รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์ ประจำปีงบประมาณ ๒๕๕๙

การพิสูจน์เอกลักษณ์พลอยแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนโดยเคโมเมทริกซ์และเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเพื่อประโยชน์เชิงพาณิชย์

Characterization of Heated Tanzanites by Chemometrics and Molecular Spectroscopic Techniques for Commercial Application

รองศาสตราจารย์ ดร. พิมพ์ทอง ทองนพคุณ
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. คเณศ วงษ์ระวี
ดร. เมธินี จามกระโทก
นางสาวปริญญา ชินดุษฎีกุล

โครงการวิจัยประเภทงบประมาณเงินรายได้ จากเงินอุดหนุนรัฐบาล (งบประมาณแผ่นดิน)
ประจำปีงบประมาณ พ.ศ. ๒๕๕๙ มหาวิทยาลัยบูรพา

สัญญาเลขที่ ๕๕/๒๕๕๙

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์ ประจำปีงบประมาณ ๒๕๕๙

การพิสูจน์เอกลักษณ์พลอยแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนโดยเคโมเมทริกซ์และเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเพื่อประโยชน์เชิงพาณิชย์

รองศาสตราจารย์ ดร. พิมพ์ทอง ทองนพคุณ
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. คเณศ วงษ์ระวี
ดร. เมธินี จามกระโทก
นางสาวปริญญา ชินดุษฎีกุล

มหาวิทยาลัยบูรพา วิทยาเขตจันทบุรี

สนับสนุนโดย
สำนักบริหารโครงการส่งเสริมการวิจัย
ในอุดมศึกษาและพัฒนามหาวิทยาลัยวิจัยแห่งชาติ
สำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา

สารบัญ

		หน้า
	กิตติกรรมประกาศ	ก
	บทคัดย่อ	ข
	สารบัญ	ง
	สารบัญตาราง	จ
	สารบัญรูป	ช
บทที่ 1	**บทนำ**	1
1.1	ความสำคัญและที่มาของปัญหาที่ทำการวิจัย	5
1.2	ทฤษฎี สมมุติฐาน และกรอบแนวความคิดของโครงการวิจัย	5
1.3	การทบทวนวรรณกรรม/สารสนเทศที่เกี่ยวข้อง	11
1.4	วัตถุประสงค์ของโครงการวิจัย	17
1.5	ขอบเขตของโครงการวิจัย	17
1.6	ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	18
บทที่ 2	**วิธีดำเนินการวิจัย**	19
2.1	วัสดุและอุปกรณ์	19
2.2	เครื่องมือที่ใช้ในการวิเคราะห์	20
2.3	วิธีดำเนินการทดลอง	21
บทที่ 3	**ผลการวิจัยและอภิปรายผล**	
3.1	ผลการปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์ด้วยความร้อนและการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี	24
	3.1.1 ผลการเผาและการวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเครื่องมือพื้นฐาน	24
	3.1.2 การวิเคราะห์ด้วย Energy Dispersive X-ray Fluorescence	26
	3.1.3 ผลการเปลี่ยนสีของซอยไซต์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน	26
	3.1.4 ยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซต์ ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน	30
	3.1.5 การวิเคราะห์ด้วยเทคนิค Fourier Transform Infrared Spectroscopy	32

สารบัญ

		หน้า
3.2	การปรับปรุงคุณภาพแทนซาไนท์ด้วยความร้อนและการวิเคราะห์ด้วยสเปกโทรสโกปี	37
	3.2.1 ผลการเปลี่ยนแปลงสีหลังการเผาและการวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเครื่องมือพื้นฐาน	37
	3.2.2 การวิเคราะห์ด้วยเครื่อง Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF)	37
	3.2.3 การเปลี่ยนแปลงสีของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน	38
	3.2.4 ยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของแทนซาไนท์ ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน	41
	3.2.5 การวิเคราะห์แทนซาไนท์ด้วย Fourier Transform Infrared Spectrophotometer	44
3.3	การวิเคราะห์ด้วยฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรมิเตอร์ (Fluorescence Spectrometer)	49
3.4	การวิเคราะห์ด้วยรามานสเปกโทรมิเตอร์ (Raman Spectrophotometer)	51
3.5	การใช้หลักการทางเคโมเมทริกซ์ในการแยกกลุ่มของพลอย	54
3.6	การจำแนกซอยไซท์ (zoisite) และแทนซาไนท์ (tanzanite) ด้วยเทคนิคเคโมเมทริกซ์	58
	3.6.1 การเปรียบเทียบแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงน้ำเงิน) เปรียบเทียบซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาลอมเหลือง) และซอยไซท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (สีม่วงน้ำเงิน)	58
	3.6.2 การเปรียบเทียบแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงน้ำเงิน) เปรียบเทียบกับแทนซาไนท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (สีม่วงน้ำเงิน-น้ำเงินอมม่วง)	61
	3.6.3 การจำแนกซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาล) และซอยไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน – น้ำเงินอมม่วง) ที่ผ่านการเผา	63
	3.6.4 การจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีน้ำเงิน) และแทนซาไนท์ (สีน้ำเงินสด) ที่ผ่านการเผา	65
	3.6.5 การจำแนกซอยไซท์ที่ผ่านการเผา (สีม่วงอมน้ำเงิน) กับแทนซาไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน) ทั้งธรรมชาติและผ่านการเผา	67
บทที่ 4 สรุปผลการวิจัย		
4.1	สรุปผลการวิจัย	69
4.2	ข้อจำกัดของงานวิจัยและข้อเสนอแนะเพื่อการวิจัยต่อในอนาคต	69
4.3	การนำผลงานวิจัยไปใช้ประโยชน์	70

สารบัญ

		หน้า
4.4	Output/ Outcome	70
	บรรณานุกรม	72
	ประวัติคณะผู้วิจัย	74

สารบัญตาราง

ตาราง		หน้า
3.1	ค่าดัชนีหักเห (R.I.) และค่าความถ่วงจำเพาะ (S.G.) ของซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน	25
3.2	ผลการวิเคราะห์ซอยไซท์ด้วย Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF)	26
3.3	ค่า L*, a*, b* และค่า ΔE ของซอยไซต์	27
3.4	ค่าดัชนีหักเห (R.I.) และค่าความถ่วงจำเพาะ (S.G.) ของแทนซาไนท์ธรรมชาติก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน	27
3.5	แสดงชนิดธาตุ ผลเชิงปริมาณ และค่าเฉลี่ยผลเชิงปริมาณด้วยเครื่อง Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF)	38
3.6	ค่า L*, a*, b* และค่า ΔE ของแทนซาไนท์	38

สารบัญรูป

รูปที่		หน้า
1.1	ก.) แทนซาไนท์ ข.) เปรียบเทียบแทนซาไนท์และไพลิน	2
1.2	ความหลากหลายของเฉดสีของซอยไซต์	6
1.3	การเทียบสีมาตรฐานของแทนซาไนท์	7
1.4	การจัดเกรดความสวยงามแบ่งตามเฉดสีของแทนซาไนท์	7
1.5	แทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน (บน) ซอยไซต์ธรรมชาติก่อนเผา (ล่าง)	8
1.6	อินฟราเรดสเปกตรัมของเพชรเกรด F, G, H และ I ทีคณะนักวิจัยได้วิเคราะห์เองด้วยอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี	10
1.7	ข้อมูลจากการนำสเปกตรัมของเพชรในรูปที่ 1.6 มาทำการจำแนกด้วยเคโมเมทริกซ์ด้วยเทคนิค Principal Component Analysis (PCA) โดยคณะนักวิจัย	10
1.8	ก.) FTIR spectra ของซอยไซท์สีน้ำเงิน (แทนซาไนท์) ในการวัดตามแนวแกนที่ต่างกัน ข.) FTIR spectra ของซอยไซท์ที่ไม่มีสี (colorless zoisite) ในการวัดตามแนวแกนที่ต่างกัน	12
1.9	อินฟราเรดสเปกตรัมของเพชรจากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการเตรียมตัวอย่างที่ต่างกัน A) เทคนิคดิฟฟิวรีเฟลกแตนซ์ B) เทคนิคทรานสเฟลกแตนซ์ C) เทคนิคสเปกคูลารีเฟลกชัน	14
1.10	ทรานแฟลกแตนซ์สเปกตราของเพชรธรรมชาติ เพชรผ่านการปรับปรุงคุณภาพและอาบรังสี	14
1.11	สเปคตรัมอ้างอิงของน้ำมันทั้ง 4 ชนิด	15
1.12	(A) DRIFTS สเปคตรัมของผงกาแฟคั่ว ผงกากกาแฟ และผงข้าวโพด (B) ข้อมูลจากเทคนิค PCA ในการจำแนกผงเมล็ดกาแฟคั่ว ข้าวโพด และกากกาแฟ	16
1.13	(A) รามานสเปคตรัมเมล็ดกาแฟอะราปิกา (B) รามานสเปคตรัมเมล็ดกาแฟโรบัสตา (C) ข้อมูลจากเทคนิค PCA ในการจำแนกชนิดของเมล็ดกาแฟ	16
2.1	ซอยไซต์สีเขียวอมน้ำตาลจากประเทศแทนซาเนีย	20
2.2	พลอยแทนซาไนท์สีม่วงธรรมชาติจากประเทศแทนซาเนีย	20
2.3	เครื่องมือวิเคราะห์อัญมณีพื้นฐานเพื่อบ่งบอกคุณสมบัติทางกายภาพ	20

สารบัญรูป

รูปที่		หน้า
2.4	เครื่องมือขั้นสูงในการวิเคราะห์คุณสมบัติทางเคมีของอัญมณี	21
2.5	ตัวอย่างกระบวนการเผาพลอยและผลการเปลี่ยนสีจากการเผา	22
3.1	ตัวอย่างพลอยซอยไซท์ก่อนและหลังเผาเทียบกับพลอยแทนซาไนท์ธรรมชาติที่ไม่ได้ผ่านการเผา	23
3.2	กราฟแสดงค่า a* และ b* ของซอยไซต์ก่อนและหลังการเผาที่ 400 – 600 องศาเซลเซียส	28
3.3	กราฟเปรียบเทียบค่าความสว่าง (Lightness) ของซอยไซต์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (Z1-Z5) 500 องศาเซลเซียส (Z6-Z10) และ 600 องศาเซลเซียส (Z7-Z15)	29
3.4	กราฟเปรียบเทียบ △L* ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ	29
3.5	ค่าความแตกต่างสี ΔE ของซอยไซต์หลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ	30
3.6	ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรา (UV-vis NIR spectra) เปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของซอยไซต์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน	31
3.7	อินฟาเรดสเปกตราเปรียบเทียบซอยไซต์ Z1-Z5 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีดำ, หลังเผา : เส้นสีแดง)	32
3.8	อินฟาเรดสเปกตราเปรียบเทียบซอยไซต์ Z6-Z10 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีดำ, หลังเผา : เส้นสีแดง)	32
3.9	อินฟาเรดสเปกตราเปรียบเทียบซอยไซต์ Z11-Z15 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 600 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีดำ, หลังเผา : เส้นสีแดง)	33
3.10	Diffuse reflectance spectra ของซอยไซต์ Z1-Z15 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส	34
3.11	Diffuse reflectance spectra ของซอยไซต์ในก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส	36

สารบัญรูป

รูปที่		หน้า
3.12	กราฟแสดงค่า a* และ b* ของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการเผา	36
3.13	กราฟเปรียบทียบค่าความสว่างของแทนซาไซท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (กลุ่ม T1) 500 องศาเซลเซียส (กลุ่ม T2) และ 600 องศาเซลเซียส (กลุ่ม T3)	39
3.14	กราฟแสดงค่าเฉลี่ยความสว่าง L* ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพของแทนซาไนท์	40
3.15	กราฟเปรียบเทียบความแตกต่างของค่าความสว่างเฉลี่ย △L* ของแทนซาไนท์ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ	40
3.16	ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรัมเปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของแทนซาไนท์ T1-T3 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส	**42**
3.17	ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรัมเปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของแทนซาไนท์ T4-T6 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 องศาเซลเซียส	43
3.18	ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรัมเปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของแทนซาไนท์ T7-T9 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 600 องศาเซลเซียส	44
3.19	อินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีน้ำเงิน, หลังเผา : เส้นสีแดง)	45
3.20	อินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีน้ำเงิน, หลังเผา : เส้นสีแดง)	46
3.21	อินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 600 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีน้ำเงิน, หลังเผา : เส้นสีแดง)	47
3.22	Diffuse reflectance spectra ของแทนซาไนท์ T1-T9 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส	48
3.23	เปรียบเทียบ Diffuse reflectance spectra ของซอยไซต์ในก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส	49
3.24	ฟลูออเรสเซนส์สเปกตรัมของซอยไซท์ (สีน้ำตาลอมเหลือง) และแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงอมน้ำเงิน) ที่ไม่ได้ผ่านการปรับปรุงคุณภาพ	50
3.25	ฟลูออเรสเซนส์สเปกตรัมของซอยไซท์ (ภาพบน) และ แทนซาไนท์ธรรมชาติ (ภาพล่าง) ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพที่อุณหภูมิต่างๆ	50

สารบัญรูป

รูปที่		หน้า
3.26	รามานสเปกตรัมของซอยไซท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C	51
3.27	รามานสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C	52
3.28	รามานสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C	53
3.29	รามานสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C	54
3.30	รูปแสดงการแยกตัวประกอบของข้อมูลปกติ (*X*) ด้วยเทคนิค PCA เป็นสกอร์ (*T*) และโหลดดิ้ง (*P*)	55
3.31	(ซ้าย) ข้อมูลปกติ (ขวา) ข้อมูลตัวอย่างจากเทคนิค PCA	56
3.32	แผนภาพการคำนวณ PCA	56
3.33	การกระจายตัวของข้อมูลในกลุ่ม A และ B โดยใช้สมการ $t_j = \frac{\bar{x}_A - \bar{x}_B}{S_j\sqrt{1/I_A + 1/I_B}}$	58
3.34	(ซ้าย) แสดงถึงค่า score ของแทนซาไนท์ (สีน้ำเงิน) และซอยไซท์ (สีแดง) และ (ขวา) แสดงค่า t-value ของแต่ละ wavenumber โดย wavenumber ที่แยกความเป็นลักษณะเฉพาะของพลอยทั้งสองชนิดได้จะถูกแทนด้วยสัญลักษณ์สีแดง	60
3.36	(ซ้าย) แสดงถึงค่า score ของแทนซาไนท์ (สีน้ำเงิน) และแทนซาไนท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (สีแดง) และ (ขวา) แสดงค่า t-value ของแต่ละ wavenumber โดย wavenumber ที่แยกความเป็นลักษณะเฉพาะของพลอยทั้งสองชนิดได้จะถูกแทนด้วยสัญลักษณ์สีแดง	62
3.36	การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคองค์ประกอบหลักหรือ PCA ในการจำแนกซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาล) และซอยไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน - น้ำเงินอมม่วง) ที่ผ่านการเผา	64
3.37	การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ในการจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีน้ำเงิน) และแทนซาไนท์ (สีน้ำเงินสด) ที่ผ่านการเผา	66
3.38	การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ในการจำแนกซอยไซท์ที่ผ่านการเผา (สีม่วงอมน้ำเงิน) กับแทนซาไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน) ทั้งธรรมชาติและผ่านการเผา	68

ڈ

กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัยนี้ได้รับทุนสนับสนุนการวิจัยจากงบประมาณเงินรายได้จากเงินอุดหนุนรัฐบาล (งบประมาณแผ่นดิน) ประจำปีงบประมาณ พ.ศ. 2559 มหาวิทยาลัยบูรพา ผ่านสำนักงานคณะกรรมการการวิจัยแห่งชาติ เลขที่สัญญา 55 /2559

โครงการวิจัยนี้สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี คณะผู้วิจัยขอขอบคุณหน่วยงานต้นสังกัด คณะอัญมณีและห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณี ศูนย์วิเคราะห์วิจัยอัญมณี มหาวิทยาลัยบูรพา ในการสนับสนุนการใช้เครื่องมือขั้นสูงสเปกโทรสโกปีในการวิเคราะห์อัญมณี และคณะวิทยาศาสตร์และศิลปศาสตร์ มหาวิทยาลัยบูรพา ในการอนุเคราะห์เครื่องฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรมิเตอร์ และขอขอบคุณหน่วยปฏิบัติการวิจัยอุปกรณ์รับรู้ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่ให้ความอนุเคราะห์ใช้เครื่องรามานสเปกโทรมิเตอร์ในการทำวิจัย รวมถึงขอบใจนิสิตผู้ช่วยวิจัยทุกคนที่ช่วยทำงานวิจัยในโครงการนี้ให้ประสบความสำเร็จไปได้ด้วยดี คณะนักวิจัยหวังเป็นอย่างยิ่งว่าข้อมูลวิจัยที่ได้อาจเป็นประโยชน์ทางวิชาการแก่นักวิจัย นิสิตนักศึกษา และบุคคลที่สนใจด้านอัญมณี

คณะผู้วิจัย

บทคัดย่อ

การพิสูจน์เอกลักษณ์พลอยแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนโดยเคโมเมทริกซ์และเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเพื่อประโยชน์เชิงพาณิชย์

พิมพ์ทอง ทองนพคุณ[*,1], ปริญญา ชินดุษฎีกุล[1], เมธินี จามกระโทก[2], คเณศ วงษ์ระวี[3]
[1]หน่วยวิจัยอัญมณีและเครื่องประดับ คณะอัญมณี มหาวิทยาลัยบูรพา วิทยาเขตจันทบุรี
[2]คณะวิทยาศาสตร์และศิลปศาสตร์ มหาวิทยาลัยบูรพา วิทยาเขตจันทบุรี
[3]หน่วยวิจัยอุปกรณ์รับรู้ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

แทนซาไนท์คืออัญมณีที่มีชื่อเสียงมากชนิดหนึ่งในการค้าอัญมณี แทนซานท์มีสีน้ำเงินม่วงที่เป็นเอกลักษณ์เฉพาะตัว เป็นพลอยชนิดซอยไซท์ ประเภทแคลเซียมอะลูมิเนียมไฮดรอกโซโรซิลิเกตในกลุ่มอิพิโดท เนื่องจากแทนซาไนท์มีสีสวยและหายากในธรรมชาติ ดังนั้นแทนซาไนท์ส่วนใหญ่ที่พบในการค้าอัญมณีจะมาจากการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนหรือการเผามาจากซอยไซท์เพื่อปรับปรุงสีให้ได้สีน้ำเงินถึงม่วง ณ เวลานี้ การปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนในซอยไซท์และแทนซาไนท์ยังไม่สามารถตรวจพบได้ วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือการจำแนกซอยไซท์ที่มาจากการเผาให้ได้สีน้ำเงินกับแทนซาไนท์ธรรมชาติด้วยการวิเคราะห์ลักษณะทางสเปกโทรสโกปีและการวิเคราะห์ด้วยเคโมเมทริกซ์

งานวิจัยนี้ทำการปรับปรุงคุณภาพสีของแทนซาไนท์ธรรมชาติและซอยไซท์จากแทนซาเนียด้วยการเผาภายใต้สภาวะบรรยากาศที่อุณหภูมิ 400-700 องศาเซลเซียส สีของตัวอย่างซอยไซท์หลังเผาเปลี่ยนจากสีเหลืองอมน้ำตาลเป็นสีม่วงอมน้ำเงินภายใต้การเผาทุกอุณภูมิ การวิเคราะห์ตัวอย่างทั้งก่อนและหลังเผาจะวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือพื้นฐานในการวิเคราะห์อัญมณีและทำการเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงสีและความแตกต่างของสีด้วยการวัดสีระบบ CIELAB วิเคราะห์สาเหตุการเปลี่ยนสีและองค์ประกอบทางเคมีด้วยเทคนิคเอกซเรย์ฟลูออเรสเซนส์ สเปกโทรสโกปีแบบกระจายพลังงาน ยูวีวิสิเบิลสเปกโทรสโกปี ฟรูเรียร์ทรานสฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี และรามานสเปกโทรสโกปี ผลการเปลี่ยนสีของตัวอย่างและคุณสมบัติของสเปกตรัมเป็นประโยชน์ต่อการปรับปรุงคุณภาพสีและการวิเคราะห์ตัวอย่างแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผา รามานสเปกตรัมสามารถนำมาใช้ร่วมกับการวิเคราะห์ด้วยเคโมเมทริกซ์ด้วยวิธี PCA ซึ่งให้ข้อมูลที่สัมพันธ์กับองค์ประกอบทางเคมีที่ใช้จำแนกความแตกต่างของซอยไซท์ที่ผ่านการเผาและแทนซาไนท์สีธรรมชาติได้

Abstract

Characterization of Heated Tanzanites by Chemometrics and Molecular Spectroscopic Techniques for Commercial Application

Pimthong Thongnopkun[*,1], Parinya Chindudsadeegul [2], Matinee Jamkratoke[2], Kanet Wongravee[3]

[1] *Gems & Jewelry Research Unit, Faculty of Gems, Burapha University, Chanthaburi Campus*

[2] *Faculty of Science and Arts, Burapha University, Chanthaburi Campus*

[3] *Sensor Research Unit, Faculty of Science, Chulalongkorn University*

Tanzanite is a very popular jewelry gemstone in gems trade. It is unique blue to violet gem variety of mineral zoisite, a calcium aluminium hydroxysoro silicate belonging to the epoiote group. Due to the beautiful color of tanzanite is rarely natural, nearly all tanzanite is usually has been heat-treated from zoisite to enhance the beautiful blue color in gem trade. At this time, heat treatment in zoisite and tanzanite are not detectable in most cases. The objective of this research aimed at differentiating heated blue zoisite from natural tanzanite by employing both spectroscopic characterization and chemometric analysis.

In the research, the color enhancement of natural tanzanite and zoisite from Tanzania was performed by heat treatment in an atmosphere with the heating temperatures at 400-700°C. The color of zoisite samples was changed from brownish yellow to bluish violet color with all heating temperatures. Basic gemological equipment was applied to identify the unheated and heated samples. In order to study the color change of tanzanite after heat treatment, colors and color differences were measured and evaluated using CIELAB color measurement. The cause of color change and chemical behavior of tanzanite were studied by energy-dispersive X-ray fluorescence (EDXRF) spectrometry, UV–visible spectroscopy, Fourier transform infrared spectroscopy, Fluorescence spectroscopy and Raman spectroscopy. The results of color change and spectral properties may be utilized to enhance the satisfactory color and identification of heated tanzanite. Raman spectra were characterized and used for multivariate chemometric analysis by principal component analysis (PCA). Application of PCA to Raman data revealed the pattern and relationship of chemical composition for differentiation of heated blue zoisite from natural tanzanite.

บทที่ 1
บทนำ

1.1 ความสำคัญและที่มาของปัญหาที่ทำการวิจัย

อุตสาหกรรมอัญมณีและเครื่องประดับถือเป็นอุตสาหกรรมที่มีมูลค่าส่งออกที่จัดอยู่ในอับดับ 4 ของประเทศในเวลานี้ และอยู่ในลำดับต้นๆ ของประเทศอย่างต่อเนื่องมาโดยตลอด แม้ว่าแหล่งวัตถุดิบจากประเทศไทยจะมีน้อยลง แต่ไทยยังเป็นประเทศศูนย์กลางอัญมณีของโลกเนื่องจากมีความโดดเด่นด้านการเจียระไนและการเผาพลอย ทำให้พลอยจากทั่วโลกวิ่งผ่านไทย แหล่งอุตสาหกรรมอัญมณีและเครื่องประดับของประเทศที่สำคัญนอกจากรุงเทพมหานครแล้ว ได้แก่ จังหวัดจันทบุรี ซึ่งเป็นศูนย์กลางการซื้อขายพลอยดิบ การเจียระไน และการเผาพลอยซึ่งเป็นภูมิปัญญาที่สำคัญของท้องถิ่นและประเทศไทย

เนื่องจากอัญมณีในประเทศไทยมาจากหลายแหล่งทั่วโลก และผู้ผลิตในอุตสาหกรรมอัญมณีส่วนใหญ่เป็นผู้ผลิตขนาดกลางและขนาดเล็กซึ่งไม่ได้ทำการผลิตเอง แต่เป็นการรับช่วงมาทำเครื่องประดับ ดังนั้น ผู้ประกอบการหรือผู้ส่งออกจึงจำเป็นต้องมีตรวจสอบชนิดและคุณภาพของอัญมณีก่อนการซื้อขายหรือนำไปผลิตว่าถูกต้องและได้มาตรฐานเป็นที่ยอมรับในระดับสากล ทำในการตรวจวิเคราะห์อัญมณีแต่ละชนิดมีความจำเป็นอย่างยิ่งในการซื้อขาย อัญมณีแต่ละชนิดจะมีคุณสมบัติทางกายภาพ ทางแสง ทางเคมี เฉพาะตัว ซึ่งสามารถตรวจวิเคราะห์ได้ด้วยเครื่องมือทางวิทยาศาสตร์ ชนิดอัญมณีเป็นสิ่งสำคัญอย่างยิ่งในการประเมินราคาการตกลงซื้อขาย อัญมณีธรรมชาติที่สีสวยงามและหายากย่อมมีราคาสูง ในปัจจุบันเทคโนโลยีในการสังเคราะห์อัญมณีและการปรับปรุงคุณภาพอัญมณีมีการพัฒนาขึ้นมาก อัญมณีที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพ คือการนำอัญมณีธรรมชาติที่คุณภาพต่ำมาผ่านการปรับปรุงคุณภาพให้สวยขึ้นเพื่อเพิ่มมูลค่า การปรับปรุงคุณภาพบางวิธีเป็นที่ยอมรับ เช่น การใช้ความร้อน การฉายรังสี แต่การปรับปรุงคุณภาพบางวิธีไม่เป็นที่ยอมรับ แต่อาจถือว่าเป็นการหลอกลวงในการซื้อขาย อย่างไรก็ตาม อัญมณีธรรมชาติที่มีสีสวยงามดั้งเดิมโดยไม่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพใดๆ ยังเป็นที่ต้องการและมีมูลค่าสูงมาก

แทนซาไนท์ (Tanzanite) เป็นพลอยชนิด (Species) ซอยไซท์ (Zoisite) อยู่ในตระกูล (Group) อิพิโดท (Epidote) ซอยไซต์ธรรมชาติที่ขุดพบนั้นมีหลากสี เช่น สีเทา เหลือง น้ำตาล เขียว น้ำเงิน ม่วง และน้ำเงินอมม่วง เป็นต้น แทนซาไนท์เป็นชื่อเรียกทางการค้าของซอยไซท์สีน้ำเงินอมม่วง ถือเป็นอัญมณีที่มีเสน่ห์ และน่าสนใจอีกชนิดหนึ่งในตลาดอัญมณีโลกในขณะนี้ ลักษณะเด่นที่สำคัญของแทนซาไนท์ คือ เป็นพลอยที่มีประกายสีน้ำเงินเข้ม หรือ สีน้ำเงินแกมม่วงดุจสีของซัฟไฟร์หรือไพลินกำมะหยี่ สีของแทนซาไซท์แสดงดังรูปที่ 1 ในกลุ่มพลอยสีน้ำเงินแทนซาไนท์จัดว่ามีความนิยมรองจากไพลิน (คอรันดัมสีน้ำเงิน) ลักษณะพิเศษของแทนซาไนท์คือ เมื่อส่องดูผ่านแกนผลึกที่ต่างกันจะให้สีที่แตกต่างกันเช่น สีน้ำเงิน สีม่วง สีเหลืองน้ำตาล (หรือเหลือง-น้ำตาล-แดง) เป็นต้น ด้วยความที่แทนซาไนท์เป็นพลอยที่หายากเนื่องจากมีแหล่งกำเนิดอยู่ที่แทนซาเนียเท่านั้น แต่มีสีสวยงาม ทำให้แทนซาไนท์เป็นพลอยที่ได้รับความนิยมอย่างรวดเร็วจากผู้ซื้อพลอยทั่วโลก และความต้องการในตลาดที่มีเพิ่มขึ้นเรื่อยๆ ดูได้จากราคาของแทนซาไนท์ที่สูงขึ้นอย่างรวดเร็วเมื่อเปรียบเทียบ

กับช่วงแรกๆ ที่ออกสู่ตลาด เช่น แทนซาไนท์ที่มีความงามจากราคาเมื่อเริ่มจำหน่ายออกตลาด 250 $ ต่อกะรัต ขณะนี้ขึ้นเป็น 550 $ ต่อกะรัต เป็นต้น

ก. ข.

รูปที่ 1.1 ก.) แทนซาไนท์ (http://www.gemstonescompany.com/tanzanite-gemstone.htm)
ข.) เปรียบเทียบแทนซาไนท์และไพลิน (blue sapphire) (http://sweetpics.site/t/tanzanite-vs-sapphire.html)

ซอยไซต์ธรรมชาติที่ขุดพบส่วนใหญ่เป็นสีน้ำตาล หรือสีเหลืองออกน้ำตาล คิดเป็น 95% ของซอยไซต์ทั้งหมด มีเพียงไม่ถึง 5% ที่จะพบตามธรรมชาติเป็นสีน้ำเงินหรือม่วง แต่เนื่องจากซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์เป็นสีที่มีความต้องการมากที่สุด ทำให้มีการปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์สีน้ำตาลเหลืองหรือน้ำตาลแดงโดยการเผาอบที่อุณหภูมิต่ำประมาณ 400-650 องศาเซลเซียส เพื่อลบเฉดสีที่ไม่ต้องการออกไปและทำให้ซอยไซท์สีน้ำตาลนั้นเป็นสีน้ำเงินหรือน้ำเงินอมม่วง การปรับปรุงคุณภาพของซอยไซท์สีเหลืองน้ำตาลให้ได้ซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์นี้จึงเป็นการเพิ่มมูลค่าพลอยได้มาก ปัจจุบันพบซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์มากขึ้นในตลาดอัญมณีซึ่งเป็นที่รู้กันว่าอาจมาจากการเผาเปลี่ยนสี แต่ยังไม่มีวิธีใดที่พิสูจน์ได้แน่นอน เนื่องจากแทนซาไนท์ที่มีสีน้ำเงินธรรมชาตินั้นหายากมาก อย่างไรก็ตาม มูลค่าและความต้องการของแทนซาไนท์สีน้ำเงินธรรมชาติ ยังเป็นที่ต้องการอย่างมากสำหรับผู้ซื้ออัญมณี

แม้การพัฒนาเทคโนโลยีและเครื่องมือในการตรวจวิเคราะห์ในปัจจุบันจะมีสูงขึ้น แต่ไม่สามารถจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยการเผาจากแทนซาไนท์สีน้ำเงินธรรมชาติได้ เป็นที่ถกเถียงกันของนักอัญมณีศาสตร์ว่าสามารถจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาได้จากสีแฝด (pleochroism) ที่ต่างกัน ซึ่งเป็นคุณสมบัติทางกายภาพของพลอยที่ให้สีต่างกันเมื่อมองผ่านแกนแสงผลึกในทิศทางต่างกัน มีข้อมูลว่าหากแทนซาไนท์สีน้ำเงินธรรมชาติที่ไม่ผ่านการเผาจะให้สีแฝด 3 สี ได้แก่ สีน้ำเงิน (blue) ม่วงน้ำเงิน (violet) และ เหลือง-น้ำตาล-แดง แต่เมื่อเผาแล้วจะให้สีแฝดเหลือ 2 สี โดยสีที่มองเห็นเหลือง-น้ำตาล-แดง จะหายไป อย่างไรก็ตาม ในทางปฏิบัติจริงพบว่า สีแฝด ไม่สามารถจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาได้แน่นอนร้อยเปอร์เซ็นต์หรือมีความน่าแม่นยำแต่อย่างใด เนื่องจากการมองสีแฝดขึ้นอยู่กับอุปกรณ์ในการวัดและสายตาผู้มองด้วย ทำให้ความน่าเชื่อถือลดลง ปัจจุบันยังไม่มีข้อมูลที่สามารถพิสูจน์เอกลักษณ์ของแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน เพื่อจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติกับแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนได้ ไม่ว่าจะด้วยเครื่องมือพื้นฐานหรือด้วยเครื่องมือขั้นสูงก็ตาม และพบงานวิจัยน้อยมากที่เกี่ยวข้อง

การศึกษาอัญมณีชนิดนี้ โดยเฉพาะการศึกษาเรื่องการเผาเปลี่ยนสีและการพิสูจน์เอกลักษณ์ของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลซึ่งจะให้ข้อมูลและองค์ความรู้ใหม่ ที่จะเป็นประโยชน์เชิงพาณิชย์ในการซื้อขายประเมินราคาอัญมณีชนิดนี้ได้

การวิจัยด้านอัญมณีระดับนานาชาติมีการนำเทคนิคการวิเคราะห์ขั้นสูงมาใช้มากขึ้นเพื่อให้ทันต่อเทคโนโลยีการสังเคราะห์และการปรับปรุงคุณภาพที่ก้าวหน้าขึ้น ด้วยความที่อัญมณีเป็นสินค้าราคาแพง ดังนั้นสิ่งที่ต้องคำนึงถึงในการตรวจวิเคราะห์คือต้องไม่ทำลายตัวอย่างอัญมณี เครื่องมือที่ใช้ในห้องปฏิบัติการอัญมณีทั้งในระดับชาติ และนานาชาติที่เป็นที่ยอมรับในการตรวจวิเคราะห์อัญมณีจึงได้แก่ เทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล เช่น FTIR spectrometer, Raman Spectrometer, UV/Vis NIR spectrometer เป็นต้น เนื่องจากเทคนิคเหล่านี้ไม่ต้องทำลายตัวอย่างและให้ข้อมูลที่สัมพันธ์กับองค์ประกอบทางเคมีของอัญมณีทำให้สามารถจำแนกชนิดของอัญมณีได้ แต่ด้วยเหตุที่การปรับปรุงคุณภาพอัญมณีมีเทคโนโลยีสูงขึ้นและบางกรณีเป็นเพียงการทำให้ธาตุภายในมีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย ผลของสเปกตรัมที่ได้จากการตรวจวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือทางสเปกโทรสโกปีเหล่านี้จึงให้ข้อมูลไม่พียงพอ อย่างไรก็ตาม เนื่องจากสเปกตรัมเชิงโมเลกุลนั้นจะสัมพันธ์กับโครงสร้างและองค์ประกอบทางเคมีของสารตัวอย่าง จึงมีสมมติฐานว่าหากตัวอย่างอัญมณีได้รับการปรับปรุงคุณภาพด้วยกรรมวิธีใดๆ แล้วเป็นเหตุให้อะตอมหรือโมเลกุลภายในเปลี่ยนไป จึงมีความเป็นไปได้ว่าจะสามารถบอกความแตกต่างของอัญมณีคนละเม็ดหรือคนละชนิดได้ด้วยสเปกตรัมเหล่านี้ แม้ว่าการวิเคราะห์สเปกตรัมด้วยตาเปล่าจะไม่เห็นความแตกต่างก็ตาม นักวิจัยได้ศึกษางานวิจัยที่สามารถช่วยในการจำแนกสเปกตรัมของสารหรือชนิดสารได้อย่างมีประสิทธิภาพที่สามารถนำเข้ามาช่วยในการวิเคราะห์ความแตกต่างของสเปกตรัมที่เหมือนกันมากจนไม่สามารถแยกได้ด้วยตาเปล่า วิธีดังกล่าวคือ เคโมเมทริกซ์ ดังนั้นนักวิจัยจึงได้มีแนวคิดที่จะนำเคโมเมทริกซ์เข้ามามีส่วนช่วยในการวิเคราะห์สเปกตรัมของพลอยแทนซาไซท์ที่ยังไม่สามารถจำแนกได้ด้วยสีแฝดและสเปกตรัมจากเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล

เคโมเมทริกซ์ เป็นศาสตร์แขนงหนึ่งทางเคมีที่ใช้สำหรับการวิเคราะห์ผลการทดลองปริมาณมหาศาล เพื่อกรองผลข้อมูลที่ได้จากการตรวจวัดทางเคมี โดยใช้การผสมผสานกระบวนการแปลผลด้วยวิธีการทางคณิตศาสตร์ สถิติ และคอมพิวเตอร์เพื่อจำแนก จัดการ หรือแปลความหมายข้อมูล รวมถึงอาจใช้ทำนายผลการทดลองทางเคมีที่น่าสนใจ ซึ่งนำมาใช้อย่างกว้างขวางในการวิเคราะห์ในการตรวจวัดทางเคมี โดยเฉพาะอย่างยิ่งการตรวจสอบที่ต้องใช้การเทียบรูปแบบ (Pattern recognition) นักเคมีวิเคราะห์จะใช้คอมพิวเตอร์และเคโมเมทริกซ์ในการวิเคราะห์ข้อมูลที่ได้จากเครื่องมือ เช่น การจัดกลุ่มสาร การเปรียบเทียบสเปกตรัมเพื่อระบุชนิดสาร การจำแนกชนิดสาร เป็นต้น เนื่องจากในบางครั้งนั้นนักเคมีหรือนักวิเคราะห์มีความเข้าใจในผลการทดลอง แต่ไม่สามารถอธิบายความหมายของข้อมูลที่ได้จากการทดลองได้อย่างตรงไปตรงมาเนื่องจากข้อมูลมีความซับซ้อนสูงเกินกว่าขอบเขตของความสามารถมนุษย์ที่จะวิเคราะห์ได้ด้วยตาเปล่าและคำตอบที่ได้จากการวิเคราะห์ข้อมูลโดยตรงนั้นจะเป็นการสรุปจากประสบการณ์ในการวิเคราะห์ของนักวิเคราะห์ ด้วยเหตุนี้ ข้อสรุปจากข้อมูลชุดเดียวกันอาจต่างกันได้ถ้าประสบการณ์ของผู้ทำการวิเคราะห์ต่างกัน ดังนั้นจึงได้มีนัก เคโมเมทริกซ์คิดค้นวิธีการที่แปลงผลข้อมูลดังกล่าวให้อยู่ในรูปแบบที่วิเคราะห์ได้ง่ายและ

สะดวกยิ่งขึ้นแสดงผลของข้อมูลเหล่านั้นเพื่อนำไปสู่การวิเคราะห์ระบบดังกล่าวได้ง่ายและสะดวกยิ่งขึ้น โดยเรียกวิธีการดังกล่าวว่าเทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลเชิงสำรวจ (Unsupervised Pattern Recognition) เพื่อนำมาซึ่งคำตอบหรือข้อสรุปที่ไม่ขึ้นกับตัวบุคคลที่ทำการวิเคราะห์ หากแต่ขึ้นกับความแตกต่างที่สอดคล้องกับวัตถุประสงค์ของระบบที่วิเคราะห์ ซึ่งการแปลผลของรูปแบบดังกล่าวนั้นเข้าใจและกระทำได้ง่าย ไม่ซับซ้อน ทำให้ข้อสรุปของการวิเคราะห์ไม่ว่าจะมาจากนักวิเคราะห์หรือบุคคลทั่วไปก็จะได้เป็นคำตอบหรือข้อสรุปที่เหมือนกัน (Consistency answer) โดยวิธีเหล่านี้จะช่วยแบ่งเบาภาระของนักวิเคราะห์อีกทั้งยังทำให้นักวิเคราะห์มีความเชื่อมั่นมากขึ้น จากงานวิจัยที่ผู้วิจัยได้ลองศึกษามาแล้วนั้น พบว่ามีการใช้งานเคโมเมทริกซ์ร่วมกับเทคนิคการแยกตัวอย่างประเภทต่างๆ เช่น โครมาโตกราฟี แมสสเปกโทรมิเตอร์ เป็นต้น ซึ่งงานวิจัยเหล่านั้นให้ผลการทดลองที่ดี สามารถใช้ในการจำแนกสเปกตรัมของสารตัวอย่างชนิดเดียวกันและต่างชนิดกันได้อย่างมีประสิทธิภาพ และมีการนำมาใช้งานจริงในเชิงอุตสาหภรรม เช่น ในงานด้านชีววิทยา อุตสาหกรรมยา และอุตสาหกรรมอาหาร เป็นต้น แต่ยังไม่พบมีการศึกษาหรือถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์เพื่อจำแนกชนิดของอัญมณีในอุตสาหกรรมอัญมณีเพื่อเชิงพาณิชย์เลย

