บทคัดย่อ

การศึกษาวิจัยนี้ประสบผลสำเร็จในการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อใช้ทำนายอัตราการเปลี่ยนรูปผลึกโดยอาศัยสารละลายเป็นสื่อกลาง (solution mediated transformation) ของผลึกที่มีโครงสร้างผลึกมากกว่าหนึ่งแบบ และช่วยให้เข้าใจเรื่อง การเกิดการเปลี่ยนรูปผลึกโดยอาศัยสารละลายเป็นสื่อกลาง มากยิ่งขึ้น ผลการคำนวนที่ได้จากแบบจำลองนี้ได้นำมาเปรียบเทียบกับค่าจากการทดลองการเกิด การเปลี่ยนรูปผลึกโดยอาศัยสารละลายเป็นสื่อกลางของ อัลฟา-ดีแอล-เมทไธโอนีน (α-DL-methionine) ไปเป็นแกมมา-ดีแอล-เมทไธโอนีน (γ-DL-methionine) โดยเปรียบเทียบในส่วนของความเข้มข้นของเมทไธโอนีนที่เปลี่ยนแปลงไปตามเวลาและอัตราส่วนโดยมวลของผลึกทั้งสองแบบ เบื้องต้นนั้นตัวแปรต่างๆ ที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเจาะจงใช้เฉพาะที่สามารถวัดได้จากการทดลองเกี่ยวกับปรากฏการณ์ การโตของผลึก การเกิดผลึกใหม่ การละลายของผลึก และช่วงเวลาก่อนการเกิดผลึกของผลึกทั้งสองแบบ โดยไม่มีตัวแปรที่สร้างมาจากข้อมูลของการเปลี่ยนรูปผลึกโดยอาศัยสารละลายเป็นสื่อกลางมาเกี่ยวข้อง ซึ่งแบบจำลองที่สร้างขึ้นให้ผลการคำนวนไปในทิศทางเดียวกันกับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลอง แต่ค่าอัตราการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างของผลึกนั้นไม่ถูกต้อง จากการวิเคราะห์ผลที่ได้ทำให้ทราบว่าตัวแปรที่มีผลทำให้แบบจำลองและการทดลองให้ผลไม่เหมือนกันคือ ค่าคงที่ของอัตราการละลาย เนื่องจากเมื่อลองกำหนดตัวแปรที่เกี่ยวข้องกับข้อมูลการเกิดการเปลี่ยนรูปผลึกโดยอาศัยสารละลายเป็นสื่อกลาง เพิ่มลงไปแบบจำลองให้ผลออกมาดีมาก สำหรับเหตุผลของความคลาดเคลื่อนของแบบจำลองนั้นก็ได้วิเคราะห์และนำเสนอไว้ในงานวิจัยนี้แล้ว การศึกษาในส่วนที่สองเป็นการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของหอกลั่นไอน้ำแบบเปิด เพื่อนำมาใช้หาปริมาณอัตราส่วนที่เหมาะสมในการป้อนกลับของของเหลวผลิตภัณฑ์ที่ได้หลังจากการกลั่นเข้าสู่หอกลั่น ในกรณีที่ต้องการออกแบบให้หอกลั่นมีขนาดเล็กที่สุด (จำนวนชั้นของหอกลั่นน้อยที่สุด) ซึ่งในเบื้องต้นนั่นคาดว่าจะสามารถสร้างสมการที่สามารถแก้ได้โดยง่าย แต่เมื่อสร้างสมการขึ้นมาสำเร็จ สมการที่ได้นั้นมีความซับซ้อนมาก จนไม่สามารถแก้โดยใช้ระบบวิธีการทางการวิเคราะห์ได้ อย่างไรก็ตามสมการที่ถูกสร้างขึ้นนี้สามารถแก้ได้โดยใช้ระบบวิธีการทางตัวเลขในทุกๆ สภาวะการทดลอง ซึ่งในรายงานนี้ก็ได้แสดงตัวอย่างการแก้สมการไว้ด้วย

Abstract

The current study has successfully produced a mathematical model that can be used to predict the rate of solution mediated transformation of polymorphs and also aid understanding of the phenomenon. The model results have been compared with experimental values of the solution mediated transformation of α-DL-methionine into γ-DL-methionine (time dependent methionine concentration and polymorph mass fraction results). Initially the parameters in the model were fitted based on experimental measurements of crystal growth kinetics, nucleation kinetics, dissolution kinetics and induction times for the two polymorphs; there were no parameters in the model that were fitted using solution mediated transformation data. This model showed the same trends as the experimental data, but the rate of transformation was not correct. Analysis of the results showed that the only parameter that could be responsible for the mismatch was the dissolution rate constant; when this result was fitted based on solution mediated transformation results then the fit was very good. Reasons for the mismatch are also discussed.

A second study was made of modeling open steam distillation columns in order to solve for the reflux ratio resulting in a minimum number of stages. It was hoped to be able to find an analytical solution to the problem, however while an equation could be found that gave the solution, the equation was very complex and could not be analytically solved. The equation could be solved numerically for any set of operating conditions, and example solutions are shown in this report.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี