สายจิต ดาวสุโข

การใช้ประโยชน์จากเครื่อง Ultraviolet-Visible Spectrometer

Ultraviolet-Visible (UV-Vis) spectrometer เป็นเครื่องมือสำหรับศึกษาการเกิดอันตรกิริยา (Interaction) ระหว่างอนุภาคกับแสง ในย่าน UV ซึ่งมีความยาวคลื่นในช่วง 200-400 nm และ ย่าน Vis ซึ่งมีความยาวคลื่นในช่วง 400-800 nm ที่ใช้กันอย่างแพร่หลายในอุตสาหกรรมต่างๆ เนื่องจากสารเคมีแต่ละชนิดจะมีการดูดกลืนแสงสูงสุดที่ความยาวคลื่นจำเพาะ ซึ่งเป็นสมบัติเฉพาะตัวของแต่ละโครงสร้างทางเคมี ทั้งในสภาวะที่เป็นอะตอมและโมเลกุล สารที่จะดูดกลืนแสงในย่าน UV และ Vis เป็น โลหะแทรนซิชัน และ สารประกอบอินทรีย์ การวัดค่าการดูดกลืนแสงโดยเครื่อง UV-Vis spectrometer นั้นสามารถนำไปใช้หาความเข้มข้นของสารอินทรีย์และโลหะแทรนซิชันในสารละลาย

กฎของเบียร์ (Beer's Law) สรุปว่าการดูดกลืนแสงของสารละลายแปรผันตรงกับความเข้มข้นของสารละลายนั้น การวัดค่าความเข้มข้นของสารละลายด้วยวิธีนี้ จำเป็นต้องหาค่าสัมประสิทธิ์เอกซ์ทิงชัน (extinction coefficient or molar absorptivity) หรือ ทำกราฟมาตรฐานของปริมาณการดูดกลืนแสง กับความเข้มข้นของสาร (calibration curve) ผลทดสอบความเข้มข้นของสารละลายด้วยเครื่อง UV-Vis spectrometer นี้ยังสามารถนำไปใช้เป็นเครื่องตรวจวัด (detector) ในเครื่อง HPLC (High Performance Liquid Chromatography) เพื่อใช้ในการบ่งชี้และหาความเข้มข้นของสารอินทรีย์ที่มีอยู่ในสารละลายได้ด้วย

ปริมาณการดูดกลืนแสงมีความสัมพันธ์กับความเข้มข้นของสาร โดยหลักการของ Beer-Lambert Law ดังนี้:

$$-\log I/I_0 = -\log T = A = \varepsilon_\lambda bc$$

I = ความเข้มของแสงที่เหลือจากการผ่านตัวอย่าง (transmitted intensity)

I_0 = ความเข้มของแสงตกกระทบที่ใช้ในความยาวคลื่นนั้น (transmitted intensity of incident light)

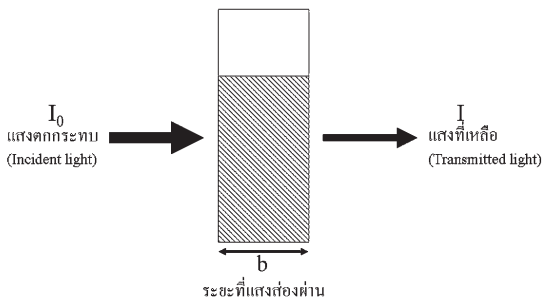
T = การส่งผ่านของแสง (transmittance)

A = ค่าการดูดกลืนของแสง (absorbance)

ε_λ = ค่าสัมประสิทธิ์เอกซ์ทิงชันของสาร ณ ความยาวคลื่นจำเพาะ (extinction coefficient or molar absorptivity)

b = ระยะที่แสงผ่านตัวอย่าง หรือ ความหนาของตัวอย่าง (path length)

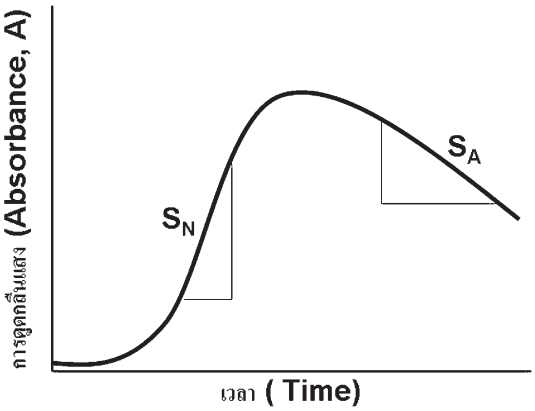
c = ความเข้มข้นของสาร (sample concentration)