ดังนั้นโครงการวิจัย การพิสูจน์เอกลักษณ์พลอยแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนโดยเคโมเมทริกซ์และเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเพื่อประโยชน์เชิงพาณิชย์ จึงมีวัตถุประสงค์ที่จะนำเทคนิคเคโมเมทริกซ์ร่วมกับสเปกตรัมที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลมาประยุกต์ใช้ในการพิสูจน์เอกลักษณ์พลอยแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน โดยใช้ข้อมูลที่ได้จากการตรวจวิเคราะห์อัญมณีด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลที่เป็นที่นิยมในการวิเคราะห์อัญมณีในห้องปฏิบัติการ ซึ่งให้ข้อมูลเกี่ยวกับโครงสร้างและองค์ประกอบทางเคมีของอัญมณีที่มีผลการวิคราะห์ถูกต้อง 100% และเป็นเทคนิคการวิเคราะห์ที่ไม่ทำลายตัวอย่างอัญมณี อีกทั้งสามารถวิเคราะห์อัญมณีบนตัวเรือนได้ซึ่งเป็นประโยชน์มากในการซื้อขายเชิงพาณิชย์ การประเมินราคา และการอำนวยความยุติธรรมในคดีที่เกี่ยวข้องกับอัญมณีได้ เนื่องจากหลักฐานที่ได้เป็นหลักฐานทางวิทยาศาสตร์ มีความถูกต้อง แม่นยำ สามารถตรวจสอบได้

โครงการนี้เป็นโครงการบูรณาการศาสตร์ทางด้านอัญมณีศาสตร์ เคมีวิเคราะห์ และเคมีคอมพิวเตอร์ คณะนักวิจัยประกอบด้วยผู้เชี่ยวชาญด้านอัญมณีศาสตร์ที่มีประสบการณ์สูงในการทำงานในห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณี มหาวิทยาลัยบูรพา เป็นเวลาเกือบ 10 ปี คณะนักวิจัยที่มีผลงานด้านการวิเคราะห์อัญมณีด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปีเชิงโมลเลกุล นักวิจัยด้านเคโมเมทริกซ์ที่เชี่ยวชาญ ดังนั้นคณะนักวิจัยมีความเชื่อมั่นว่าหากได้รับทุนสนับสนุนการวิจัย โครงการวิจัยจะประสบผลสำเร็จเป็นอย่างดี สามารถจำแนกชนิดแทนซาไซท์ที่ผ่านและไม่ผ่านการเผา ทำให้ได้องค์ความรู้ใหม่ด้านสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลของแทนซาไนท์พร้อมฐานข้อมูลที่สามารถนำไปใช้ประโยชน์ได้จริงในตลาดอัญมณี และเป็นประโยชน์ในการเจรจาการค้าบนพื้นฐานวิทยาศาสตร์ที่น่าเชื่อถือในอุตสาหกรรมอัญมณีไทย นอกจากนั้น งานวิจัยนี้จะเป็นต้นแบบที่สามารถประยุกต์เคโมเมทริกซ์และเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลไปใช้กับการศึกษาอัญมณีด้านอื่นๆ ต่อไป โครงการวิจัยที่เสนอขอรับทุนนี้จะช่วยยกระดับการวิจัยด้านวิทยาศาสตร์อัญมณีของประเทศที่

แตกต่างจากงานวิจัยด้านอัญมณีอื่นๆ ที่มีผู้วิจัยมาก่อน และจะมีส่วนสนับสนุนความน่าเชื่อถือในการซื้อขายอัญมณีในอุตสาหกรรมอัญมณีไทยสามารถแข่งขันได้ในระดับนานาชาติอย่างยั่งยืน

1.2 ทฤษฎี สมมุติฐาน และกรอบแนวความคิดของโครงการวิจัย

การวิเคราะห์ชนิดของอัญมณีโดยทั่วไปนั้น สามารถทำได้โดยใช้เครื่องมือทดสอบอัญมณีขั้นพื้นฐานในการทดสอบคุณสมบัติทางกายภาพได้แก่ ค่าดัชนีหักเห (Refractive index) ความถ่วงจำเพาะ (Specific gravity) ลักษณะทางแสงของอัญมณี (Optic character) แถบการดูดกลืนแสงของอัญมณี (Spectrum) และการเรืองแสงของอัญมณี (Fluorescence) สำหรับการแยกอัญมณีธรรมชาติจากอัญมณีสังเคราะห์หรืออัญมณีที่ผ่านการเผาในห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณีจะดูจากมลทินภายใน (Inclusions) ของอัญมณีภายใต้กล้องจุลทรรศน์ แต่ในบางครั้งลักษณะของมลทินภายในที่มีอยู่ในอัญมณีไม่เพียงพอที่จะชี้ชัด หรือในบางครั้งไม่พบมลทินใดๆ เลย ทำให้ไม่สามารถวิเคราะห์ได้ การใช้เครื่องมือวิเคราะห์ทางเคมีขั้นสูงจะช่วยในการหาคำตอบที่แท้จริงได้ เทคนิคทางสเปกโทรสโกปี เช่น เทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี และยูวีวิสซิเบิลเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี สามารถตรวจสอบและวิเคราะห์อัญมณีเหล่านี้ได้ เนื่องจากเป็นเทคนิคที่ให้ข้อมูลสเปกตรัมที่สัมพันธ์กับองค์ประกอบทางเคมีของอัญมณี นอกจากนี้เทคนิคเหล่านี้ไม่ทำให้ตัวอย่างอัญมณีเกิดความเสียหาย จึงนิยมนำมาตรวจและแก้ไขปัญหาการวิเคราะห์ในห้องปฏิบัติการอัญมณี

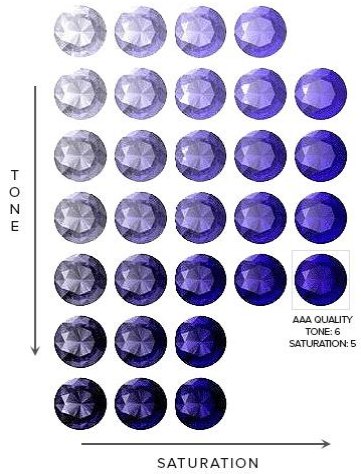
อย่างไรก็ตาม การจำแนกชนิดอัญมณีดังกล่าวในบางกรณีไม่สามารถบอกความแตกต่างได้ด้วยสเปกตรัมของช่วงคลื่นต่างๆ เหล่านี้ อาจเนื่องมาจากสาเหตุหลายประการที่ไม่สามารถควบคุมได้ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์เชิงเครื่องมือ เช่น การดูดกลืนแสงเฉพาะตัวของอัญมณีที่สูงมากทำให้เกิด over absorption ไม่สามารถจำแนกได้ด้วยสเปกตรัม หรือองค์ประกอบเคมีที่แตกต่างกันเล็กน้อยไม่สามารถเห็นได้ด้วยตาเปล่าในสเปกตรัม ทำให้ยังมีอัญมณีอีกหลายชนิดที่ไม่สามารถใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลจำแนกความแตกต่างได้ จากประสบการณ์ของคณะนักวิจัยที่ได้ทำงานวิจัยด้านการวิเคราะห์อัญมณีในห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณีที่ตลาดอัญมณี จังหวัดจันทบุรี และการศึกษาการวิเคราะห์อัญมณีด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลพบตัวอย่างปัญหาที่ประสบในการวิเคราะห์อัญมณีที่จำแนกความแตกต่างได้ยากด้วยสเปกตรัมหรือไม่สามาถจำแนกความแตกต่างได้เลย แทนซาไนท์เป็นอัญมณีอีกชนิดหนึ่งที่ประสบปัญหาในการตรวจวิเคราะห์เพื่อจำแนกการเผาหรือไม่ผ่านการเผาด้วยเครื่องมือพื้นฐานและเครื่องมือขั้นสูงบางชนิด จึงเป็นที่น่าสนใจในการศึกษาค้นคว้าหาคำตอบเพื่อนำผลวิจัยไปใช้ประโยชน์เชิงพาณิชย์ต่อไป

แทนซาไนท์ เป็นพลอยชนิดซอยไซท์ที่มีสีน้ำเงินแกมม่วง ซึ่งซอยไซต์เป็นแร่ในกลุ่มโซโลซิลิเกต ($Ca_2Al_3O(SiO_4)(Si_2O_7)O(OH)$) มีโครงสร้างผลึกเป็นแบบออโทรอมบิคที่มีอะลูมิเนียม (Al) อยู่ใน Octahedral site เชื่อมต่อกับ SiO_4 และ SiO_7 ที่อยู่ใน Tetrahedral site จับตัวกัน ทำให้เกิดช่องว่างใน Octahedal chain ซึ่งมี Ca^{2+} อยู่ภายในช่องว่าง ซอยด์ไซท์มีหลายสี แต่ละสีมีชื่อเรียกต่างกันและประกอบด้วยธาตุให้สีต่างกัน เช่น ซอยไซท์สีเขียว (Green Zoisite) เรียกว่า Anyolite ซอยไซท์สีชมพู (Pink Zoisite) หรือเรียกว่า Thulite และซอยไซท์สีน้ำเงิน (Blue Zoisite) หรือ

เรียกว่า Tanzanite เป็นต้น ความหลากหลายของสีของซอยไซท์แสดงดังรูปที่ 1.2 ซอยไซต์ธรรมชาติที่ขุดพบส่วนใหญ่เป็นสีเหลืองออกน้ำตาล คิดเป็น 95% ของซอยไซต์ทั้งหมด ทำให้มีการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนเพื่อเปลี่ยนสีซอยไซท์ให้เป็นสีที่ต้องการและได้รับความนิยม เช่น การเผาซอยไซท์สีน้ำตาลให้เป็นซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์ เป็นต้น

รูปที่ 1.2 ความหลากหลายของเฉดสีของซอยไซต์
(http://www.gemdat.org/gem-4430.html)

แทนซาไนท์เป็นพลอยที่หายาก สามารถขุดพบได้จากเขา Merelani Hill ประเทศแทนซาเนียเท่านั้น ถูกค้นพบครั้งแรกในภาคเหนือของแทนซาเนียในปี 1967 โดยนักเสี่ยงโชคชาวโปรตุเกส เดิมมีความเข้าใจว่าแร่ดังกล่าวจะเป็นอัญมณีประเภทแซปไฟร์ (sapphire) แต่ปรากฏว่าสเกลความแข็งของแร่แข็งน้อยกว่าแซปไฟร์และสีของแทนซาไนซ์จะแตกต่างไปจาก แซปไฟร์สีน้ำเงินหรือไพลิน และแตกต่างจาก Turquoise ที่มีสีน้ำเงิน สีเหลือง-เขียว สีน้ำตาล โดยลักษณะเด่นของ Tanzanite คือมีประกายสีน้ำเงินเข้ม และเป็นพลอยไทรโคอิก (Trichroic Stone) หมายถึงพลอยที่มี 3 สีในตัวเองเมื่อมองจากหลายทิศทางโดยจะแสดงสีที่ต่างกันตามทิศทางผลึกเมื่อส่องดูผ่านแกนผลึกที่ต่างกัน (Pleochroism) คือ แกน a มีสีน้ำตาลอมเหลือง แกน b มีสีม่วงอมแดง แกน c มีสีน้ำเงิน แม้สีของแทนซาไนท์มีลักษณะคล้ายกับไพลินมาก แต่แทนซาไนท์จะมีสีแฝดที่เด่นชัดกว่า มีค่าความถ่วงจำเพาะ และค่าดัชนีหักเหที่ต่ำกว่า นักอัญมณีศาสตร์จัดการเกรดขิงแทนซาไนท์โดยใช้หลักการเดียวกันกับเพชร คือ หลักการ 4C’s โดยวัดจาก ความสวยงามของสี (color) ความสะอาด (clarity) น้ำหนัก (carat) และการเจียรไน (cut) การจัดเกรดความสวยงามของสี (color grading) เป็นสิ่งสำคัญที่สุดสำหรับแทนซาไนท์ จะแยกความลึกของสี ความเข้มและความอิ่มสี ทำให้มีการจัดเกรดเป็น 6 เกรด ได้แก่ Exceptional, vivid, intense, moderate, light and pale สีของแทนซาไนท์ยังแบ่งออกเป็น 2 เฉดสี คือ เฉดสีม่วงและเฉดสีน้ำเงิน ดังแสดงในรูปที่ 1.3 และ 1.4



รูปที่ 1.3 การเทียบสีมาตรฐานของแทนซาไนท์
(http://www.winnoijewelry.com/this-amazing-tanzanite)

รูปที่ 1.4 การจัดเกรดความสวยงามแบ่งตามเฉดสีของแทนซาไนท์
(http://www.winnoijewelry.com/this-amazing-tanzanite)

เหตุที่ซอยไซต์ธรรมชาติที่ขุดพบส่วนใหญ่เป็นซอยไซท์สีน้ำตาลหรือสีเหลืองออกน้ำตาล คิดเป็น 95% ของซอยไซต์ทั้งหมด แต่สีที่นิยมและมีราคาสูงคือสีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์ ทำให้มีการปรับปรุงคุณภาพโดยการให้ความร้อนเพื่อเปลี่ยนสีจากซอยไซท์สีน้ำตาลเป็นซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์ เพื่อเพิ่มมูลค่า อุณหภูมิที่ใช้เผาคือ 400-600 องศาเซลเซียส ตัวอย่างการเผาเปลี่ยนสีดังแสดงในรูปที่ 1.5 ปัจจุบันแทนซาไนท์ในตลาดพลอยส่วนใหญ่จึงคาดว่าน่าจะมาจากการเผาเปลี่ยนสี อย่างไรก็ตาม แทนซาไนท์ธรรมชาติสีน้ำเงินอมม่วงยังเป็นที่ต้องการและราคาสูงกว่ามาก แต่นักอัญมณีศาสตร์ยังไม่มีวิธีที่แม่นยำน่าเชื่อถือในการจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติสีน้ำเงินอมม่วงออกจากแทนซาไนท์ที่มาจากการเผาเปลี่ยนสีของซอยไซท์สีเหลืองน้ำตาล

รูปที่ 1.5 แทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน (บน) ซอยไซต์ธรรมชาติก่อนเผา (ล่าง)

(http://www.winnoijewelry.com/this-amazing-tanzanite/[on-line])

งานวิจัยที่เกี่ยวกับแทนซาไนท์ยังมีข้อมูลไม่มาก เป็นเพียงการสนใจการเปลี่ยนสีจากการเผามาจากซอยไซท์ และมีข้อมูลออนไลน์ที่ถกเถียงกันของนักอัญมณีศาสตร์เรื่องการจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติและที่เผามาจากซอยไซท์ ว่าสามารถจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาได้ด้วยสีแฝด (pleochroism) ซึ่งเป็นคุณสมบัติทางกายภาพของพลอยที่ให้สีต่างกันเมื่อมองผ่านแกนแสงผลึกในทิศทางต่างกัน มีข้อมูลว่าหากแทนซาไนท์ที่ไม่ผ่านการเผาจะให้สีแฝด 3 สี ได้แก่ สีน้ำเงิน (blue) ม่วงน้ำเงิน (violet) และ เหลือง-น้ำตาล-แดง แต่เมื่อเผาแล้วจะให้สีแฝดเหลือ 2 สี โดยสีที่มองเห็นเหลือง-น้ำตาล-แดง จะหายไปทำให้เห็นเป็นสีน้ำเงินอมม่วงจากอีก 2 แนวแกนเด่นชัด อย่างไรก็ตามในทางปฏิบัติจริงพบว่า สีแฝด ไม่สามารถจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาได้แน่นอนร้อยเปอร์เซ็นต์หรือมีความน่าเชื่อถือแต่อย่างใด เนื่องจากการมองสีแฝดขึ้นอยู่กับอุปกรณ์ในการวัดและสายตาผู้มองด้วย ทำให้ความน่าเชื่อถือลดลง อย่างไรก็ตามแทนซาไนท์สีน้ำเงินม่วงนี้ยังเป็นที่ต้องการและราคาสูงมากหากเป็นสีน้ำเงินจากธรรมชาติ การศึกษาด้วยเครื่องมือขั้นสูงมีการให้ข้อมูลเพียงการเปลี่ยนสีเกิดจากวานาเดียม (V) ซึ่งสามารถศึกษาการเปลี่ยนสีได้จากการดูดกลืนในช่วงวิซิเบิลที่เปลี่ยนไปจากก่อนและหลังเผาของซอยไซท์สีน้ำตาล แต่ไม่มีการวิจัยด้านการจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผา ซึ่งจะมีประโยชน์มากในเชิงพาณิชย์ และข้อมูลจากห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณีพบว่ายังไม่มีวิธีใดในการจำแนกแทนซาไนท์ดังกล่าวได้เลย ข้อจำกัดและปัญหาในการวิเคราะห์ข้างต้นทำให้นักวิจัยได้ทำการวิเคราะห์อัญมณีหลายชนิดดังตารางด้วยเครื่องมือสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล แต่ยังประสบปัญหาการจำแนกสเปกตรัมได้ยากด้วยตาเปล่า จึงได้ทำการศึกษาศาสตร์ในการวิเคราะห์ด้วยเคโมเมทริกซ์เพื่อเป็นส่วนช่วยในการวิเคราะห์

ตามข้อจำกัดในการวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือพื้นฐานข้างต้น คณะนักวิจัยจึงมีแนวคิดในการนำเทคนิคสเปกโทรสโกปีโมเลกุลซึ่งเป็นเทคนิคการวิเคราะห์ทางเคมีขั้นสูงมาใช้ในการวิเคราะห์แทนซาไนท์ เนื่องจากการตรวจวิเคราะห์ไม่ทำลายตัวอย่างอัญมณีและได้ข้อมูลที่สัมพันธ์กับการเปลี่ยนโครงสร้างภายใน แต่การวิเคราะห์อัญมณีเพื่อให้ได้สเปกตรัมที่มีคุณภาพมาทำการจำแนกชนิดอัญมณี

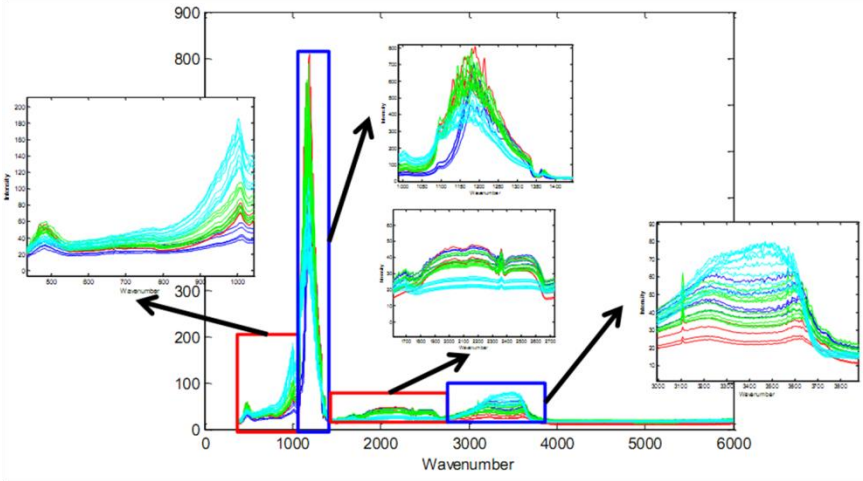
นั้น จำเป็นต้องรู้เทคนิคการวิเคราะห์ที่เหมาะสม เพราะแต่ละเทคนิคอาจได้ผลการทดลองที่ต่างกันขึ้นอยู่กับชนิดของอัญมณีและเทคนิคที่เลือกใช้อย่างไรก็ตาม ในบางครั้งนั้นนักวิเคราะห์นั้นมีความเข้าใจแต่ไม่สามารถอธิบายความหมายของข้อมูลที่ได้จากการทดลองได้อย่างตรงไปตรงมาเนื่องจากข้อมูลมีความซับซ้อนสูงเกินกว่าขอบเขตของความสามารถมนุษย์ที่จะวิเคราะห์ได้ด้วยตาเปล่าและคำตอบที่ได้จากการวิเคราะห์ข้อมูลโดยตรงนั้นจะเป็นการสรุปจากประสบการณ์ในการวิเคราะห์ของนักวิเคราะห์ด้วยเหตุนี้ถ้าประสบการณ์ของผู้ทำการวิเคราะห์ต่างกัน ข้อสรุปจากข้อมูลชุดเดียวกันอาจต่างกันได้ หากแต่เราสามารถบอกความแตกต่างของสเปกตรัมที่เป็นตัวแทนเฉพาะของสารตัวอย่างเราได้ด้วยคณิตศาสตร์ เทคนิคหนึ่งที่สามารถนำมาใช้ได้คือ เคโมเมทริกซ์

