$  และ  $\text{Fe}^{2+}$  แทนที่  $\text{Al}^{3+}$  ในโครงสร้างของ  $\text{Al}_2\text{O}_3$  แล้ว กระบวนการเปลี่ยนสีอาจเกิดโดยกระบวนการออกซิเดชัน - รีดักชัน กล่าวคือ มีการถ่ายเท

อิเล็กตรอน ( electron transfer ) ระหว่าง  $Ti^{4+}$  กับ  $Fe^{2+}$  ที่อยู่ในพอลอยนั้น ดังปฏิกิริยา



ผลที่เกิดขึ้น คือ การเปลี่ยนแปลงสนามผลึกที่แวดล้อมรงคภาค ทั้ง  $Ti^{3+}$  และ  $Fe^{3+}$  ซึ่งส่งผลให้พอลอยมีสีน้ำเงิน

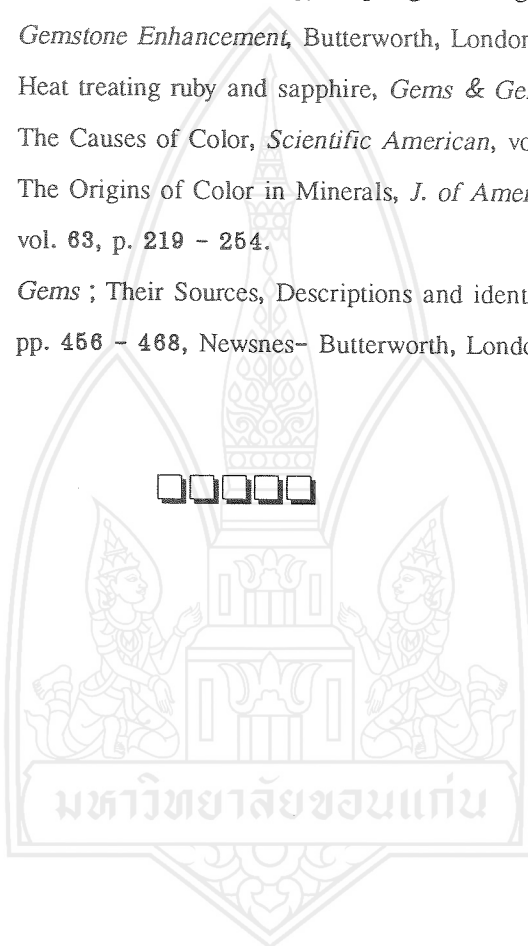
ที่กล่าวมานี้ จะเห็นว่า เน้นเฉพาะการเปลี่ยนแปลงจากพอลอยสีหนึ่งไปเป็นอีกสีหนึ่ง ซึ่งเป็นกระบวนการง่าย ๆ เท่านั้น แต่ในพอลอยธรรมชาติแต่ละเม็ด อาจจะมีไอออนที่เป็นรงคภาคหลายชนิด ที่เข้าไปอยู่ในโครงสร้างของ  $Al_2O_3$  ได้ ในเมื่อเป็นเช่นนั้น แน่นนอนเหลือเกิน ย่อมทำให้พอลอยที่ผ่านการเผาแล้วมีสีและความเข้มของสีแตกต่างกันออกไป สารเช่นนี้ยังเป็นข้อท้าทายความรู้จากห้องปฏิบัติการอีกมาก อย่างไรก็ตามกระบวนการเปลี่ยนสีของพอลอยด้วยการเผานี้ มีปัจจัยที่พอจะสรุปได้ 7 ประการด้วยกัน คือ

1. อุณหภูมิสูงที่สุดที่ใช้เผา
2. ระยะเวลาที่เผา ณ อุณหภูมิสูงนั้น
3. อัตราเร็วในการเพิ่มอุณหภูมิ
4. อัตราเร็วของการปล่อยให้พอลอยเย็นตัว
5. องค์ประกอบของก๊าซที่ล้อมรอบพอลอยในระหว่างการเผา
6. ค่าความกดดันของก๊าซที่ล้อมรอบพอลอย
7. ธรรมชาติของรงคภาคที่มีอยู่ในพอลอย

ความสำคัญของปัจจัยเหล่านี้ มีผลประการใดบ้าง เป็นเรื่องท้าทายนักวิจัยให้มาสนใจหาคำตอบให้ชัดเจนมากที่สุด เพราะในปัจจุบัน มีผู้ประกอบการอาชีพเผาพอลอยจำนวนมาก กำลังรอคอยคำตอบอยู่ ที่เขาเหล่านั้นเผาพอลอย โดยการนำพอลอยจากศรีลังกา ออสเตรเลียหรือ แม้แต่เวียดนามนำมาเผา โดยฝากความหวังไว้กับโชคลาภที่ประสบความสำเร็จร่ำรวยไปแล้วก็มาก ที่รอดวายไปก็มีไม่น้อย ที่น่าขันอย่างชวนสลดใจก็คือ มีผู้ผลิตสารเคมีหลายชนิดให้นักเลงเผาพอลอยซื้อไปใช้ผสมลงในบ้ำเผาพอลอยด้วยราคาสูงลิ่ว บางชนิดขวดเท่าปลายนิ้ว ราคาเฉียดหมื่น โดยสารเคมีเหล่านั้น ทำหน้าที่อย่างไร ไม่มีใครให้คำตอบได้ แต่ที่แน่ ๆ คือ ในปัจจุบัน การเผาพอลอยแม้จะมีท่าที่เป็นวิทยาศาสตร์ แต่แท้ที่จริงคงเป็นแค่การเล่นแร่แปรธาตุอย่างหนึ่ง ดำเนินไปบนความเสี่ยงของผู้ประกอบการนั่นเอง ในบรรทัดท้าย ๆ ของบทความนี้ ผู้เขียนขอรำพึงว่า มีความปรารถนาที่จะมีส่วนร่วมในการศึกษาการเผาพอลอยสกุลคอรั้มดัมเป็นอย่างยิ่ง ผู้อ่านท่านใดมีความรู้ หรือความสนใจในเรื่องนี้ หากจะใช้ “ วารสารวิทยาศาสตร์ ม.ข. ” เป็นศูนย์กลางก็จะเป็นที่น่ายินดียิ่ง หรือจะติดต่อกับผู้เขียนตามที่อยู่ซึ่งระบุไว้ในบทความนี้ก็จะเป็นอย่างยิ่ง

## เอกสารอ้างอิง

- Batley, M.H. (1984) : *Mineralogy for Students*, Longman. London.
- Busaracome, S.(1976) : A Study of Corundum, a B.Sc.(Hon.) Thesis, ( Close circulation )
- Correns, C.W. ( 1969 ) : *Introduction to Mineralogy*, Springer-Verlag, New York.
- Nassau, K. ( 1988 ) : *Gemstone Enhancement*, Butterworth, London.
- ( 1981 ) : Heat treating ruby and sapphire, *Gems & Gemmology*, vol. 17, p.121.
- ( 1980 ) : The Causes of Color, *Scientific American*, vol. 243, p.219 - 232.
- ( 1978 ) : The Origins of Color in Minerals, *J. of American Mineralogist*, vol. 63, p. 219 - 254.
- Webster, R. (1983) : *Gems ; Their Sources, Descriptions and identification.*, 4th Edn. pp. 456 - 468, Newsnes- Butterworth, London.



มหาวิทยาลัยขอนแก่น

**แก้คำผิด ในบทความเรื่อง**  
**การแยกให้บริสุทธิ์ และ คุณสมบัติบางประการของ**  
**Luteinizing hormone / human choriogonadotropin ของหนู (ในฉบับที่ 2)**