ภาพที่ 1 ภาพแสดงความสัมพันธ์ของการดูดกลืนแสงกับความเข้มข้นของสารโดยหลักการของ Beer's Law

เครื่อง UV-Vis spectrometer ยังสามารถทดสอบการเปลี่ยนแปลงของการดูดกลืนแสงเมื่อเทียบกับเวลา เพื่อศึกษาระยะเวลาการเกิดผลึก การเกิดตะกอนจากปฏิกิริยาเคมี หรือศึกษาการตกตะกอนของอนุภาคในสารละลาย โดยที่ใช้หลักการวัดเช่นเดียวกับการวัดค่าความขุ่น (turbidity measurement) แต่เครื่องUV-Vis spectrometer นั้นจะสามารถตรวจจับอนุภาคในสารละลายที่มีความเจือจางมากกว่าการวัดโดยเครื่องวัดค่าความขุ่นทั่วไป

งานวิจัยที่ศึกษาการเกิดผลึกของแคลเซียมออกซาเลต ซึ่งเป็นส่วนประกอบสำคัญในนิ่ว ได้ทดสอบการดูดกลืนของแสงที่ความยาวคลื่นคงที่ ที่เปลี่ยนแปลงไปกับเวลาเพื่อคำนวณหาอัตราของการเกิดนิวเคลียส (nucleation rate) และอัตราของการเกาะตัวของผลึก (aggregation rate) โดยใช้ค่าความชันของกราฟที่วัดได้ ดังภาพที่ 2



ภาพที่ 2 ตัวอย่างกราฟการวัดค่าการดูดกลืนแสงที่เปลี่ยนแปลงไปกับเวลา เพื่อศึกษาการเกิดและการเกาะตัวของผลึก

จากภาพที่ 2 ค่าความชันด้านบวกสูงสุด (maximum positive slope, S_N) เป็นค่าประมาณของอัตราการเกิดนิวเคลียส และค่าความชันด้านลบสูงสุด (maximum negative slope, S_A) เป็นค่าประมาณของอัตราการเกาะตัวของผลึก ค่าทั้งสองนี้สามารถนำไปคำนวณหาค่าร้อยละการยับยั้งการเกิดนิวเคลียส (% inhibition of nucleation) และร้อยละการยับยั้งการเกาะตัวของผลึก (% inhibition of aggregation) โดยใช้สมการที่เสนอโดย Hess et. al. ดังนี้

$$\% \text{ inhibition of nucleation} = (1-(S_{Nm}/S_{Nc})*100$$

$$\% \text{ inhibition of aggregation} = (1-(S_{Am}/S_{Ac})*100$$

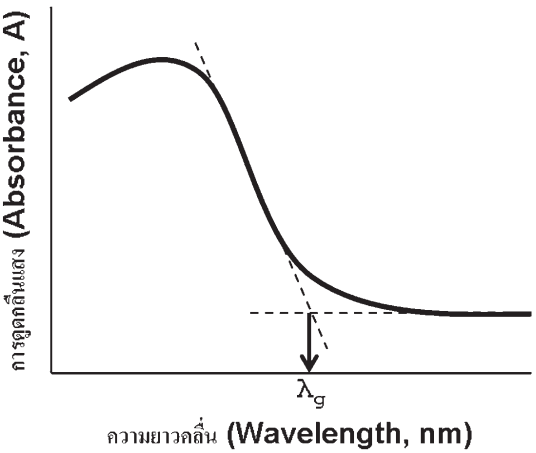
S_{Nm} = ค่าความชันด้านบวกของตัวแปรที่สนใจ (maximum slope of increase for the experiment with modulator of interest)

S_{Nc} = ค่าความชันด้านบวกของการทดลองควบคุม (maximum slope of increase for the control experiment)

S_{Am} = ค่าความชันด้านลบของตัวแปรที่สนใจ (maximum slope of decrease for the experiment with modulator of interest)

S_{Ac} = ค่าความชันด้านลบของการทดลองควบคุม (maximum slope of decrease for the control experiment)

การทดสอบหาค่าการดูดกลืนแสงของเครื่อง UV-Vis spectrometer ยังสามารถนำไปใช้ประโยชน์ในการวิเคราะห์วัสดุที่มีสมบัติโฟโตคะตะลิสต์ ที่ใช้ในการฆ่าเชื้อโรคอย่างอนุภาคไททาเนียมไดออกไซด์หรือวาเนเดียมออกไซด์ โดยเตรียมตัวอย่างในของเหลวตัวกลาง (liquid medium) ในปริมาณน้อย (< 0.05 %wt) ตัวอย่างที่มีสมบัติโฟโตคะตะลิสต์จะดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นเฉพาะ ดังตัวอย่างในภาพที่ 3