“เคโมเมทริกซ์ (Chemometrics)” เทคนิคทางเคโมเมทริกซ์นั้นเป็นสหศาสตร์ (interdisciplinary science) ที่เกี่ยวโยงและสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้กับศาสตร์สาขาอื่น ๆ มากมาย เช่น การวิเคราะห์ตัวอย่างในอุตสาหกรรมแบบ online หรือ inline, การวิเคราะห์อาชญาเคมี (forensic chemistry), การวิเคราะห์สารตัวอย่างที่มีองค์ประกอบโดยแต่ละองค์ประกอบมีโครงสร้างและอัตรกิริยาที่คล้ายกัน, การศึกษาระบบหลายตัวแปรที่มีความซ้อนทับกันของข้อมูล เป็นต้น ด้วยประโยชน์ที่เด่นชัดและการประยุกต์ใช้ที่หลากหลาย ทำให้ในปัจจุบันมีกลุ่มวิจัยที่ศึกษาและทำการพัฒนาเทคนิคทางเคโมเมทริกซ์อยู่ทั่วโลกทั้งในยุโรป อเมริกา จีน ญี่ปุ่น และอเมริกาใต้ นอกจากนั้นยังมีวารสารนานาชาติเฉพาะที่จัดทำไว้สำหรับตีพิมพ์เผยแพร่หลักการหรือเทคนิคเคโมเมทริกซ์ใหม่ ๆ ได้แก่ Journal of Chemometrics (Impact factor : 1.291), Chemometrics and Intelligent Laboratory systems (Impact factor : 2.111) นอกจากนี้ยังมีงานวิจัยด้านต่าง ๆ ที่ได้นำเอาเทคนิคเคโมเมทริกซ์ไปใช้ในการแก้ปัญหาซึ่งจะเห็นได้จากจำนวนผลงานตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติโดยเฉพาะทางเคมีวิเคราะห์ เช่น Analytical Chemistry (Impact factor : 5.214), Analyst (Impact factor : 3.272) และ Analytica Chimica Acta (Impact factor : 3.757) นั้นมีแนวโน้มที่มากขึ้นเป็นลำดับอีกด้วย ผลการวิจัยที่ใช้เคโมเมทริกซ์เข้ามามีส่วนช่วยในการวิเคราะห์ข้อมูลนั้น มีในอุตสาหกรรมเกษตร น้ำมัน อาหาร ซึ่งให้ผลการวิจัยที่มีประสิทธิภาพ สามารถได้ข้อมูลที่จำแนกชนิดสารได้เป็นอย่างดี

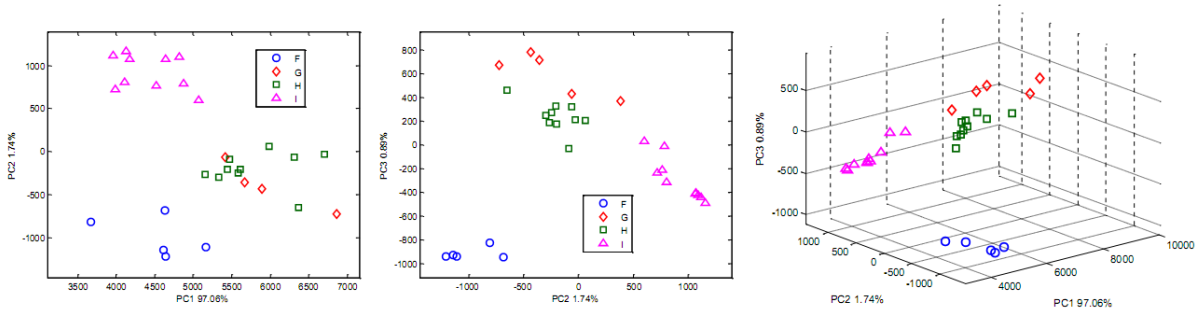
ด้วยประโยชน์ของเคโมเมทริกซ์และความน่าเชื่อถือของข้อมูล งานวิจัยในโครงการวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์ในการจำแนกสเปกตรัมด้วยเคโมเมทริกซ์นี้มาใช้จำแนกอัญมณีด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล ด้วยสมมติฐานที่ว่าเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลนี้จะให้ข้อมูลที่สัมพันธ์กับโครงสร้างหรือองค์ประกอบทางเคมีที่เป็นลักษณะเฉพาะของอัญมณีแต่ละชนิด หากมีการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างทางเคมีเพียงเล็กน้อยที่ไม่ปรากฏในสเปกตรัมหรือไม่สามารถวิเคราะห์ได้ด้วยตาเปล่า เทคนิคเคโมเมทริกซ์อาจมีส่วนช่วยในการจำแนกข้อมูลเหล่านั้นได้ ซึ่งจะเป็นประโยชน์ในการใช้จำแนกอัญมณีและแก้ปัญหาการตรวจวิเคราะห์อัญมณีได้ ซึ่งนอกจากจะได้ข้อมูลเชิงวิชาการแล้วยังมีประโยชน์ต่อการต่อรองเชิงพาณิชย์อีกด้วย

ด้วยสมมติฐานข้างต้น คณะนักวิจัยได้ทดลองทำการศึกษาเบื้องต้น (Preliminary study) ด้วยตัวเอง โดยทดลองกับตัวอย่างเพชร ซึ่งเป็นอัญมณีที่นิยมนำมาวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี เพื่อจำแนกชนิดเพชร และมีฐานข้อมูลมากมายเกี่ยวกับอินฟราเรด

สเปกตรัมของเพชรที่เบื้องต้นเราสามารถนำมาเปรียบเทียบและจำแนกชนิดเพชรได้ โดยนักวิจัยนำตัวอย่างเพชร เกรดต่างๆ (F, G, H, I) (ตัวอย่างเพชรได้รับความอนุเคราะห์ให้ยืมมาจากผู้ประกอบการเพชร) เพชรแต่ละเกรดจะมีประกายและสีแตกต่างกันเล็กน้อย มาทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ได้ผลดังรูปที่ 1.6



รูปที่ 1.6 อินฟราเรดสเปกตรัมของเพชรเกรด F, G, H และ I ที่คณะนักวิจัยได้วิเคราะห์เองด้วยอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี



รูปที่ 1.7 ข้อมูลจากการนำสเปกตรัมของเพชรในรูปที่ 6 มาทำการจำแนกด้วยเคโมเมทริกซ์ด้วยเทคนิค Principal Component Analysis (PCA) โดยคณะนักวิจัยได้เป็นผู้ทดลองทำเอง

รูปที่ 1.6 แสดงผลอินฟราเรดสเปกตรัมของเพชรทุกเกรดที่วัดด้วยอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี สเปกตรัมแสดงลักษณะการดูดกลืนแสงของเพชรที่คล้ายกันมาก พบความแตกต่างเพียงเล็กน้อยที่ประเมินด้วยสายตาได้ยาก ซึ่งทำให้ข้อมูลอินฟราเรดที่ได้มาไม่สามารถจำแนกเกรดเพชรแต่ละเม็ดได้ด้วยการวิเคราะห์สเปกตรัมนั้นๆ ด้วยการสังเกตด้วยตา แต่เมื่อนำสเปกตรัมดังกล่าวมาจำแนกโดยวิธีเคโมเมทริกซ์ได้ผลเป็นที่น่าพอใจ ดังรูปที่ 1.7 ในกราฟจะเห็นว่าข้อมูลของเพชรแต่ละเกรดจะมีการแสดงการจัดกลุ่มข้อมูลที่ต่างกัน ทำให้เป็นไปได้ในการจำแนกเกรดเพชรด้วยอินฟราเรดสเปกตรัมและเคโมเมทริกซ์ร่วมกัน ทำให้เห็นความเป็นไปได้ของโครงการนี้ในเบื้องต้นว่าสามารถจำแนกเกรดของเพชรได้ แต่ข้อมูลดังกล่าวมาจากการวิเคราะห์เพชรเพียงไม่กี่เม็ด ซึ่งหากสามารถมีตัวอย่างอัญมณีจำนวนมากในการทดลองจะทำให้ได้ข้อมูลที่ถูกต้องแม่นยำมากยิ่งขึ้น

ข้อมูลข้างต้นเป็นเพียงส่วนหนึ่งที่แสดงให้เห็นประสิทธิภาพของงานวิจัยในโครงการนี้ แต่เนื่องจากเพชรเป็นอัญมณีที่นิยมวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีและให้ข้อมูลมากเพียงพออยู่แล้ว หากมีการศึกษาข้อมูลของแทนซาไนท์ ซึ่งเป็นอัญมณีมีราคาสูงชนิดหนึ่ง แต่ยังไม่มีผู้ใดนำมาศึกษาการปรับปรุงคุณภาพด้วยการเผาและจำแนกความแตกต่างของแทนซาไนท์ที่ผ่านและไม่ผ่านการเผาได้ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทสโกปี และเทคนิคสเปกโทรสโกปีอื่นๆ เลยนั้น จะเป็นประโยชน์ทั้งด้านวิชาการและการนำไปต่อยอดเชิงพาณิชย์ได้

1.3 การทบทวนวรรณกรรม/สารสนเทศที่เกี่ยวข้อง

การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์และแทนซาไนท์ด้วยการเผา

งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์และแทนซาไนท์ด้วยการเผาที่ผ่านมานั้นเป็นการศึกษาการเผาเปลี่ยนสีซอยไซท์สีน้ำตาลเหลืองเป็นสีน้ำเงิน โดยพบข้อมูลกล่าวอ้างในสื่อออนไลน์ของห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณีและร้านจำหน่ายอัญมณีเป็นส่วนใหญ่ โดยไม่มีการอ้างถึงผลการทดลองด้านหรือหลักฐานวิทยาศาสตร์ และมีงานวิจัยบางส่วนที่กล่าวถึงการศึกษาสาเหตุการเกิดสีและการเปลี่ยนสีหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยการเผาโดยใช้ยูวีวิสซิเบิลสเปกโทรสโกปีเพื่อวิเคราะห์ธาตุให้สีที่เป็นสาเหตุการเปลี่ยนสี และหาอุณหภูมิในการเผาที่ทำได้สีน้ำเงิน โดยใช้อุณหภูมิระหว่าง 400 – 650 องศาเซลเซียส แต่ยังไม่พบว่ามีการวิเคราะห์จำแนกพลอยแทนซาไนท์สีน้ำเงินธรรมชาติ และซอยไซท์สีน้ำเงินที่มาจากการเผาเปลี่ยนสีได้ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลใดๆ

Burn R.G. (1993) ทำการศึกษาการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนของซอยไซท์สีเหลืองอมน้ำตาลโดยนำไป ปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 450 ถึง 550 องศาเซลเซียส ทำให้สีเหลืองอมน้ำตาลหายไปแล้วทำให้เห็นสีซอย์ไซท์นั้นเป็นสีน้ำเงินอมม่วงหรือแทนซาไนท์นั่นเอง สาเหตุการเกิดสีน้ำเงินของแทนซาไนท์พบว่าเกิดจากวานาเดียมไอออน (V^{2+}, V^{3+}, และ V^{4+}) ซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนเลขออกซิเดชั่นของวานาเดียม จาก V^{3+} ไปเป็น V^{2+} และ V^{4+} ไปเป็น VO^{2+} โดยทำการศึกษาการเปลี่ยนแปลงสีนี้ด้วยยูวีวิสิเบิลสเปกโทรสโกปี

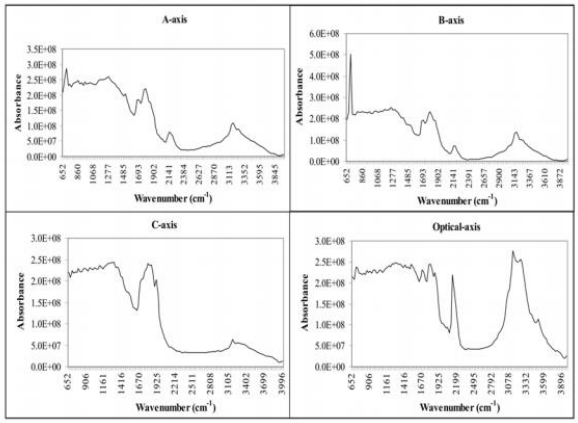
Schmetzer & Bank (1979) พบว่าซอยไซต์สีน้ำเงินอมม่วงเป็นผลมาจากการผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนซอยไซต์สีน้ำตาลเข้มถึงสีเหลืองที่อุณหภูมิประมาณ 500 องศาเซลเซียส ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของ V^{3+} ไปเป็น V^{4+}

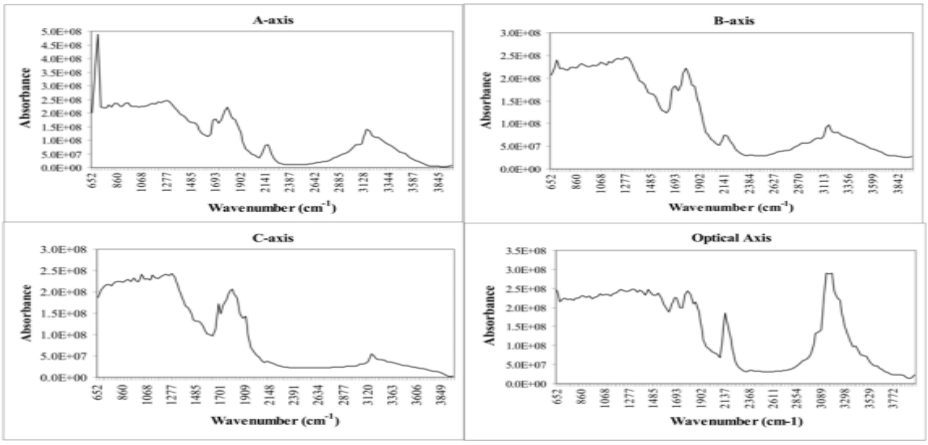
การวิเคราะห์อัญมณีด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล

งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการวิเคราะห์แทนซาไนท์ด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปีที่มีวัตถุประสงค์เพื่อพิสูจน์เอกลักษณ์หรือแยกพลอยแทนซาไซท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพโดยการเผายังไม่ปรากฏในงานวิจัยที่มีผู้ศึกษามาก่อน งานวิจัยที่ผ่านมาเป็นการวิเคราะห์พลอยในตระกูลซอยไซท์เพื่อศึกษาโครงการและการจัดตัวของน้ำในซอยไซท์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีโดย Langer และ Lattard (1980) นอกจากนี้มีการใช้เทคนิคอื่นๆ ในการตรวจวิเคราะห์โครงสร้างของซอยไซท์ เช่น Reddy *et.al.* (2011) ศึกษา NIR และ EPR spectrum ของซอยไซท์และซอยไซท์สีเขียว Bocchio *et.al.* (2012) ศึกษาซอยไซท์สีต่างๆ จากเหมือง Merelani ทางตะวันออกเฉียงเหนือของ

Tanzania ด้วยเครื่องมือตรวจคุณสมบัติทางกายภาพอัญมณี และเครื่อง LA-ICP-MS เพื่อหาปริมาณธาตุองค์ประกอบของซอยไซท์จากแหล่งนี้

Olivier (2008) นำเทคนิคยูวีวิสซิเบิลเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี และอินฟราเรดเสปกโทรสโกปีมาใช้ในการวิเคราะห์แทนซาไนท์จากประเทศแทนซาเนียและซอยไซท์สีอื่นๆ โดยนำตัวอย่างซอยไซท์สีต่างๆ มาเจียระไนเป็นแผ่นบางตามแนวแกนผลึกที่ต้องการวิเคราะห์ พบว่า สีน้ำเงินของแทนซาไนท์มีความสัมพันธ์กับ Ti^{4+}/Ti^{3+} ด้วย และยูวีวิสิเบิลสเปกตรัมในแต่ละแนวแกนของแทนซาไนท์ให้ลักษณะสเปกตรัมที่แตกต่างกันดัง สำหรับอินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ที่เจียระไนเป็นแผ่น และทำการวัดแต่ละแกนนั้นให้ผลแตกต่างกันเช่นกัน ดังรูปที่ 8 โดยผลการทดลองกล่าวถึงเพียงแค่การดูดกลืนของโมเลกุลน้ำในแทนซาไนท์ และพบว่าอินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์และซอยไซท์ที่ใสไม่มีสีให้ผลคล้ายกัน จากผลอินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์นี้ ไม่สามารถจำแนกแทนซาไนท์ก่อนและหลังเผาได้





ก. ข.

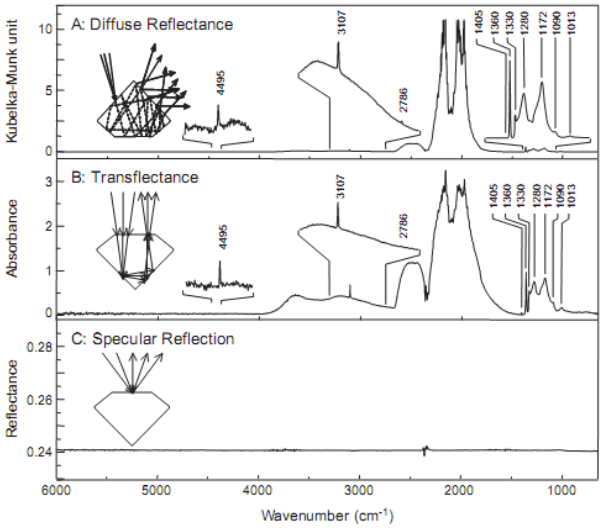
รูปที่ 1.8 ก.) FTIR spectra ของซอยไซท์สีน้ำเงิน (แทนซาไนท์) ในการวัดตามแนวแกนที่ต่างกัน

ข.) FTIR spectra ของซอยไซท์ที่ไม่มีสี (colorless zoisite) ในการวัดตามแนวแกนที่ต่างกัน (Olivier, 2008)

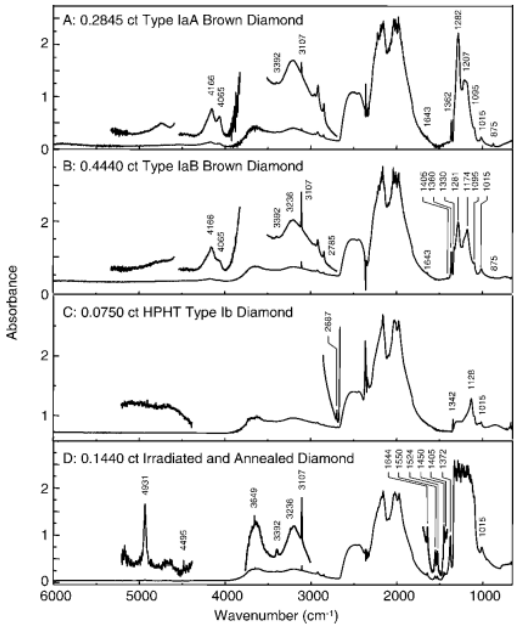
อย่างไรก็ตาม นักวิจัยมีความเชื่อมั่นว่าการวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีซึ่งถือเป็นเทคนิคหนึ่งที่นิยมและได้รับการยอมรับในการตรวจวิเคราะห์อัญมณีทั้งจำแนกอัญมณีที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพและอัญมณีธรรมชาตินั้น สามารถให้ข้อมูลที่สามารถเป็นประโยชน์ในการศึกษาพลอยที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพได้ เนื่องจากสเปกตรัมที่ได้ให้ข้อมูลสัมพันธ์กับโครงสร้างและองค์ประกอบเคมีภายในอัญมณีแต่ละชนิด แต่การวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเทคนิคอินฟราเรดสามารถเตรียมตัวอย่างได้หลายวิธี อาจต้องทำการศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสมกับอัญมณีชนิดนั้นๆ เพื่อให้ได้ผลของสเปกตรัมที่สามารถนำไปใช้เป็นประโยชน์ในการประเมินผลการวิเคราะห์ต่อไปได้