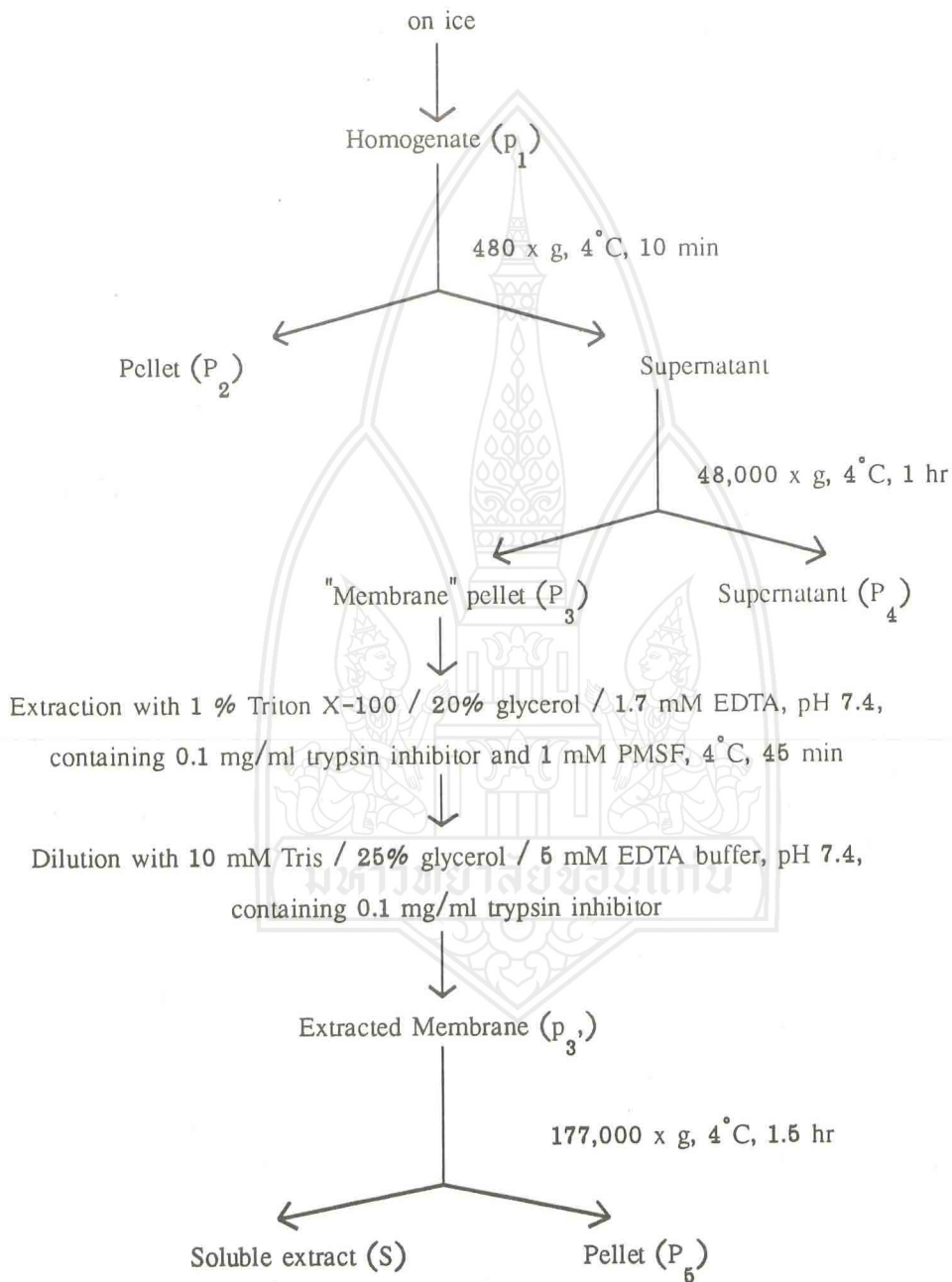
| หน้าที่ | บรรทัด | คำผิด                      | แก้เป็น                    |
|---------|--------|----------------------------|----------------------------|
| 95      | 8      | choriogoandotropin         | choriogonadotropin         |
|         | 9      | chromatohraphy             | chromatography             |
| 96      | 22     | ไม่อยู่เสียดภาพธรรมชาติ    | เสียดภาพธรรมชาติ           |
| 97      | 4      | เงื่อนไป                   | เงื่อนไข                   |
|         | 11     | Hormon                     | Hormone binding activity   |
|         | 21     | reabents                   | reagents                   |
|         | 28     | Bromopgenol                | Bromophenol                |
| 98      | 9      | Superovaluation            | Superovulation             |
| 99      | 7      | thorell                    | Thorell                    |
| 100     | 18     | LH/hCH-R                   | LH/hCG-R                   |
|         | 26     | recepto r                  | receptor                   |
| 101     | 7      | LH/hC G                    | LH/hCG                     |
|         | 16     | <sup>125</sup> I-hcg       | <sup>125</sup> I-hCG       |
|         | 25     | Radiolibend-receptor       | Radioligand-receptor       |
| 104     | 9      | Autoradiohraphy            | Autoradiography            |
| 107     | 9      | oknkir                     | linker                     |
| 109     | 4      | stimulaing                 | stimulating                |
|         | 12     | 3-cholamidipropy           | 3-cholamidopropyl          |
|         | 14     | Ethylenediaminetetraacitic | Ethylenediaminetetraacetic |
|         | 17     | Rarton                     | Raton                      |
| 111     | 18     | Charateritics              | Charateristics             |
|         | 26     | Weibe                      | Wiebe                      |
|         | 28     | Developmint                | Development                |
|         | 28     | Pennsylvanea               | Pennsylvania               |
| 112     | 1      |                            |                            |
|         | 3      | ratorarian                 | rat ovarian                |