ภาพที่ 3 กราฟแสดงการเปลี่ยนแปลงของการดูดกลืนแสงของตัวอย่างที่มีสมบัติโฟโตคะตะลิสต์

จากภาพที่ 3 การดูดกลืนแสงที่วิเคราะห์ได้จากเครื่อง UV-Vis spectrometer สามารถนำมาคำนวณหาค่าช่องพลังงาน (energy gap, E_g) ของตัวอย่าง โดยหาค่าความยาวคลื่น (λ_g) จากจุดตัดของเส้นตรงที่ต่อจากกราฟช่วงค่าการดูดกลืนแสงลดลงและช่วงที่มีการดูดแสงน้อยมาก นำค่าที่ได้มาคำนวณหาค่าช่องพลังงานโดยสมการ

$$Eg \text{ (eV)} = 1240/ \lambda_g \text{ (nm)}$$

วัสดุที่มีคุณสมบัติโฟโตคะตะลิสต์ที่ดีควรมีช่องพลังงานที่เล็ก เพื่อเกิดการกระตุ้นของอิเล็กตรอนได้ง่าย การวิจัยและพัฒนาวัสดุที่มีสมบัติฆ่าเชื้อโรคนั้น วัสดุหรือสารที่นำมาใช้ควรมีค่า λ_g ที่อยู่ในช่วงแสงที่มองเห็นด้วยตาเปล่า (visible range) ซึ่งมีค่าความยาวคลื่นอยู่ในช่วง 400-700 nm เพื่อให้การฆ่าเชื้อด้วยวิธีโฟโตคะตะลิสต์มีประสิทธิภาพโดยแสงจากหลอดไฟที่ใช้ตามบ้าน

UV-Vis spectrometer นี้ยังสามารถใช้ทดลองสีและความขาวของวัสดุโดยคำนวณหาค่าสีได้ในระบบ tristimulus value และ CIELAB ตัวอย่างของวัสดุที่ใช้ในการทดลองสีและความขาวสามารถเป็นได้ทั้งของแข็งและของเหลว เช่น กระเบื้อง แก้ว และ หมึก

Tristimulus แปลงมาจากระบบ Munsell ซึ่งรายงานค่าเป็น RGB (Red, Green, and Blue) การรายงานสีในระบบ tristimulus value เดิมรายงานเป็นค่า XYZ ต่อมาจึงได้พัฒนาเป็น Yxy และ xyz เพื่อให้ง่ายต่อการสร้างกราฟสีสองมิติ โดยที่ค่า xyz คำนวณมาจากสมการดังต่อไปนี้

$$x = X/(X+Y+Z)$$

$$y = Y/(X+Y+Z)$$

$$z = Z/(X+Y+Z) \text{ และ}$$

$$x + y + z = 1$$

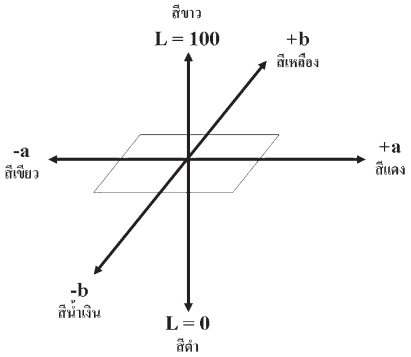
ค่า X เป็นค่าตอบสนองของสีแดง Y เป็นค่าตอบสนองของสีเขียว และ Z เป็นค่าตอบสนองของสีน้ำเงิน เห็นได้ว่าค่า xyz ทั้งสามนั้นรวมกันได้ 1 ดังนั้นการบอกค่า x, y ก็สามารถบอกตำแหน่งของสีที่ปรากฏให้เห็น (hue) และความสดใสของสี (chroma) บนกราฟสองมิติ ส่วนความสว่างของสี (lightness) หรือค่าการสะท้อนของแสง (reflectance) นั้นก็ใช้ค่า Y ซึ่งเป็นค่าตอบสนองสีเขียวใช้กำหนดความสว่าง ยกตัวอย่างเช่น วัสดุมีค่า Y = 23.44 จะสามารถบอกได้ว่า วัสดุนั้นมีค่าสะท้อนแสงเท่ากับ 23.44% โดยเป็นค่าการสะท้อนที่เทียบกับตัวอย่างมาตรฐานที่ 100%