การวิเคราะห์ตัวอย่างเพื่อให้ได้สเปกตรัมที่มีคุณภาพมาทำการประเมินข้อมูลต่อนั้น จำเป็นต้องรู้เทคนิคการวิเคราะห์ที่เหมาะสม เพราะแต่ละเทคนิคอาจได้ผลการทดลองที่ต่างกัน ขึ้นอยู่กับสมบัติทางกายภาพของตัวอย่าง ชนิดของอัญมณี และเทคนิคที่เลือกใช้ นักวิจัยขอยกตัวอย่างผลการวิเคราะห์เพชร ดังตัวอย่างรูปที่ 1.9 แม้เพชรเม็ดเดียวกัน หากทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการเตรียมตัวอย่างด้วยวิธีต่างกัน จะให้ข้อมูลต่างกันได้ ดังนั้นผู้ที่จะทำการวิเคราะห์ควรมีความรู้ด้านสเปกโทรสโกปีด้วย งานวิจัยที่ผู้วิจัยได้เคยศึกษามาและพัฒนามาด้วยตนเองได้แก่ การตรวจวิเคราะห์อัญมณีด้วยเทคนิคทรานแฟลกแตนซ์ ซึ่งสามารถจำแนกชนิดอัญมณีที่อยู่บนตัวเรือนเครื่องประดับได้โดยไม่ทำลายตัวอย่าง และไม่มีผลเรื่องแกนแสง สามารถให้ผลเช่นเดียวกับเทคนิคส่องผ่าน ซึ่งสามารถนำมาใช้วิเคราะห์อัญมณีอื่นๆ ได้

อัญมณีแต่ละชนิดที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพหรือการสังเคราะห์ที่มีโครงสร้างและองค์ประกอบทางเคมีภายในไม่เหมือนกัน จะได้ผลอินฟราเรดสเปกตรัมเฉพาะตัวเช่น เพชรและอัญมณีเลียนแบบเพชรต่างๆ แม้การมองด้วยตาจะเป็นว่ามีลักษณะการกายภาพเหมือนกัน หรือการใช้เครื่องมือตรวจวิเคราะห์ทางกายภาพจะบอกได้บ้างนั้น แต่อินฟราเรดสเปกตรัมจะให้ความแตกต่างกันโดยสิ้นเชิง นอกจากนี้ รูปที่ 1.10 แสดงการเปรียบเทียบอินฟราเรดสเปกตรัมของเพชรธรรมชาติชนิด Type Ib เพชรที่ผ่านการอาบรังสี และการเผาที่อุณหภูมิและความดันสูง (High pressure high temperature; HPHT) ที่มีลักษณะและสีภายนอกเหมือนกัน พบว่าเพชรแต่ละชนิดให้อินฟราเรดสเปกตรัมเฉพาะตัว ซึ่งทำให้เทคนิคอินฟราเรดเป็นที่นิยมในการจำแนกชนิดเพชร อย่างไรก็ตาม ในกรณีอัญมณีอื่นๆ ที่ไม่สามารถบอกความแตกต่างสเปกตรัมได้ด้วยตาเปล่าอาจเนื่องจากการเปลี่ยนแปลงภายในโครงสร้างจำนวนน้อยมากจนไม่แสดงออกมาในสเปกตรัม จะทำให้ไม่สามารถจำแนกได้โดยการใช้เพียงสเปกตรัมอย่างเดียวเท่านั้น



รูปที่ 1.9 อินฟราเรดสเปกตรัมของเพชรจากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการเตรียมตัวอย่างที่ต่างกัน A) เทคนิคดิฟฟิวรีเฟลกแตนซ์ B) เทคนิคทรานสเฟลกแตนซ์ C) เทคนิคสเปกคูลารีเฟลกชัน
(Thongnopkun, P. & Ekgasit, S., 2005)

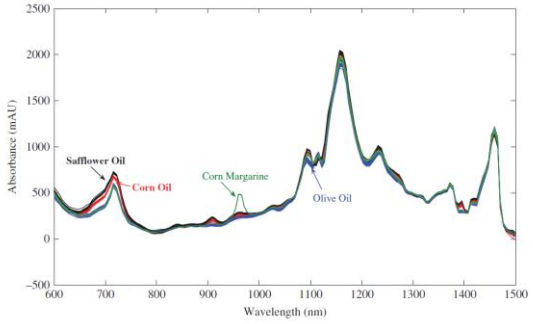


รูปที่ 1.10 ทรานแฟลกแตนซ์สเปกตราของเพชรธรรมชาติ เพชรผ่านการปรับปรุงคุณภาพและอาบรังสี
(Ekgasit, S. & Thongnopkun, P., 2005)

ดังนั้นหากเลือกวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสมกับชนิดอัญมณี จะสามารถได้ผลของสเปกตรัมที่สามารถนำไปใช้วิเคราะห์ข้อมูลต่อไปได้ สำหรับแทนซาไนท์ซึ่งประสบข้อจำกัดในการวิเคราะห์ดังที่กล่าวมาข้างต้น และงานวิจัยที่มีผู้ศึกษามาก่อนทำการศึกษาโดยการเจียระไนตัวอย่างเป็นแผ่นซึ่งทำลายตัวอย่าง หากมีการทำการศึกษาด้วยการเตรียมตัวอย่างหรือวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอื่นๆ เพิ่มเติมจะทำให้ได้องค์ความรู้ใหม่หรือข้อมูลที่เป็นประโยชน์ หรืออาจจำเป็นต้องใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลอื่นๆ ร่วมด้วย และหากผลการทดลองหรือสเปกตรัมที่ได้ไม่สามารถจำแนกหรือสังเกตได้ด้วยตาเปล่า ยังสามารถทดลองใช้เคโมทริกซ์ในการประเมินผลร่วมด้วย

เคโมเมทริกซ์กับการจำแนกชนิดสาร

การจำแนกชนิดอัญมณีด้วยเคโมเมทริกซ์ยังไม่พบข้อมูลว่ามีผู้วิจัยทำมาก่อน แต่คณะนักวิจัยได้ทำการทดลองใช้เคโมเมทริกซ์ในการวิเคราะห์ตัวอย่างเพชรดังที่กล่าวในหัวข้อข้างต้นนั้น ดังนั้นตัวอย่างการใช้เคโมเมทริกซ์ในการจำแนกสารประเภทต่างๆ จะขอยกตัวอย่างมาจากการจำแนกสารอินทรีย์ที่ใช้ในอุตสาหกรรมอาหาร เป็นต้น เช่น การจำแนกชนิดของน้ำมัน แสดงใน รูปที่ 1.11 เป็นการจำแนกน้ำมัน 4 ชนิด ได้แก่ น้ำมันข้าวโพด น้ำมันทานตะวัน น้ำมันปาล์ม และน้ำมันมะกอก ด้วยเทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIR) จะเห็นได้ว่าจากสเปคตรัมนั้นตำแหน่งของสัญญาณที่เกิดขึ้นในสเปคตรัมของน้ำมันทั้ง 4 ชนิดนั้นเหมือนกัน ซึ่งจะแตกต่างกันเพียงความเข้มของสัญญาณเท่านั้น โดยแทบจะเป็นไปไม่ได้เลยที่มนุษย์จะสามารถแยกสเปคตรัม NIR ของน้ำมันทั้ง 4 ชนิดได้ด้วยตาเปล่า โดยถ้านำเอาสเปคตรัม NIR ของของน้ำมันตัวอย่างดังรูปมา 1 เส้น แล้วให้ระบุชนิดของน้ำมันของสารตัวอย่าง จะพบว่าคำตอบที่ได้นั้นจะไม่แน่นอนขึ้นอยู่กับประสบการณ์ของบุคคลที่มาทำการวิเคราะห์ ทำให้ผลสรุปของการวิเคราะห์ดังกล่าวเกิดความผิดพลาดได้ง่ายและไม่น่าเชื่อถือ

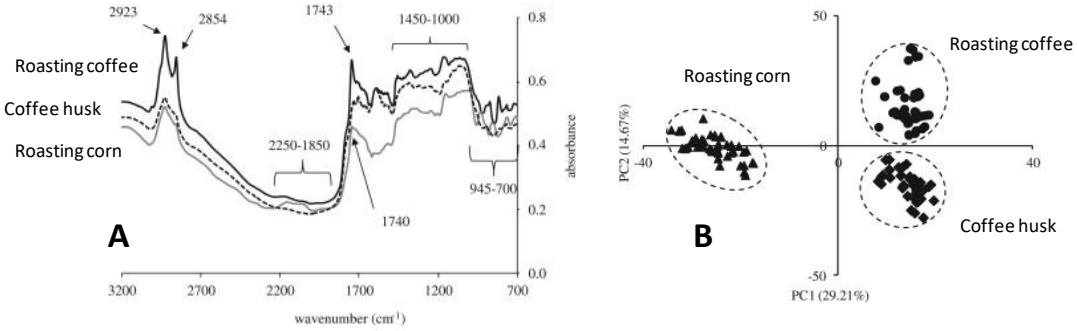


รูปที่ 1.11 สเปคตรัมอ้างอิงของน้ำมันทั้ง 4 ชนิด (Brereton, 2009)

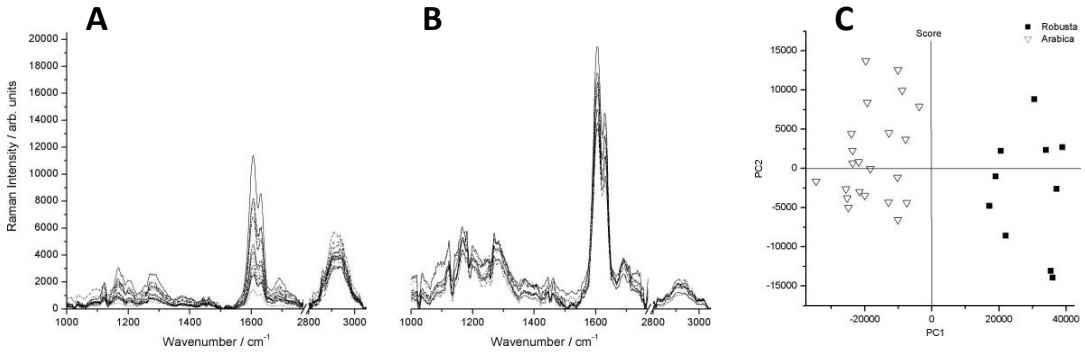
ด้วยเหตุนี้จึงได้มีนักเคโมเมทริกซ์คิดค้นวิธีการที่แปลงผลข้อมูลดังกล่าวให้อยู่ในรูปแบบที่วิเคราะห์ได้ง่ายและสะดวกยิ่งขึ้นแสดงผลของข้อมูลเหล่านั้นเพื่อนำไปสู่การวิเคราะห์ระบบดังกล่าวได้ง่ายและสะดวกยิ่งขึ้น โดยเรียกวิธีการดังกล่าวว่าเทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลเชิงสำรวจ (Unsupervised Pattern Recognition) เพื่อนำมาซึ่งคำตอบหรือข้อสรุปที่ไม่ขึ้นกับตัวบุคคลที่ทำการวิเคราะห์ หากแต่ขึ้นกับความแตกต่างที่สอดคล้องกับวัตถุประสงค์ของระบบที่วิเคราะห์ ซึ่งการ

แปลผลของรูปแบบดังกล่าวนั้นเข้าใจและกระทำได้ง่าย ไม่ซับซ้อน ทำให้ข้อสรุปของการวิเคราะห์ไม่ว่าจะมาจากนักวิเคราะห์หรือบุคคลทั่วไปก็จะได้เป็นคำตอบหรือข้อสรุปที่เหมือนกัน เทคนิคที่เรียกว่า Principal Component Analysis (PCA), Cluster Analysis (CA) และ Self Organizing Map (SOM) เป็นต้น

ด้วยข้อดีและข้อได้เปรียบของเทคนิคดังกล่าวจึงได้มีนักวิจัยจำนวนมากทั่วโลกประยุกต์ใช้เทคนิคนี้ในการจำแนกข้อมูลที่มีความซับซ้อนสูง ยกตัวอย่างเช่น Reis *et.al.* (2013) ได้ศึกษาความบริสุทธิ์ของผงกาแฟคั่ว และจำแนกความแตกต่างออกจากจากผงข้าวโพดอบแห้งและกากเมล็ดกาแฟคั่ว ด้วยเทคนิค Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy (DRIFTS) พบว่าสเปคตรัมที่ได้นั้นมีความซับซ้อน ซึ่งไม่สามารถแยกประเภทของผงกาแฟคั่วกับผงคั่วชนิดอื่นได้จากสเปคตรัมโดยตรง แต่จากผลการคำนวณโดยใช้ PCA พบว่าสามารถจำแนกชนิดของผงคั่วได้เป็นสามชนิด โดยสามารถทำนายชนิดของผงคั่วได้ถูกต้อง 100% ดังแสดงในรูปที่ 1.12



รูปที่ 1.12 (A) DRIFTS สเปคตรัมของผงกาแฟคั่ว ผงกากกาแฟ และผงข้าวโพด (B) ข้อมูลจากเทคนิค PCA ในการจำแนกผงเมล็ดกาแฟคั่ว ข้าวโพด และกากกาแฟ (Reis, Franca, & Oliverira, 2013)



รูปที่ 1.13 (A) รามานสเปคตรัมเมล็ดกาแฟอะราบิกา (B) รามานสเปคตรัมเมล็ดกาแฟโรบัสตา (C) ข้อมูลจากเทคนิค PCA ในการจำแนกชนิดของเมล็ดกาแฟ (El-Abassay, Donfack, & Materny, 2011)

El-Abassay *et.al.* (2011) ได้ศึกษาการจำแนกพันธุ์เมล็ดกาแฟอะราปิกา (Arabica) และโรบัสตา (Robusta) จากข้อมูลรามานสเปคโตรสโคปีร่วมกับการวิเคราะห์ด้วย PCA พบว่าจากข้อมูลรามานสเปคตรัมสามารถที่จะใช้จำแนกชนิดสายพันธ์ของกาแฟได้โดยช่วงข้อมูลสเปคตรัมระหว่าง 1000 – 1750 cm^{-1} เป็นช่วงข้อมูลสำคัญในการแยกชนิดสายพันธ์ ซึ่งเมล็ดกาแฟคนละสายพันธุ์จะมีสัดส่วนสาร chlorogenic acid ไมเท่ากัน ผลของการจำแนกสายพันธ์กาแฟด้วยรามานสเปกตรัมร่วมกับเคโมเมทริกซ์แสดงดังรูปที่ 1.13

ตัวอย่างข้างต้นเป็นแสดงให้เห็นว่าไม่ว่าจะเป็นการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเทคนิคใด ทั้งรามานสเปกโทรสโกปี ยูวีวิสซิเบิลสเปกโทรสโกปี หรืออินฟราเรดสเปกโทรสโกปีที่ไม่สามารถจำแนกชนิดสารตัวอย่างได้ด้วยการวิเคราะห์สเปกตรัมด้วยตาเปล่า แต่หากใช้เคโมเมทริกซ์ร่วมด้วยแล้วจะสามารถทำให้การจำแนกนั้นง่ายขึ้น และถูกต้องแม่นยำอีกด้วย ดังนั้นจากประสบการณ์วิจัยด้านอัญมณี สเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลของอัญมณี และเคโมเมทริกซ์ศาสตร์ ของคณะนักวิจัย คณะนักวิจัยจึงมีความเชื่อมั่นเป็นอย่างยิ่งว่าจะสามารถสามารถจำแนกชนิดอัญมณีได้เช่นเดียวกับการจำแนกผลิตภัณฑ์อาหารได้ดังงานวิจัยที่เกี่ยวข้องนี้ อีกทั้งโปรแกรมและฐานข้อมูลทางเคโมเทตริกซ์นี้จะสามารถมีส่วนช่วยอย่างมากในการจำแนกชนิดอัญมณีที่มีผลต่อการซื้อขายในตลาดอัญมณีและเชิงพาณิชย์

1.4 วัตถุประสงค์ของโครงการวิจัย

1. พิสูจน์เอกลักษณ์ของพลอยแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนโดยใช้วิธีเคโมเมทริกซ์ร่วมกับการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล
2. สามารถนำผลเคโมเมทริกซ์มาใช้จำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนเพื่อเป็นประโยชน์ได้

1.5 ขอบเขตของโครงการวิจัย

1. ตัวอย่างอัญมณีที่ใช้คือ แทนซาไนท์ (สีน้ำเงินอมม่วง) และซอยไซท์ (สีน้ำตาลอมเหลือง) จากประเทศแทนซาเนีย (นำซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองมาปรับปรุงคุณภาพด้วยการให้ความร้อนให้ได้สีน้ำเงิน และพิสูจน์เอกลักษณ์และหาความแตกต่างของซอยไซท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพและแทนซาไนท์)
2. ปรับปรุงคุณภาพแทนซาไนท์และซอยไซท์ด้วยความร้อนที่อุณหภูมิ 400-700 องศาเซลเซียสสภาวะออกซิเดชัน เพื่อศึกษาการเปลี่ยนสีของแทนซาไนท์และซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลือง
3. วิเคราะห์พลอยแทนซาไนท์และซอยไซท์ธรรมชาติที่ไม่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพและผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ ด้วยเครื่องมือวิเคราะห์คุณสมบัติทางกายภาพของอัญมณีและเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล
4. เทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลที่ใช้ในโครงการ ได้แก่ เทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Infrared spectroscopy) ฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี (Fluorescence spectroscopy) และยูวีวิสซิเบิลเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (UV-Visible near infrared spectroscopy)

5. ศึกษาวิจัยการใช้เคโมเมทริกซ์ในการวิเคราะห์ข้อมูลจากสเปกตรัมเชิงโมเลกุล
6. พัฒนากระบวนการเคโมเมทริกซ์ในการพิสูจน์เอกลักษณ์แทนซาไนท์ธรรมชาติและแทนซาไทน์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพ เพื่อประโยชน์ในการนำไปใช้เชิงวิชาการและเชิงพาณิชย์

1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

ด้านเศรษฐกิจ/พาณิชย์

ผลงานวิจัยจากโครงการวิจัยนี้จะได้ข้อมูลสเปกตรัมของแทนซาไนท์ที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล (อินฟราเรด ยูวีวิสิเบิลเนียร์ไออาร์ รามาน และฟลูออเรสเซนส์สเปกตรัม) และวิธีทางเคโมเมทริกซ์ในการประเมินชนิดแทนซาไนท์ ซึ่งใช้ประโยชน์เชิงพาณิชย์ในการจำแนกตัวอย่างแทนซาไนท์ธรรมชาติ และแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาเปลี่ยนสี ซึ่งสามารถนำไปใช้ร่วมกับการตรวจสอบในห้องปฏิบัติการอัญมณี เมื่อได้รับตัวอย่างมาวิเคราะห์จะสามารถจำแนกแทนซาไนท์และมีผลต่อการประเมินราคาในการตกลงซื้อขายอย่างมาก เพิ่มความน่าเชื่อถือในการซื้อขายอัญมณีในประเทศไทย ส่งเสริมการซื้อขายอย่างเป็นธรรม อีกทั้งเป็นต้นแบบของการวิเคราะห์ที่สามารถนำไปใช้กับอัญมณีชนิดอื่นๆ ได้ต่อไป

ด้านสังคมและชุมชน

คณะอัญมณีตั้งอยู่ในจังหวัดจันทบุรี จังหวัดแห่งอัญมณีของประเทศไทย ซึ่งล้อมรอบด้วยชุมชนที่ประกอบกิจการด้านอัญมณีและเครื่องประดับ และมีห้องปฏิบัติการตรวจวิเคราะห์อัญมณีตั้งอยู่ในชุมชน หากได้รับการสนับสนุนทุนวิจัย ผลงานวิจัยนี้สามารถนำมาใช้ในห้องปฏิบัติการอัญมณีเพื่อรองรับการตรวจวิเคราะห์ที่จำเป็นในการซื้อขายอัญมณีในชุมชนแห่งนี้ได้ เป็นประโยชน์แก่สังคมและชุมชนอัญมณี ทำให้เกิดความน่าเชื่อถือเชื่อมั่นในการเจรจาซื้อขายอย่างยิ่ง

การเผยแพร่ในวารสาร

โครงการวิจัยนี้จะให้องค์ความรู้ใหม่ของการวิเคราะห์แทนซาไนท์ธรรมชาติและที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยการให้ความร้อนหรือการเผาด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลทั้ง 4 ชนิด และองค์ความรู้ใหม่ในด้านวิธีในการจำแนกแทนซาไนท์ดังกล่าวด้วยเคโมเมทริกซ์ ซึ่งผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับแทนซาไนท์ยังมีไม่มากในระดับชาติและนานาชาติ อีกทั้งการจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาที่ให้ข้อมูลที่น่าเชื่อถือได้ยังไม่เคยมีผลการวิจัยออกมาก่อน ทำให้ผลงานวิจัยจะสามารถเผยแพร่ในวารสารวิชาการระดับชาติและนานาชาติได้ ทั้งวารสารทางด้านอัญมณี การประยุกต์ใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีในการวิเคราะห์อัญมณี และด้านเคโมเมทริกซ์