| หน้าที่ | บรรทัด | คำผิด             | แก้เป็น            |
|---------|--------|-------------------|--------------------|
| 112     | 5      | Puripication      | Purification       |
|         | 18     | or                | of                 |
|         | 24     | choioganadotropin | chorioganadotropin |
| 113     | 6      | Enzymztic         | Enzymatic          |
|         | 16     | Biocheical        | Biochemical        |
|         | 17     | Rajenieme         | Rajaneimi          |
|         | 18     | corrora           | corpora            |
|         | 18     | o                 | of                 |
|         | 19     | liband            | ligand             |
|         | 27     | Milgeom./cloning  | Milgrom. Cloning   |
|         | 30     | Seeburh           | Seeburg            |
| 114     | 1      | prtein            | protein            |
|         | 2      | Weibi             | Wiebe              |



## Pseudopregnant ovaries

Homogenate in 10 mM Tris / 25% glycerol buffer, pH 7.4,  
containing 0.1 mg/ml soybean trypsin inhibitor and 1 mM PMSF,



แผนผังที่ 1

## ข้อแนะนำในการเขียนบทความลง วารสาร " วิทยาศาสตร์ มข. "

### ประเภทของเรื่องที่จะตีพิมพ์

1. รายงานผลวิจัยและค้นคว้า หรือการสำรวจที่ยังไม่เคยตีพิมพ์ในวารสารหรือหนังสืออื่นมาก่อน
2. บทความปริทัศน์ ได้แก่งานเขียนที่รวบรวม หรือเรียบเรียงจากเอกสารหรือหนังสือต่าง ๆ เพื่อเผยแพร่และฟื้นฟูทางด้านวิชาการระดับต่าง ๆ
3. บทความแสดงข้อคิดเห็น หรือข้อเสนอแนะที่เป็นประโยชน์ในด้านวิชาการ เรื่องแปล ข่าววิชาการ ย่อความจากงานวิจัยค้นคว้าหรือหนังสือใหม่ที่น่าสนใจ