การกำหนดค่าสีในระบบ CIELAB ถูกพัฒนาขึ้นเพื่อลดจุดบกพร่องของระบบ Yxy เนื่องจากค่าบนแกน xy ไม่ตอบสนองกับค่าต่างของสีวัสดุจริง ระบบ CIELAB ใช้ระบบกราฟสามมิติ เพื่อให้ค่าที่วัดได้มีการกระจายของค่าที่เท่ากันทุกจุด (uniform space) โดยที่ค่า L* a* และ b* บอกสีดังนี้

L* - เป็นค่าความสว่าง (lightness) โดยที่ L = 100 หมายถึงสีขาว และ L = 0 หมายถึงสีดำ

a* - เป็นค่าสีในแกนแดงและเขียว ถ้าค่า a* เป็นบวก สีจะไปทางสีแดง ถ้าเป็นลบ สีจะไปทางเขียว

b* - เป็นค่าสีในแกนเหลืองและน้ำเงิน ถ้าเป็นค่าบวก สีจะไปทางสีเหลือง ถ้าเป็นค่าลบ สีจะไปทางน้ำเงิน



ภาพที่ 4 แกนสีสามมิติในระบบ CIELAB

ค่าสีที่ได้จากระบบ Yxy นั้นยังสามารถนำมาคำนวณหาค่าความขาว (Whiteness Index, WI) ได้โดยใช้สมการของ CIE (CIE Equations) ตามมาตรฐาน ASTM E313-05 ซึ่งเป็นมาตรฐานการทดสอบวัสดุที่กำหนดโดยประเทศสหรัฐอเมริกา โดยที่สมการจะกำหนดค่าคงที่ให้สำหรับการวัดค่าสีตามแหล่งกำเนิดแสงมาตรฐาน C, D_{50}, และ D_{65} วัสดุที่มีค่าความขาวสูง จะมีสีขาวมากกว่าวัสดุที่มีค่าความขาวต่ำกว่า

เครื่อง UV-Vis spectrometer นั้นมีประโยชน์หลากหลายสำหรับการทดสอบวัสดุ ไม่ว่าจะเป็นการหาปริมาณความเข้มข้นของสาร การหาค่าอัตราการเกิดผลึกที่สามารถนำไปใช้ในการหาความสัมพันธ์จลน์ศาสตร์ทางเคมี (chemical kinetics) การหาค่าช่องว่างพลังงานสำหรับสารที่มีคุณสมบัติโฟโตคะตะลิสต์ และการวัดสีของวัสดุ นอกเหนือจากประโยชน์ที่ได้กล่าวมาในบทความนี้ เครื่อง UV-Vis spectrometer นั้นยังสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในงานทดสอบที่ต้องการศึกษาสมบัติของสารในเชิงสเปกตรัมได้อีกด้วย

เอกสารอ้างอิง

American Society for Testing and Materials. Standard practice for calculating yellowness and whiteness indices from instrumentally measured color coordinates. E313-05. In **Annual book of ASTM standard : paints, related coatings, and aromatics.** Vol. 06.01. Washington, DC : ASTM, 2008, p. 907-912.

_____. Standard practice for identification of instrumental methods of color or color-difference measurement of materials. E805-06. In **Annual book of ASTM standard : paints, related coatings, and aromatics.** Vol. 06.01. Washington, DC : ASTM, 2008, p. 919-923.

Fei, HL., et al. Synthesis of hollow V_2O_5 microspheres and application to photocatalysis. **Solid State Sciences,** 2008, vol. xx, p. 1-9.

Hess, B., et al. Citrate determines calcium oxalate crystallization kinetics and crystal morphology-studies in the presence of Tamm-Horsfall protein of a healthy subject and a severely recurrent calcium stone former, **Nephrol Dial Transplant,** 2000, Vol. 15, p. 366-374.

Perkampus, HH. UV-Vis spectroscopy and its applications. Berlin : Springer-Verlag, 1992.

กรมส่งเสริมอุตสาหกรรม. สำนักพัฒนาอุตสาหกรรมรายสาขา. ส่วนอุตสาหกรรมสิ่งทอ. เรียบเรียง โดย เพ็ญศรี ทองนพคุณ , ธนญา ตรึงตราจิตกุล และ วินา คุณาวิวัฒน์. **ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับทฤษฎีการวัดสี.** กรุงเทพมหานคร : คุรุสภาลาดพร้าว, 2540, 37 หน้า.