บทที่ 2
วิธีดำเนินการวิจัย

วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้เพื่อจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติ (หรือซอยไซท์สีม่วงอมน้ำเงิน) ออกจากแทนซาไนท์ที่มาจากการปรับปรุงคุณภาพโดยการเผามาจากซอยไซท์สีน้ำตาลหรือน้ำตาลอมเหลืองถึงเขียว ดังนั้นจึงต้องทำการซื้อตัวอย่างพลอยแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงถึงม่วงอมน้ำเงิน) และซอยไซท์น้ำตาลอมเหลืองมาทำการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ และศึกษาการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นกับสีและโครงสร้าง ด้วยเครื่องมือวิเคราะห์ทางกายภาพพื้นฐานสำหรับจำแนกอัญมณี และเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล เพื่อสามารถนำผลการทดลองมาเปรียบเทียบและศึกษาด้วยเคโมเมทริกส์ต่อไปได้ การดำเนินการวิจัย และผลวิเคราะห์จึงแบ่งเป็นหัวข้อหลักๆ ดังนี้

1. การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์สีน้ำตาลด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ เพื่อให้ได้เป็นซอยไซท์สีน้ำเงิน (หรือแทนซาไนท์) และการวิเคราะห์ผลด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล
2. การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์สีน้ำเงินธรรมชาติ หรือแทนซาไนท์ธรรมชาติด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ เพื่อศึกษาการเปลี่ยนสีในกรณีที่แทนซาไนท์ธรรมชาติได้ผ่านการเผามา และการวิเคราะห์ผลด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล
3. การจำแนกซอยไซท์และแทนซาไนท์ด้วยเทคนิคเคโมเมทริกซ์

2.1 วัสดุและอุปกรณ์

1. ซอยไซต์สีน้ำตาลจากประเทศแทนซาเนีย แสดงดังรูปที่ 2.1 จัดซื้อจากผู้ขายในตลาดอัญมณี จังหวัดจันทบุรี

2. พลอยแทนซาไนท์สีม่วงธรรมชาติจากประเทศแทนซาเนีย แสดงดังรูปที่ 2.2 จัดซื้อจากผู้ขายในตลาดอัญมณี จังหวัดจันทบุรี

3. เตาไฟฟ้าสำหรับเผาพลอย และเบ้าเผาพลอยอลูมินา

รูปที่ 2.1 ซอยไซต์สีเขียวอมน้ำตาลจากประเทศแทนซาเนีย

รูปที่ 2.2 พลอยแทนซาไนท์สีม่วงธรรมชาติจากประเทศแทนซาเนีย

2.2 เครื่องมือที่ใช้ในการวิเคราะห์

1. เครื่องชั่งน้ำหนักหาค่าความถ่วงจำเพาะ (Hydrostatic Weighting Balance ยี่ห้อ Mettler Toledo)

2. เครื่องวัดค่าดัชนีหักเห (Refractometer ยี่ห้อ Gem Refractometer รุ่น FGR-003) ใช้หาค่าการหักเหของแสงในพลอย บอกถึงคุณสมบัติทางแสงเฉพาะตัวของอัญมณี

3. ยูวี-วิสิเบิล สเปกโทรโฟโตมิเตอร์ (UV-Visible NIR Spectrophotometer) ยี่ห้อ HITACHI รุ่น U-4100 UV-Visible NIR Spectrophotometer สำหรับวิเคราะห์ความแตกต่างของสีในตัวอย่างซอยไซต์ และความแตกต่างของเสปกตรัมการดูดกลืนแสงก่อนการปรับปรุงคุณภาพ และหลังการปรับปรุงคุณภาพ

4. อินฟราเรดสเปกโทรมิเตอร์ (Infrared spectrometer) สำหรับการเปลี่ยนแปลงพันธะของพลอยแทนซาไนท์และซอยไซต์ก่อนการปรับปรุงคุณภาพ และหลังการปรับปรุงคุณภาพ

5. เทคนิคราม่านสเปกโทรมิเตอร์ (Raman spectroscopic technique) โดยใช้เครื่อง Raman Microscope สำหรับการเปลี่ยนแปลงพันธะของพลอยแทนซาไนท์และซอยไซต์ก่อนการปรับปรุงคุณภาพ และหลังการปรับปรุงคุณภาพ

6. Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF) ยี่ห้อ ORBIS เพื่อใช้วิเคราะห์ธาตุในตัวอย่างซอยไซต์

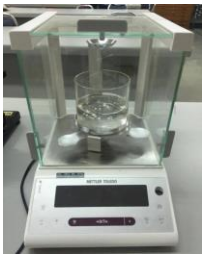
7. Fluorescence spectrometer สำหรับวัดการเกิดฟลูออเรสเซนต์ของธาตุองค์ประกอบในแทนซาไนท์

2.3 วิธีดำเนินการทดลอง

2.3.1 การเตรียมตัวอย่าง

นำพลอยก้อนตัวอย่างซอยไซต์และแทนซาไนท์ มาเจียระไนหน้าเรียบ 2 ด้านขนานกัน ความหนาประมาณ 1 มิลลิเมตร และทำการแบ่งกลุ่มตัวอย่างเพื่อทำการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ

2.3.2 การตรวจสอบด้วยเครื่องมือวิเคราะห์อัญมณีพื้นฐาน เพื่อบ่งบอกคุณสมบัติทางกายภาพได้แก่ เครื่องชั่งน้ำหนัก (Hydrostatic Weighting Balance ยี่ห้อ Mettler Toledo) เพื่อหาค่าความถ่วงจำเพาะ เครื่องวัดค่าดัชนีหักเห (Refractometer ยี่ห้อ Gem Refractometer รุ่น FGR-003) ใช้หาค่าการหักเหของแสงในพลอยซึ่งเป็นคุณสมบัติทางแสงเฉพาะตัวของอัญมณีแต่ละชนิด ไดโครสโคป (Dichroscope) สำหรับหาสีแฝด และ โพลาริสโคป (Polariscope) สำหรับ หาคุณสมบัติทางแสงว่าผลึกเป็นหักเหแสงเดี่ยว (Single refraction) หรือคู่ (Double Refraction)



Hydrostatic Weighting Balance

Refractometer

Polariscope

Dichroscope

รูปที่ 2.3 เครื่องมือวิเคราะห์อัญมณีพื้นฐานเพื่อบ่งบอกคุณสมบัติทางกายภาพ

2.3.3 การตรวจสอบด้วยเครื่องมือขั้นสูง

1. UV-Vis NIR spectrophotometer

- โหมดวัดธาตุ ตั้งค่าดังนี้

Measurement Type : Wavelength Scan
Data Mode : Absorbance
Start Wavelength : 1800.00 nm.
End Wavelength : 300.00 nm.
Scan Speed : 300 nm/min.

- โหมดวัดสี ตั้งค่าดังนี้

Measurement Type : Color
Program : CIE L* a* b*
Start Wavelength : 800.00 nm.
End Wavelength : 300.00 nm.
Scan Speed : 300 nm/min.

2. iM 10 Infrared Microscope

Collection Mode : Transmission

Collection time : 25 sec / 64 Scans

Spectral resolution : 4

Spectra format : Absorbance

3. Alpha Bruker Infrared spectrometer โดยใช้เทคนิคส่องผ่าน ด้วยการเตรียมตัวอย่างแบบ KBr pellet และเทคนิคสะท้อน คือ เทคนิคดิฟฟิวรีเฟลกแตนซ์ (diffuse reflectance infrared Fourier transform, DRIFT) ด้วยอุปกรณ์เสริม (accessory) โดยโหมดการวัดของทั้งสองเทคนิคตั้งค่าดังนี้

Collection Mode : Transmission

Collection time : 64 Scans

Spectral resolution : 4 cm^{-1}

Spectra format : เทคนิคส่องผ่านโดย KBr pell ใช้หน่วย Absorbance

เทคนิค DRIFT ใช้หน่อย Kubelka Munk

4. Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF) ยี่ห้อ ORBIS ใช้ขนาดลำแสง 1 mm
5. Fluorescence spectrometer ยี่ห้อ Agilent Cary Eclipse Fluorescence Spectrophotometer ใช้ตัววัดสัญญาณ photomultiplier tube 600 V of และแหล่งกำเนิดแสง xenon flash lamp เป็น excitation source และวัด emission spectra ในช่วงความยาวคลื่น 300 to 800 nm โดยใช้ 250 และ 320 nm เป็น excitation wavelength
6. Raman Microscope ยี่ห้อ Thermo Fisher DXR Raman microscope กำลังขยาย confocal microscope 20X ความยาวคลื่น เลเซอร์ 785 nm กำลัง 10mW วิเคราะห์ในช่วง 100–3500 cm^{-1} จำนวนสแกน 64

EDXRF

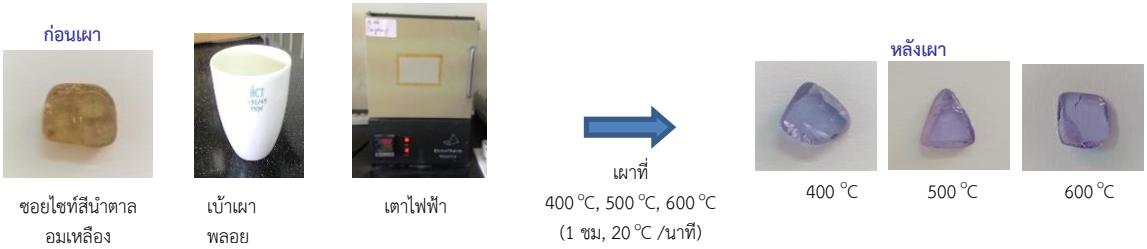
FITR spectrometer

UV-Vis NIR spectrophotometer

รูปที่ 2.4 เครื่องมือขั้นสูงในการวิเคราะห์คุณสมบัติทางเคมีของอัญมณี

2.3.4 การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์และแทนซาไนท์ด้วยความร้อน

การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์และแทนซาไนท์ด้วยความร้อนจะทำภายใต้สภาวะ Oxidation โดยการเผาด้วยเตาไฟฟ้า ตั้งแต่อุณหภูมิ 400-700°C โดยการนำพลอยใส่ในเบ้าอลูมินา แล้วนำเข้าเตาไฟฟ้า ตั้งอุณหภูมิที่ศึกษา ใช้อัตราเร่ง 20 C° / นาที เวลายืนไฟ 1 ชม. จากนั้นรอให้เตาเย็นแล้วจึงนำพลอยออกจากเตา แล้วนำไปวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือต่างๆ ตัวอย่างการเผาพลอยแสดงดังรูปที่ 2.5 ชื่อของตัวอย่างซอยไซท์จะใช้สัญลักษณ์ Z และตัวอย่างแทนซาไนท์จะใช้สัญลักษณ์ T แล้วตามด้วยอุณหภูมิในการเผา



รูปที่ 2.5 ตัวอย่างกระบวนการเผาพลอยและผลการเปลี่ยนสีจากการเผา

2.3.5 การวิเคราะห์ตัวอย่างหลังผ่านการเผา

1. นำตัวอย่างที่ผ่านการเผามาตรวจสอบด้วยเครื่องมือขั้นสูงแล้วบันทึกผล โดยเครื่องมือขั้นสูงได้แก่ UV-Vis NIR spectrophotometer, Infrared spectrophotometer, Fluorescence spectrometer และ Raman spectrometer โดยใช้สภาวะการทดลองเดียวกันกับสภาวะก่อนปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

2. นำข้อมูลก่อนการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน หลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนมาวิเคราะห์ และอภิปรายผลการทดลอง

3. สรุปผลการทดลองที่เกี่ยวข้องกับการจำแนกผลด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลแต่ละชนิด

4. นำข้อมูลการจำแนกแทนซาไนท์และซอยไซท์ทั้งก่อนการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน หลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนมาวิเคราะห์ด้วย Chemmometric

5. นำค่าข้อมูลที่จำแนกด้วย Chemmometric ได้นั้น มาอภิปรายผลการทดลองว่าเกิดจากสาเหตุการเปลี่ยนแปลงทางเคมีใดโดยเชื่อมโยงกับตำแหน่งพีคที่ได้จากเทคนิคสเปกโทรสโกปี

บทที่ 3
ผลการวิจัยและอภิปรายผล

วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้เพื่อจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติ (หรือซอยไซท์ม่วงอมสีน้ำเงิน) ออกจากแทนซาไนท์ที่มาจากการปรับปรุงคุณภาพโดยการเผามาจากซอยไซท์สีน้ำตาลหรือน้ำตาลอมเหลืองถึงเขียว ดังนั้นจึงต้องทำการซื้อตัวอย่างพลอยแทนซาไนท์ทั้งจากธรรมชาติและซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองมาทำการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน และศึกษาการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นกับสีและโครงสร้าง เพื่อสามารถนำผลการทดลองมาเปรียบเทียบและศึกษาด้วยเคโมเมทริกส์ต่อไปได้ ผลการวิเคราะห์จึงแบ่งเป็นหัวข้อหลักๆ ดังนี้

1. การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์สีน้ำตาลด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ เพื่อให้ได้เป็นซอยไซท์สีน้ำเงิน (หรือแทนซาไนท์) และการวิเคราะห์ผลด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล
2. การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์สีน้ำเงินธรรมชาติ หรือแทนซาไนท์ธรรมชาติด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ เพื่อศึกษาการเปลี่ยนสีในกรณีที่แทนซาไนท์ธรรมชาติได้ผ่านการเผามาและการวิเคราะห์ผลด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล
3. การจำแนกซอยไซท์และแทนซาไนท์ด้วยเทคนิคเคโมเมทริกซ์

3.1 ผลการปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์ด้วยความร้อนและการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

3.1.1 ผลการเผาและการวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเครื่องมือพื้นฐาน

รูปที่ 3.1 แสดงการเปรียบเทียบตัวอย่างพลอยซอยไซท์ก่อนและหลังเผาเทียบกับพลอยแทนซาไนท์ธรรมชาติที่ไม่ได้ผ่านการเผา แสดงให้เห็นว่าการเผาภายใต้สภาวะออกซิเดชั่นทำให้สามารถเปลี่ยนสีพลอยซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองเป็นสีม่วงอมน้ำเงินคล้ายสีแทนซาไนท์ธรรมชาติดังแสดงในรูป ซึ่งการใช้อุณหภูมิต่างกันจะทำให้ได้สีต่างกันเล็กน้อยซึ่งผลการตรวจวัดค่าสีแสดงในหัวข้อถัดไป สำหรับผลการวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือพื้นฐานแสดงดังตารางที่ 3.1

รูปที่ 3.1 ตัวอย่างพลอยซอยไซท์ก่อนและหลังเผาเทียบกับพลอยแทนซาไนท์ธรรมชาติที่ไม่ได้ผ่านการเผา

ตารางที่ 3.1 ค่าดัชนีหักเห (R.I.) และค่าความถ่วงจำเพาะ (S.G.) ของซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

ก่อนการเผา				หลังการเผา		
ตัวอย่างพลอยซอยไซท์ก่อนเผา	**R.I.**	**S.G.**	**สีแฝด**	**RI หลัง**	**SG หลัง**	**สีแฝด**
Z1-400	1.690-1.700	3.36	Trichoic	1.690-1.700	3.36	Dichroic
Z2-400	1.690-1.700	3.32	Trichoic	1.690-1.700	3.32	Trichoic
Z3-400	1.695-1.710	3.34	Trichoic	1.695-1.710	3.34	Dichroic
Z4-400	1.695-1.710	3.34	Trichoic	1.695-1.710	3.34	Dichroic
Z5-400	1.695-1.710	3.35	Trichoic	1.695-1.710	3.34	Trichoic
Z6-500	1.690-1.710	3.36	Trichoic	1.690-1.710	3.36	Dichroic
Z7-500	1.695-1.710	3.33	Trichoic	1.695-1.710	3.33	Dichroic
Z8-500	1.695-1.710	3.34	Trichoic	1.695-1.710	3.34	Dichroic
Z9-500	1.695-1.710	3.34	Trichoic	1.695-1.710	3.34	Trichoic
Z10-500	1.695-1.710	3.34	Trichoic	1.695-1.710	3.34	Trichoic
Z11-600	1.695-1.710	3.31	Trichoic	1.695-1.710	3.31	Dichroic
Z12-600	1.695-1.710	3.35	Trichoic	1.695-1.710	3.35	Trichoic
Z13-600	1.690-1.700	3.28	Trichoic	1.690-1.700	3.28	Dichroic
Z14-600	1.695-1.710	3.45	Trichoic	1.695-1.710	3.45	Dichroic
Z15-600	1.695-1.710	3.34	Trichoic	1.695-1.710	3.34	Dichroic

ตารางที่ 3.1 แสดงสีของซอยไซท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ ผลที่ได้คือ ซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองเปลี่ยนเป็นสีม่วงอมน้ำเงิน ถึงน้ำเงินอมม่วง ดังรูป และผลการวิเคราะห์ข้อมูลทางกายภาพได้แก่ ค่าดัชนีหักเหของแสง และค่าความถ่วงจำเพาะ มีค่าไม่เปลี่ยนแปลง ส่วนค่าสีแฝด มีการเปลี่ยนแปลงเฉพาะบางตัวอย่างเท่านั้น ดังนั้น ผลการวิเคราะห์คุณสมบัติทางกายภาพด้วยเครื่องมือวิเคราะห์อัญมณีพื้นฐานเหล่านี้ไม่สามารถนำมาจำแนกซอยไซท์สีน้ำตาลธรรมชาติและซอยไซท์สีน้ำเงินอมม่วงและม่วงอมน้ำเงินที่มาจากการเผาได้

3.1.2 การวิเคราะห์ด้วย Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF)

การวิเคราะห์ธาตุองค์ประกอบในตัวอย่างซอยไซต์สีน้ำตาลอมเหลืองด้วย EDXRF พบว่าธาตุประกอบหลักในรูปออกไซด์ของซอยไซต์คือ Al_2O_3 , SiO_2 และ CaO โดยค่าเฉลี่ยของออกไซด์แต่ละกลุ่มตัวอย่าง แสดงดังตารางที่ 3.2 และมีค่าเฉลี่ยโดยรวมของตัวอย่างทั้งหมดโดยประมาณคือ Al_2O_3 26.681 ± 0.760 Wt% ค่าเฉลี่ยของ SiO_2 35.095 ± 0.549 Wt% และค่าเฉลี่ยของ CaO 35.866 ± 1.018 Wt% นอกจากนี้ยังพบธาตุมลทินปริมาณน้อยคือ V_2O_5 ประมาณ 0.238 ± 0.031 Wt% และ TiO_2 ประมาณ 1.746 ± 0.102 Wt% ซึ่งเป็นธาตุให้สีในซอยไซท์ นอกจากนี้ยังพบธาตุอื่นๆ อีกดังตาราง

ตารางที่ 3.2 ผลการวิเคราะห์ซอยไซท์ด้วย Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF)

Oxide	wt%	SD
Al_2O_3	26.681	0.760
SiO_2	35.095	0.549
CaO	35.866	1.018
TiO_2	1.746	0.102
V_2O_5	0.238	0.031
Nd_2O_3	0.081	1.381
Cr_2O_3	0.029	0.023
Eu_2O_3	0.122	0.388
Fe_2O_3	0.133	0.997
Ga_2O_3	0.043	1.717
SrO	0.385	0.306

3.1.3 ผลการเปลี่ยนสีของซอยไซต์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