### รูปแบบของการเขียนและการเตรียมต้นฉบับ

1. ต้นฉบับ ต้องพิมพ์ด้วยเครื่องพิมพ์ดีด หรือเครื่องคอมพิวเตอร์ มีช่องว่างระยะบรรทัดตามมาตรฐานพิมพ์ลงในกระดาษขาว A4 (โรเนียวสัน) โดยใช้กระดาษด้านเดียว ความยาวไม่เกิน 10 หน้า ส่งต้นฉบับ 2 ชุด การส่งต้นฉบับพร้อมดิสเก็ต จะได้รับค่าขอบคุณเป็นพิเศษ
2. ต้นฉบับ จะพิจารณาโดยกองบรรณาธิการ และจะตอบรับเท่านั้นโดยไม่ส่งคืน ผู้เขียนควรทำสำเนาเก็บไว้เป็นหลักฐานของตัวเอง 1 ฉบับ
3. ต้นฉบับ ต้องมีความถูกต้องทั้งในด้านเนื้อหา และการใช้ภาษา รวมทั้งมีความสมบูรณ์ในรูปแบบพร้อมที่จะนำลงตีพิมพ์ได้
4. ชื่อเรื่อง ให้ใช้ภาษาไทยหรือภาษาอังกฤษ ไม่ยาวเกินไป และหลีกเลี่ยงการใช้คำย่อโดยไม่จำเป็น
5. ชื่อผู้เขียน เขียนชื่อภาษาไทยหรือภาษาอังกฤษ พร้อมทั้งบอกสถานที่ทำงานให้ชัดเจน
6. เนื้อเรื่อง ใช้ได้ทั้งภาษาไทยล้วน หรือภาษาอังกฤษล้วน ถ้าใช้ภาษาไทย ภาษาอังกฤษที่ใช้ปนกับภาษานั้น ให้พยายามแปลเป็นไทยเท่าที่จะทำได้ และให้เขียนคำเดิมกำกับในวงเล็บ การทับศัพท์ภาษาอังกฤษตลอดทั้งการเขียนตัวสะกดการันต์ในภาษาไทยให้ใช้ตามแบบราชบัณฑิตยสถาน
7. ในกรณีของบทความวิจัย ต้องมีบทคัดย่อทั้งภาษาไทยและภาษาอังกฤษ และแบ่งเนื้อหาของบทความเป็นบทนำ วิธีดำเนินงาน ผลการวิเคราะห์ บทสรุปและวิจารณ์
8. เชิงอรรถ (footnote) ใช้เฉพาะที่จำเป็น เพื่อขยายหรือให้รายละเอียดเพิ่มเติมแก่ใจความ เฉพาะตอนในบทความ ข้อความที่จำเป็นจะต้องมีเชิงอรรถ ให้ใช้เครื่องหมายดอกจัน (\*) กำกับท้าย
9. ตารางและภาพประกอบ คำบรรยายประกอบตาราง หรือภาพประกอบควรจะสั้นและชัดเจน ถ้าจะเป็นภาพถ่าย ให้ใช้ภาพขาว-ดำ ขนาดโปสการ์ด การใช้ภาพสีต้องได้รับความเห็นชอบจากบรรณาธิการ ก่อนภาพเขียนลายเส้นควรเขียนด้วยหมึกดำ ภาพที่เขียนต้องชัดเจน และมีขนาดที่เหมาะสม
10. เอกสารอ้างอิง หรือ เขียนตามแบบสากลนิยม

### ส่งต้นฉบับมาที่

กองบรรณาธิการวารสารวิทยาศาสตร์ มข.  
คณะวิทยาศาสตร์  
มหาวิทยาลัยขอนแก่น

### อภิธานศัพท์สำหรับผู้เขียน

เรื่องที่ได้รับการตีพิมพ์ ผู้เขียนจะได้รับวารสารฉบับนั้น 2 เล่ม และสำเนาพิมพ์อีก 15 ชุด

# สารบัญ

|                                                                                                                 |           |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| ข่าววิทยาศาสตร์                                                                                                 | 147 - 148 |
| การวิเคราะห์ทางทฤษฎีเกี่ยวกับแรงดึงดูด<br>ระหว่างโมเลกุล พอร์มาไมด์-น้ำ<br>.....สุนันทา เฮงรัมย์                | 149 - 160 |
| การศึกษาสมบัติทางเคมีของสีผสมอาหาร<br>และการวิเคราะห์สีในอาหารบางชนิด<br>.....รัตนา มหาชัย , วิรัช ว่องพัฒน์กุล | 161 - 167 |
| การตัดสินใจแก้ปัญหาการจัดสรร โดยใช้กำหนดการเชิงเส้น<br>.....สุณี อัมภานุช                                       | 168 - 173 |
| เคมีของการเผาผลาญ : เน้นผลอยสกลคอรัณัม<br>.....สุวิน บุศราคำ                                                    | 174 - 183 |

