

ชื่อ-สกุล ผู้เสนอ สุรพล บุญดวง

สาขาวิชา :

นาย น.ส. นาง ดร. อ. ผศ. รศ. ศ.

ภาพถ่าย เกษตร
 ชีวภาพ วิศวกรรม-เทคโนโลยี

ที่ทำงาน ภาควิชาฟิสิกส์ คณะครูศาสตร์อุตสาหกรรม สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้า

วิทย-ศึกษา ทฤษฎี-แวกชั่น

ธบุรี บางมด กรุงเทพฯ 10140 โทร. 4270039 ต่อ 714

แพทย์ ทวีป

COMPUTER PROGRAMMING FOR IDENTIFICATION OF CLAY MINERALS.

Surapon Boonduang* , Gannaga Satittada* and Ornrudee Suttisri**

*Department of Physics and **Department of Mathematics, Faculty of Industrial Education and Science King Mongkut's Institute of Technology Thonburi, Bangkok 10140

On the identification of clay minerals by x-ray crystallography, the x-ray diffraction patterns of samples by the powder method or the diffractometry method are compared with the standard data file (JCPDS). This procedure consumes large amount of time and relies on the trial and error method. If the experimental datum are superimposed with any error, the analysis will make more difficulty. However, the computer can do this task, and also give the faster and reliable results. In this project, the programming language "dBase" is chosen to manipulate mineral datum that taken from JCPDS. Adding some calculation and decision programs with its own abilities; searching, sorting and file processing; are adequate to perform the identification of clay minerals with the faster and especially correct results.

ทำรื้อสร้างโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อช่วยในการวิเคราะห์ดิน

สุรพล บุญดวง* , กัดงา สาธิตธาดา* และ อรรณี สุธิตศรี**

*ภาควิชาฟิสิกส์, **ภาควิชาคณิตศาสตร์ คณะครูศาสตร์อุตสาหกรรมและวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธบุรี บางมด กรุงเทพฯ 10140

ในการวิเคราะห์ดินด้วยวิธีทางผลึกวิทยารังสีเอ็กซ์ (x-ray crystallography) จะเปรียบเทียบข้อมูลที่ได้จากผลการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกดิน ตัวอย่างโดยการถ่ายภาพวิธีผลึกผง หรือวิธีคินแพเรตมิเตอร์ จะวิเคราะห์ว่าเป็นแร่ชนิดใด ส่วนใหญ่จะอาศัยหลักการเปรียบเทียบชุดข้อมูลที่ได้จากการทดลองกับตารางข้อมูลมาตรฐาน (JCPDS) ซึ่งต้องใช้เวลานานการค้นหาค่อนข้างมาก และบ่อยครั้งที่ผลการทดลองมีการเบี่ยงเบนจากค่ามาตรฐาน ทำให้ยังชี้ได้ยากว่าควรจะเป็นสารชนิดใด ด้วยเหตุนี้จึงได้ทดลองใช้คอมพิวเตอร์ช่วยในการคำนวณและค้นหาข้อมูลมาตรฐานเพื่อใช้ในการสรุปผลได้รวดเร็วและสะดวกขึ้น เนื่องจากวิธีการหลักของการวิเคราะห์คือการเปรียบเทียบข้อมูลจากผลการทดลองกับข้อมูลมาตรฐาน จึงได้เลือกใช้โปรแกรม dBase ซึ่งมีความสามารถสูงมากในด้านการบริหารข้อมูล โดยเฉพาะการค้นหา จัดเรียง และการจัดการกับฐานข้อมูลมาตรฐานจำนวนมาก ๆ เมื่อผนวกกับการเขียนโปรแกรมช่วยในการคำนวณเพื่อใช้ในการจำกัดขอบเขตของการค้นหา และเปรียบเทียบ จะช่วยให้ข้อมูลที่ถูกต้องและรวดเร็วขึ้นกว่าการค้นหาจากตารางมาตรฐานตามวิธีการเดิม

ชื่อเรื่อง (ไทย) การสร้างโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อช่วยในการวิเคราะห์ดิน

ผลการทดลอง

จากข้อมูลที่ได้จากภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ จากตัวอย่างดิน ให้นำเข้ามาทดสอบการทำงานของโปรแกรมวิเคราะห์ ดินที่สร้างขึ้นโดยจากค่าเบี่ยงเบนของข้อมูลที่ได้จากการทดลองให้ผิดพลาดภายในช่วง $\pm 1\%$ ให้ค่า d-spacing และความเข้ม I ดังแสดงในรูป 1