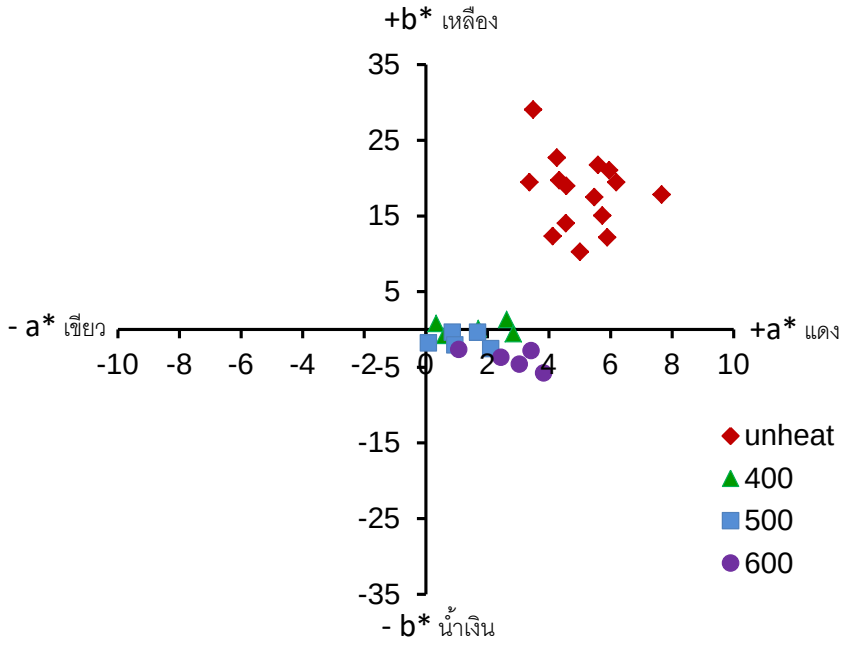
ก่อนการนำซอยไซท์ไปปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนหรือการเผา ได้ทำการวัดค่าสีตัวอย่างซอยไซท์ด้วยเครื่องยูวีวิสซิเบิลสเปกโทรมิเตอร์ โหมดการวัดสี (Color measurement) ภายหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ ซอยไซท์เปลี่ยนจากสีเดิมคือสีน้ำตาลอมเหลือง เป็นสีม่วงอมน้ำเงินถึงน้ำเงินอมม่วง โดยการเปลี่ยนสีที่อุณหภูมิต่างๆ แตกต่างกัน เมื่อนำซอยไซท์หลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400, 500 และ 600 องศาเซลเซียส มาวัดสีโดยวิธีเดียวกัน ได้ผลการวัดเป็นค่า L,* a* และ b* ดังตารางที่ 3.3

ตารางที่ 3.3 ค่า L*, a*, b* และค่า ΔE ของซอยไซต์

ชื่อตัวอย่าง (กลุ่มที่-เม็ดที่)	เผาที่อุณหภูมิ	ค่าสีก่อนเผาของซอยไซท์ (Unheated Zoisite)			ค่าสีหลังเผาของซอยไซท์ (Heated Zoisite)			ΔE
		L*	a*	b*	L*	a*	b*	
Z1-400	400°C	54.6506	3.3725	19.4724	41.7653	2.6318	1.3103	22.28
Z2-400		35.9121	2.0109	10.2481	54.0362	0.3409	0.79	20.51
Z3-400		37.3038	5.4808	27.4871	43.9486	2.8502	-0.5479	28.93
Z4-400		49.8166	4.5525	34.0431	52.5294	0.618	-0.7883	35.16
Z5-400		49.8545	5.6003	4.7455	49.6987	1.7116	0.1093	6.05
Z6-500	500°C	57.1469	3.4947	29.0479	53.5139	0.8705	-0.3644	29.75
Z7-500		48.2909	1.5675	8.9589	45.1885	0.0952	-1.8035	11.30
Z8-500		43.8477	1.2596	2.6971	40.5254	0.9564	-2.0541	5.81
Z9-500		64.0339	5.9602	31.0472	68.4945	2.1193	-2.5444	34.10
Z10-500		59.7075	6.1927	39.4532	56.6181	1.6895	-0.3828	40.21
Z11-600	600°C	41.4841	4.1283	12.3275	69.0395	1.0787	-2.6641	31.52
Z12-600		70.4421	5.9002	12.1807	73.377	3.4259	-2.8026	15.47
Z13-600		63.4928	4.342	19.7158	81.1069	3.8372	-5.7628	30.98
Z14-600		51.1411	7.6653	17.8387	63.7641	2.4504	-3.6978	25.50
Z15-600		47.698	5.7375	15.047	59.6706	3.047	-4.6141	23.18

หมายเหตุ ค่าที่ได้เป็นค่าเฉลี่ยที่นำมาจากการวัดตัวอย่างละ 3 ตำแหน่ง

นำค่าที่ได้ในแต่ละกลุ่มของการเผาที่อุณหภูมิต่างกันมาทำการพลอตกราฟเพื่อเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงของสีและความสว่างในแต่ละกลุ่มตัวอย่าง กราฟเปรียบเทียบค่า a*b* ที่เกิดจากการเผาที่อุณหภูมิต่างๆ ได้ผลดังรูปที่ 3.2



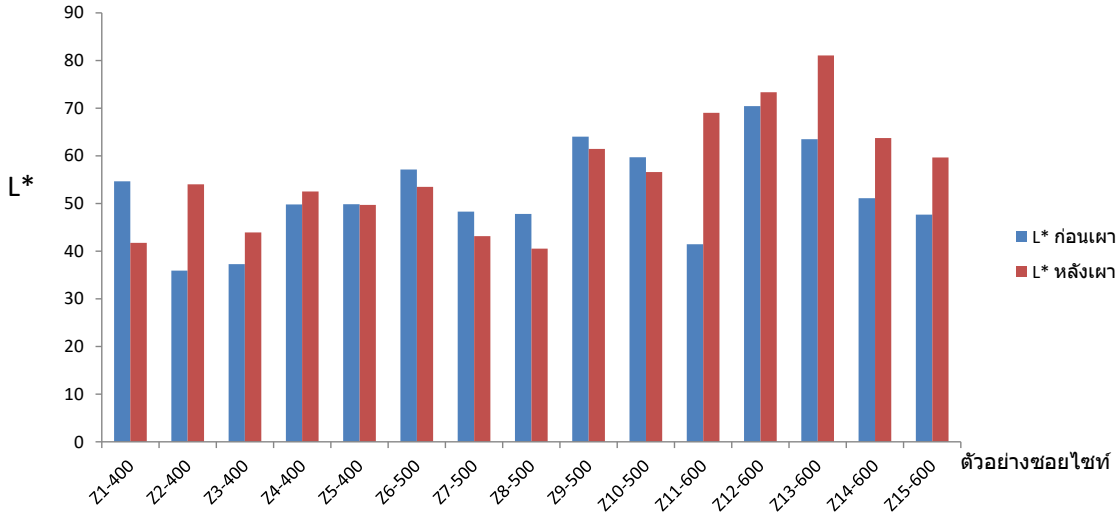
รูปที่ 3.2 กราฟแสดงค่า a* และ b* ของซอยไซต์ก่อนและหลังการเผาที่ 400 – 600 องศาเซลเซียส

รูปที่ 3.2 แสดงผลการเปลี่ยนสีของซอยไซท์กลุ่มตัวอย่างก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน พบว่าสีของตัวอย่างซอยไซท์ก่อนการเผา ตัวอย่างซอยไซท์มีค่า a* เป็นบวกแสดงถึงสีแดง และมีค่า b* เป็นบวก แสดงถึงสีเหลือง ตรงกับสีของตัวอย่างที่มีสีออกน้ำตาลอมเหลือง ภายหลังการเผาที่ 400 องศาเซลเซียส พบว่าค่า a* และ b* มีการเปลี่ยนแปลงทุกเม็ด โดยค่า a* มีการเปลี่ยนแปลงไปในทิศทางลดลงทุกเม็ด แสดงความเป็นสีแดงที่ลดลง ส่วนค่า b* มีการเปลี่ยนแปลงไปไปในทิศทางค่าที่ลดลงเช่นกัน แสดงถึงการมีสีเหลืองลดลงและมีความเป็นสีน้ำเงินเพิ่มขึ้น

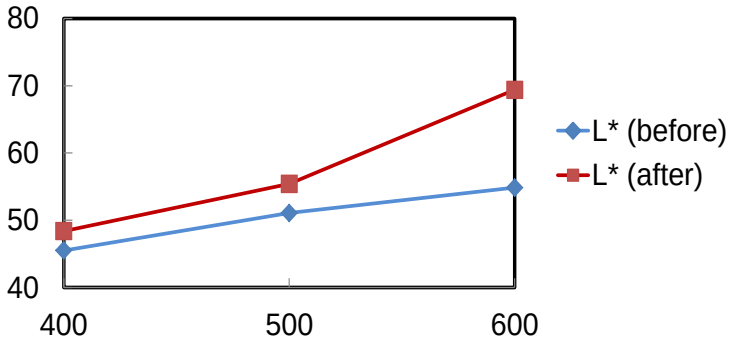
ซอยไซท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 และ 600 องศาเซลเซียส พบว่าผลการทดลองมีผลไปในทิศทางเดียวกับการเปลี่ยนแปลงของกลุ่ม Z1 ที่ผ่านการเผาที่ 400 องศาเซลเซียส คือตัวอย่างซอยไซท์ทุกเม็ดมีการเปลี่ยนแปลงค่า a* ไปในทางที่ค่าลดลงทุกเม็ด ซึ่งแสดงความเป็นสีแดงที่ลดลง ค่า b* มีการเปลี่ยนแปลงไปในทางลบทุกเม็ด แสดงถึงความเป็นสีน้ำเงินเพิ่มขึ้น แสดงให้เห็นว่าภายหลังการเผาซอยไซท์จะทำให้สีน้ำตาลอมเหลืองเปลี่ยนไปในทิศทางสีน้ำเงินเพิ่มขึ้น แต่ละอุณหภูมิสามารถเปรียบเทียบค่าการเปลี่ยนแปลงสีของทุกตัวแปรสี (L*a*b*) ได้จากค่า ΔE ซึ่งจะแสดงต่อไป

สำหรับการเปลี่ยนแปลงค่าความสว่างที่อาจเกิดการเปลี่ยนแปลงหลังการเผา ได้ทำการแสดงค่า L* ก่อนและหลังการเผาที่ทุกอุณหภูมิไว้ดังรูปที่ 3.3 ซึ่งเปรียบเทียบค่า L* ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนทุกๆ อุณหภูมินั้น ตัวอย่างบางเม็ดมีความสว่างเพิ่มขึ้นในขณะที่บางเม็ดมีความสว่างลดลงเหมือนกันในทุกอุณหภูมิ อาจเกิดเนื่องจากตำหนิภายในพลอยแต่ละเม็ดที่ต่างกัน ผลของตำหนิภายในพลอยนั้นทำให้เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นจะทำให้มีความสว่างลดลง ในขณะที่ถ้าตำหนิหรือบริเวณที่ไม่มีตำหนิ เมื่อเผาแล้วค่าความสว่างจะเพิ่มขึ้น เมื่อเปรียบเทียบค่าเฉลี่ยการ

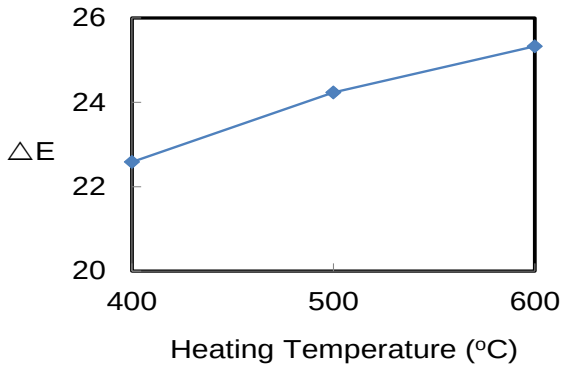
เปลี่ยนแปลง L* ทั้งหมดของทุกอุณหภูมิจะแสดงดังรูปที่ 3.4 จากรูป 3.4 จะเห็นว่าเมื่อเผาทุกอุณหภูมิค่าความสว่างโดยเฉลี่ยเพิ่มขึ้น ดังนั้นเพื่อเปรียบเทียบความแตกต่างของสีที่เกิดขึ้นทั้งหมดคือต้องทำการวิเคราะห์ด้วยค่า ΔE ซึ่งคือค่า color difference หรือความต่างของสีทั้งหมด หาได้จาก $\Delta E = (\Delta L^{*2} + \Delta a^{*2} + \Delta b^{*2})^{1/2}$ ผลการวิเคราะห์ค่า ΔE ของทุกอุณหภูมิแสดงดังรูปที่ 4.5 จากค่า ΔE ในตารางที่ 4.2 นำมาหาค่าเฉลี่ยเป็น 3 จุด ที่อุณหภูมิ 400 , 500 และ 600 องศาเซลเซียส ดังแสดงในรูปที่ 4.6 พบว่า ค่า ΔE ที่อุณหภูมิ 600 องศาเซลเซียสมีค่าน้อยสุด แสดงว่ามีการเปลี่ยนแปลงสีของซอยไซต์น้อยสุด ΔE ที่อุณหภูมิ 500 องศาเซลเซียสมีค่ามากสุด แสดงว่ามีการเปลี่ยนแปลงสีของซอยไซต์มากสุด ส่วนที่อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส มีค่ามากกว่าที่ 600 องศาเซลเซียส แต่ยังน้อยที่ 500 องศาเซลเซียส



รูปที่ 3.3 กราฟเปรียบเทียบค่าความสว่าง (Lightness) ของซอยไซต์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (Z1-Z5) 500 องศาเซลเซียส (Z6-Z10) และ 600 องศาเซลเซียส (Z7-Z15)



รูปที่ 3.4 กราฟเปรียบเทียบ △L* ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ



รูปที่ 3.5 ค่าความแตกต่างสี ΔE ของซอยไซต์หลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ

3.1.4 ยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซต์ ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

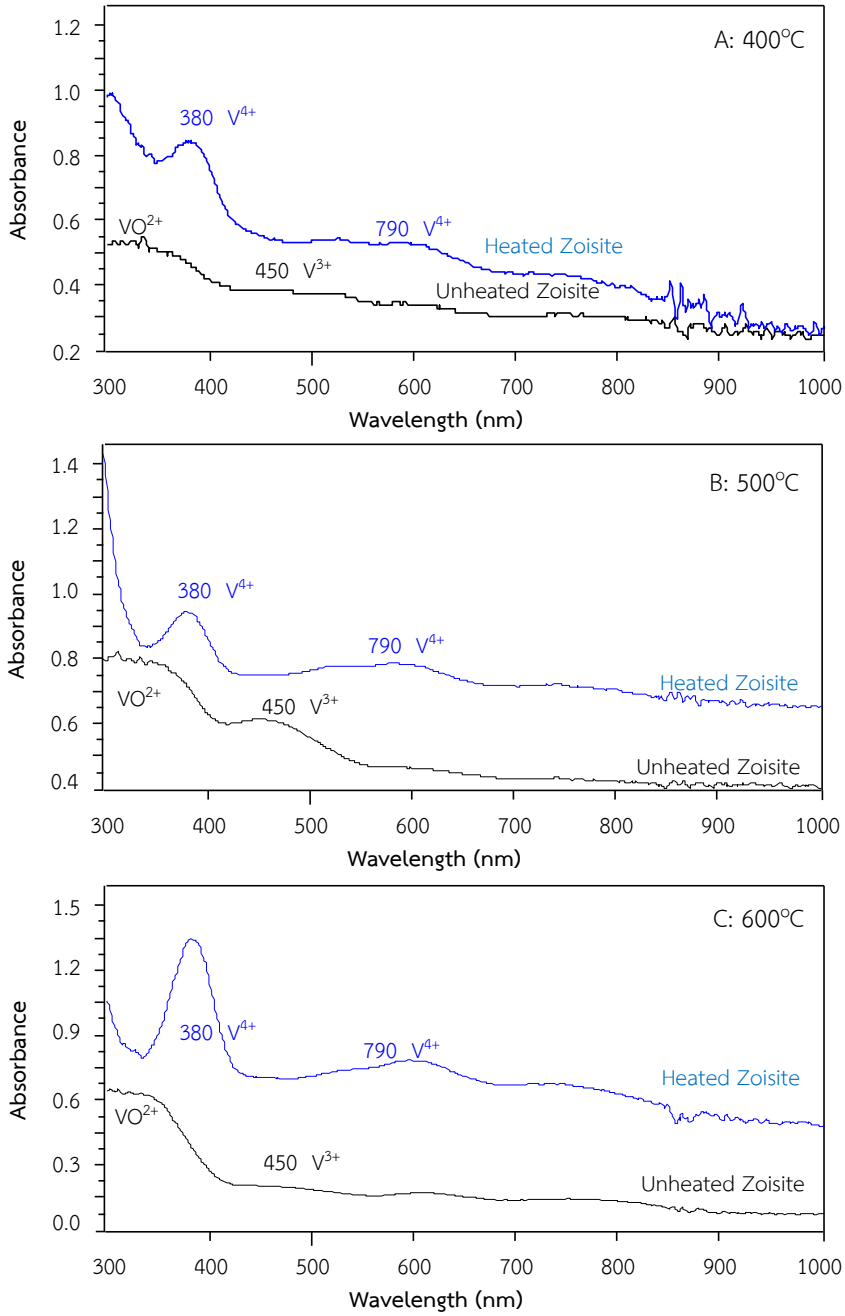
รูปที่ 3.6 แสดงการเปลี่ยนแปลงของยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิ 400 – 600 องศาเซลเซียส

การเปลี่ยนแปลงยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซต์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส ดังแสดงในรูปที่ 3.6A พบว่าทุกตัวอย่างในกลุ่มมีแนวโน้มไปทางเดียวกัน คือ ก่อนการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซท์จะแสดงแถบการดูดกลืนสูงสุด (λmax) ที่ตำแหน่งประมาณ 300 นาโนเมตร มีแถบการดูดกลืนกว้างไปถึง 400 นาโนเมตร ซึ่งสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสงของ VO^{2+} ซึ่งสัมพันธ์กับสีเหลืองของซอยไซท์ และพบการดูดกลืนที่ตำแหน่ง 450 นาโนเมตร ซึ่งสัมพันธ์กับ V^{3+} (Faye and Nickel, 1971) ที่ส่งผลต่อสีเขียว

หลังการปรับปรุงคุณภาพพบแถบการดูดกลืนสูงสุดที่ประมาณ 380 นาโนเมตร ชัดเจนขึ้น ซึ่งตำแหน่งนี้จะสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสดงของ V^{4+} (Burns, 1993) ซึ่ง V^{4+} เป็นธาตุให้สีที่สัมพันธ์กับการเกิดสีน้ำเงินในซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์ โดยพบว่าตำแหน่งนี้มีค่าดูดกลืนแสงเพิ่มขึ้นตรงกับการเปลี่ยนแปลงสีของซอยไซท์จากสีน้ำตาลอมเหลืองเป็นสีน้ำเงิน อีกตำแหน่งที่มีการเปลี่ยนแปลง คือที่ 450 นาโนเมตร สังเกตได้ว่าหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนแถบการดูดกลืนตำแหน่งนี้ลดลง ซึ่งที่ตำแหน่ง 450 นาโนเมตร คือการดูดกลืนแสงของ V^{3+} ที่สัมพันธ์กับสีเขียว แสดงให้เห็นว่าเมื่อทำการปรับปรุงคุณภาพโดยการเผาจะส่งผลให้การดูดกลืนของ VO^{2+} และ V^{3+} ลดลง ในขณะที่ V^{4+} เพิ่มขึ้น ส่งผลให้สีน้ำตาลอมเหลืองของซอยไซท์เปลี่ยนเป็นซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์หลังผ่านการเผานั่นเอง

การเปลี่ยนแปลงยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซต์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 และ 600 องศาเซลเซียส พบว่ามีแนวโน้มไปทางเดียวกันกับการเปลี่ยนแปลงหลังการเผาของอุณหภูมิ 400 องศาสเซลเซียส คือ ก่อนการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนจะแสดงขอบการดูดกลืนที่ประมาณ 300 นาโนเมตร มีแถบการดูดกลืนกว้างไปถึง 400 นาโนเมตร หลังการปรับปรุงคุณภาพพบแถบการดูดกลืนสูงสุดที่ประมาณ 380 นาโนเมตร ชัดเจนขึ้น ซึ่งเป็นผลมาจาก V^{4+} เพิ่มขึ้น ตำแหน่งที่สองที่มีการเปลี่ยนแปลงคือ แถบการดูดกลืนที่ 450 นาโนเมตร ซึ่งแสดงแถบการ

ดูดกลืนของ V^{3+} หลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนแถบการดูดกลืนตรงตำแหน่งนี้จะลดลง เป็นผลมาจาก V^{3+} ลดลง ดังแสดงในรูปที่ 3.6B และ 3.6C