Rec	Result	d	I	d	I	d	I	d	I	d	I	d	I
001	Sample#1 >	7.16 x	4.44 4	4.36 5	4.13 7	3.79 7	3.59 x	3.57 x	2.56 6				
		2.81 5	2.49 0	2.36 6	2.34 9	2.32 9	1.67 5	1.50 x					

รูปที่ 1 แสดงการใช้ข้อมูลที่ได้จากการทดลอง

และจากการทำงานของคอมพิวเตอร์เปรียบเทียบข้อมูลกับข้อมูลที่อยู่ในโปรแกรมที่ได้จาก JCPDS ทำการเปรียบเทียบแสดงชนิดของแร่ดิน ดังแสดงในรูป 2

Rec	Result	d1	I	d2	I	d3	I	d4	I	d5	I	d6	I	d7	I	d8	I
029	F 10- 430, Unknown#1 >	7.15 9	4.45 7	4.37 7	4.12 6	3.79 7	3.56 x	2.50 8	2.32 9								
	% Error >	0.14 +	0.22 -	0.23 +	0.24 +	0.26 +	0.28 +	0.40 +	0.00 0								
029	F 6- 221, Unknown#2 >	7.16 x	3.56 g	2.56 8	2.50 8	2.39 8	2.34 9	1.67 5	1.50 x								
	% Error >	0.28 -	0.26 -	0.00 0	0.40 -	0.42 -	0.00 0	0.00 0	0.00 0								

Rec	File	d1	I	d2	I	d3	I	d4	I	d5	I	d6	I	d7	I	d8	I
023	F 10- 430 >	7.15 9	4.45 7	4.37 7	4.12 6	3.79 7	3.56 x	2.50 8	2.32 9								
029	F 6- 221 >	7.16 x	3.56 g	2.56 8	2.50 8	2.39 8	2.34 9	1.67 5	1.50 x								

Rec	Name	d1	I	d2	I	d3	I	d4	I	d5	I	d6	I	d7	I	d8	I
033	Dickite >	7.15 9	4.45 7	4.37 7	4.12 6	3.79 7	3.56 x	2.50 8	2.32 9								
029	Kaolinite >	7.16 x	3.56 g	2.56 8	2.50 8	2.39 8	2.34 9	1.67 5	1.50 x								

รูป 2 แสดงผลการเปรียบเทียบและค้นหาโดยคอมพิวเตอร์

ผลที่ได้จากการเปรียบเทียบจะแสดงค่าเปอร์เซ็นต์การเบี่ยงเบนมาตรฐานกำกับไว้ด้วย เพื่อช่วยประกอบการตัดสินใจของผู้ทดลองอีกชั้นหนึ่ง เพราะบางกรณีผลการเปรียบเทียบอาจได้ค่าคอมมากกว่า 1 สำหรับแร่ดินชนิดเดียว ค่าเปอร์เซ็นต์การเบี่ยงเบนจะช่วยในการพิจารณาให้ถูกต้องยิ่งขึ้น จากตัวอย่างได้ผลใกล้เคียงความจริง นั่นคือมีเปอร์เซ็นต์การเบี่ยงเบนค่อนข้างน้อย สรุปได้ว่าตัวอย่างที่ใช้ทดสอบประกอบด้วย ดิกไคท์ (Dickite) และคาโอลินไนท์ (Kaolinite) มีเปอร์เซ็นต์การเบี่ยงเบนอยู่ในช่วง 0 ถึง $\pm 0.42\%$ นอกจากแสดงค่าระยะห่างระหว่างระนาบ (d-spacing) และความเข้ม (I) แล้วยังสามารถแสดงชื่อ สาร, โครงสร้าง, หมายเลขข้อมูล (file number) และรายละเอียดทั้งหมดของแร่ดินที่วิเคราะห์ได้ โดยเรียกจากฐานข้อมูลหลักที่บันทึกไว้ในดิสเกต

References

1. ยืน กุ้ววรรณ, สมนึก ศิริโค, ระบบจัดการฐานข้อมูล dBASE II; บริษัทซีไอเคเอ็ม จำกัด, กรุงเทพฯ, 2527
2. Robert Byers, Anna Carlile; dBASE III User Manual; Ashton-Tate, USA, 1985
3. JCPDS (1979). Joint Committee on Powder Diffraction Standards-International Centre for Diffraction Data, Swarthmore, PA.