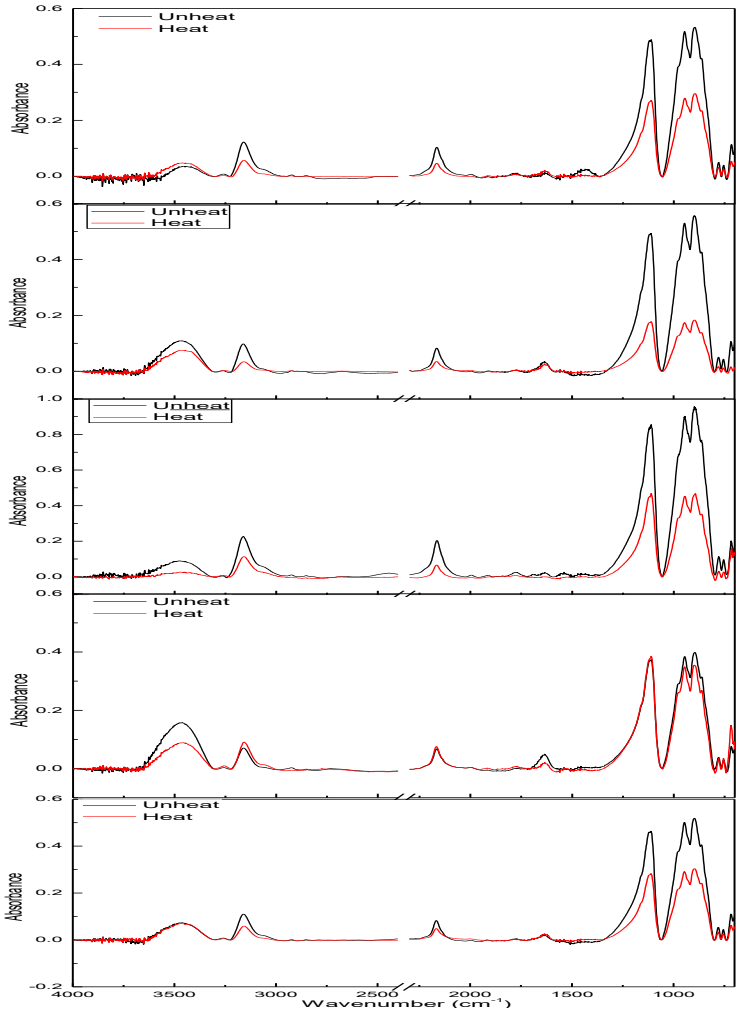
รูปที่ 3.6 ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรา (UV-vis NIR spectra) เปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของซอยไซต์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าเมื่อซอยไซท์ผ่านการเผาด้วยอุณหภูมิ 400-600 องศาเซลเซียส นั้น จะทำให้สีน้ำตาลอมเหลืองเปลี่ยนเป็นสีม่วงอมน้ำเงิน ซึ่งสัมพันธ์กับการเกิดการดูดกลืนแสงหลังการเผาที่พบว่ามีการดูดกลืนของ VO^{2+} และ V^{3+} ลดลง ในขณะการดูดกลืนแสงของ V^{4+} เพิ่มขึ้น ซึ่งเป็นผลให้เห็นสีม่วงน้ำเงิน

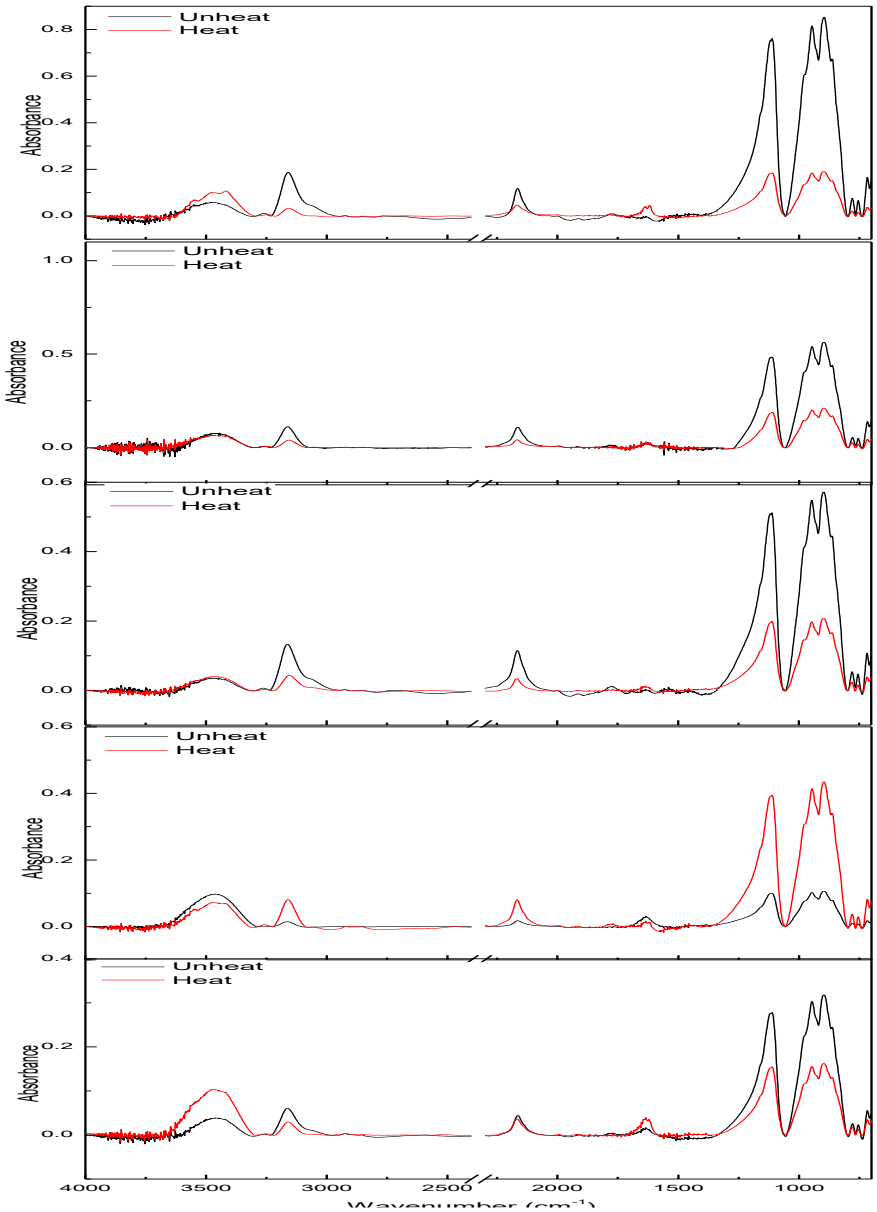
3.1.5 การวิเคราะห์ด้วยเทคนิค Fourier Transform Infrared Spectroscopy

3.1.5.1 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค KBr Pellet

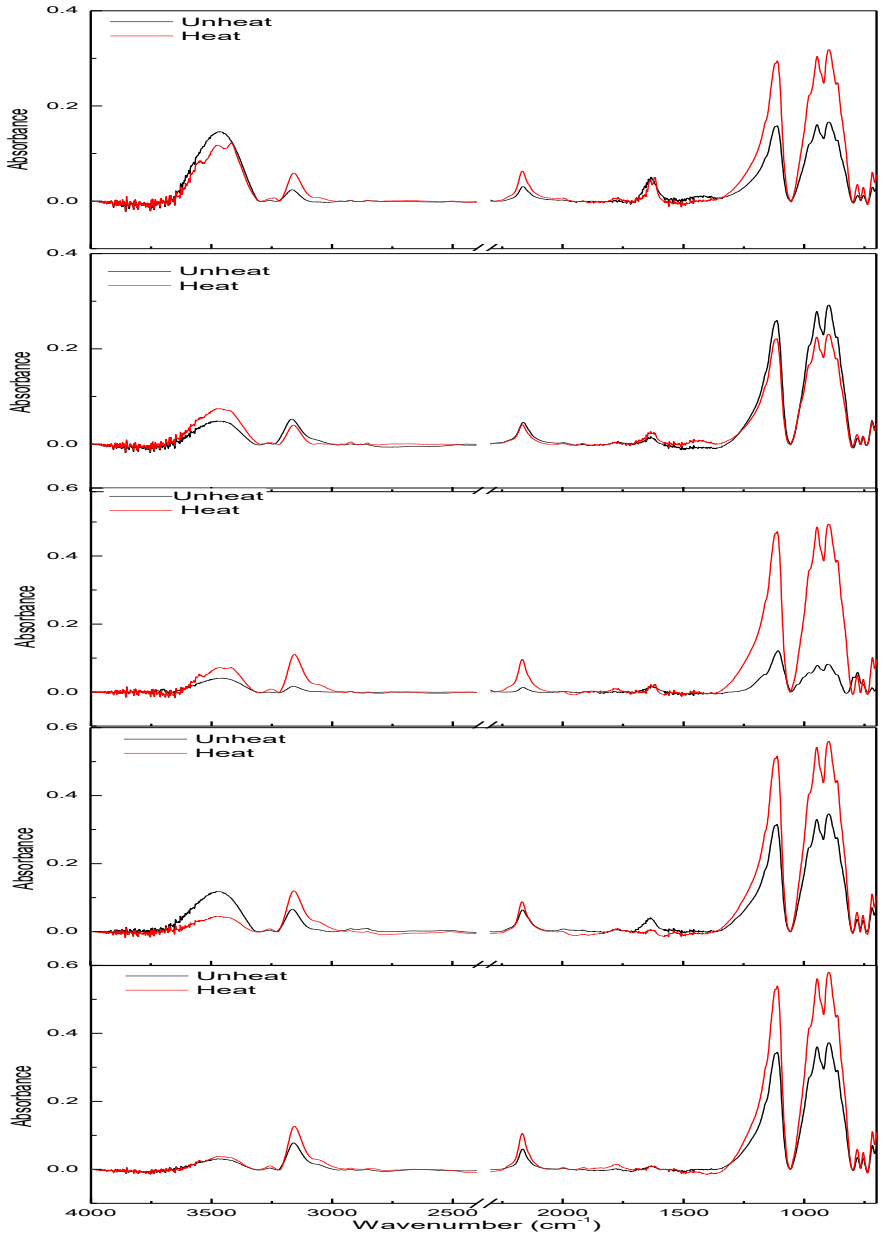
การวิเคราะห์ซอยไซท์ด้วยเทคนิคส่องผ่าน โดยการเตรียมตัวอย่างเทคนิค KBr pellet ได้ผลของ อินฟาเรดสเปกตรัมซึ่งแสดงโครงสร้างของซอยไซต์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพ ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600 องศาเซลเซียส แสดงในรูปที่ 3.7, 3.8 และ 3.9



รูปที่ 3.7 อินฟาเรดสเปกตราเปรียบเทียบซอยไซต์ Z1-Z5 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีดำ, หลังเผา : เส้นสีแดง)



รูปที่ 3.8 อินฟาเรดสเปกตราเปรียบเทียบซอยไซต์ Z6-Z10 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีดำ, หลังเผา : เส้นสีแดง)



รูปที่ 3.9 อินฟาเรดสเปกตราเปรียบเทียบซอยไซต์ Z11-Z15 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 600 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีดำ, หลังเผา : เส้นสีแดง)

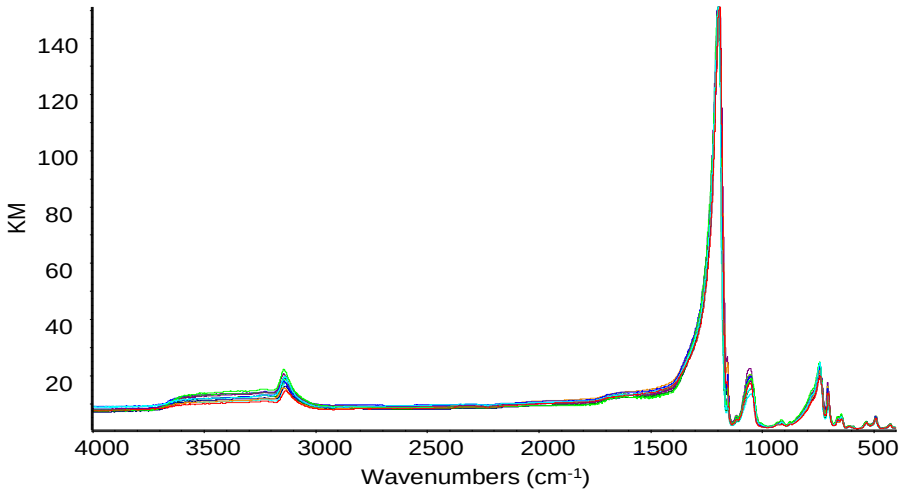
อินฟราเรดสเปกตรัมของซอยไซท์ก่อนการปรับปรุงคุณภาพในทุกอุณหภูมิ (รูปที่ 3.7 - 3.9) แสดงตำแหน่งการดูดกลืนในช่วงหลักๆ 2 บริเวณ ได้แก่ ช่วง 3300–3800 cm^{-1} และช่วง 500–1500 cm^{-1} ในบริเวณตำแหน่งแรก ประกอบด้วยแถบการดูดกลืนกว้าง (board band) ที่ตำแหน่ง 3460 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสงของ OH ในโมเลกุลน้ำ (ซึ่งอาจซ้อนทับกับน้ำที่มาจาก KBr ได้) สำหรับการดูดกลืนในบริเวณที่ 2 ซึ่งเป็น fundamental band ของโครงสร้างหลัก hydroxyl

sorosilicate, $Ca_2Al_3(SiO4)_3(OH)$ คือ พบการดูดกลืนของ Si-O-Si ของ [SiO4] ที่ตำแหน่ง 1180 cm^{-1} of the SiO_4 ตำแหน่ง OH librational mode ที่ตำแหน่ง 930 cm^{-1} ที่ตำแหน่ง 735 cm^{-1} และ 785 cm^{-1} คือการดูดกลืนของ R-O mode [R= Al, V, Fe] การดูดกลืนของ SiO-Si bending มีการซ้อนทับกันกับ (overlapped) R-OH บริเวณ 640–780 cm^{-1} และพบการดูดกลืนของการสั่นของ metal hydroxyl (R-OH) vibration ที่ 645 cm^{-1} (shoulder) และ 595 cm^{-1} และเมื่อนำซอยไซท์ไปเผาที่ทุกอุณหภูมิ พบว่ามีการดูดกลืนของอินฟราเรดสเปกตรัมที่คล้ายกับก่อนการเผา ทำให้ไม่สามารถแยกความแตกต่างของซอยไซท์หลังเผาที่เปลี่ยนจากสีน้ำตาลอมเหลืองเป็นสีม่วงอมน้ำเงินด้วยอินฟราเรดสเปกตรัมได้

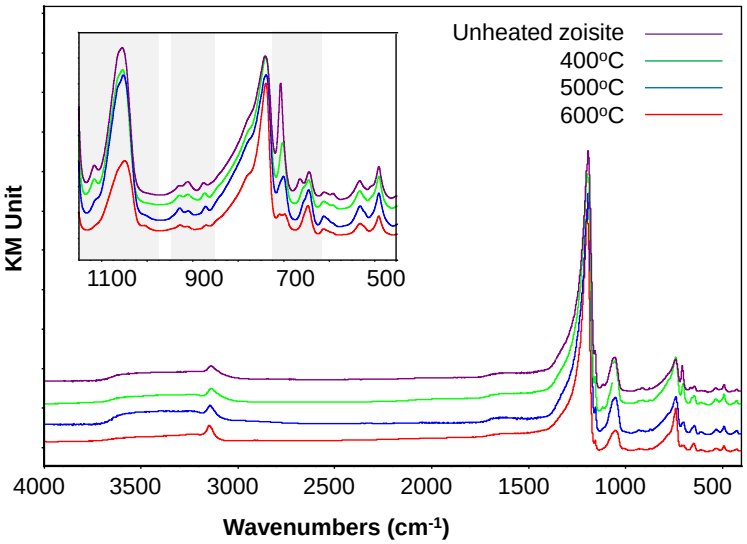
<u>หมายเหตุ</u> สเปกตรัมตำแหน่งประมาณ 2350 cm^{-1} คือการดูดกลืนของ CO_2 ในอากาศ ดังนั้นจะมีการเปลี่ยนแปลงระหว่างการทดลองจึงทำการ Break ช่วงสเปกตรัมไว้

3.1.5.2 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค DRIFT

ผลการวิเคราะห์ซอยไซท์ที่ผ่านการเผาที่ทุกอุณหภูมิและตรวจวิเคราะห์ด้วยเทคนิค DRIFT แสดงดังรูปที่ 3.10 และ 3.11 จากรูปที่ 3.10 เป็นดิฟฟิวรีแฟลกแตนซ์สเปกตรัมของซอยไซท์ที่เผาทุกอุณหภูมิวางเปรียบเทียบกัน สังเกตได้ว่าสเปกตรัมทุกเส้นแทบจะซ้อนทับกันสนิท แสดงให้เห็นว่าอาจไม่สามารถแยกซอยไซท์ที่ผ่านการเผามาได้ อินฟราเรดสเปกตรัมของซอยไซท์ก่อนการปรับปรุงคุณภาพในทุกอุณหภูมิ แสดงตำแหน่งการดูดกลืนในช่วงหลักๆ 2 บริเวณ เช่นเดียวกับที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิคส่องผ่านแบบ KRr pellet (รูปที่ 3.7 -3.9) ได้แก่ ช่วง 3300–3800 cm^{-1} และช่วง 500–1500 cm^{-1} ในบริเวณตำแหน่งแรก ประกอบด้วยแถบการดูดกลืนกว้าง (board band) ที่ตำแหน่ง 3460 cm^{-1} และ sharp peak ที่ตำแหน่งประมาณ 3150 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสงของ OH ในโมเลกุลน้ำในซอยไซท์ (ไม่มีการดูดกลืนของโมเลกุลน้ำอื่นๆ บนเช่นเดียวกับเทคนิค KBr) สำหรับการดูดกลืนในบริเวณที่ 2 ซึ่งเป็น fundamental band ของโครรงสร้างหลัก hydroxyl sorosilicate, $Ca_2Al_3(SiO4)_3(OH)$ คือ พบการดูดกลืนของ Si-O-Si ของ [SiO4] ที่ตำแหน่ง 1180 cm^{-1} of the SiO_4 ตำแหน่ง OH librational mode ที่ตำแหน่ง 930 cm^{-1} ที่ตำแหน่ง 735 cm^{-1} และ 785 cm^{-1} คือการดูดกลืนของ R-O mode [R= Al, V, Fe] [7]. การดูดกลืนของ SiO-Si bending มีการซ้อนทับกันกับ (overlapped) R-OH บริเวณ 640–780 cm^{-1} และพบการดูดกลืนของการสั่นของ metal hydroxyl (R-OH) vibration ที่ 645 cm^{-1} (shoulder) และ 595 cm^{-1} [7] เช่นเดียวกับสเปกตรัมที่ได้จากเทคนิคการส่องผ่าน อย่างไรก็ตามดิฟฟิวรีแฟลกแตนซ์สเปกตรัมของซอยไซท์ที่ผ่านการเผาที่ทุกอุณหภูมิมีการดูดกลืนของอินฟราเรดสเปกตรัมที่คล้ายกับก่อนการเผามาก แต่เมื่อนำแต่ละเส้นสเปกตรัมมาแยกพิจารณา จะได้ดังรูปที่ 3.11 ซึ่งแสดงให้เห็นว่ามีบางบริเวณที่พีคการดูดกลืนมีการ shift หรือเกิดไหล่พีคที่แตกต่างกันเกิดขึ้นเมื่อผ่านการเผาที่อุณหภูมิต่างกัน ซึ่งจะเห็นได้ว่ามีการดูดกลืนพีคเล็กๆที่ตำแหน่ง 1100-800 cm^{-1} ที่สัมพันธ์กับการสั่นของพันธะ Si-O and Si-O-Al และที่ตำแหน่ง 650–700 cm^{-1} ที่สัมพันธ์กับการสั่นแบบงอ (bending) ของ Si-O-Si และ R-OH ที่อาจเกิดจากอิทธิพลของการเผาทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเกิดขึ้นดังภาพขยายในรูป 3.11



รูปที่ 3.10 Diffuse reflectance spectra ของซอยไซต์ Z1-Z15 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส



รูปที่ 3.11 Diffuse reflectance spectra ของซอยไซต์ในก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส

3.2 การปรับปรุงคุณภาพแทนซาไนท์ด้วยความร้อนและการวิเคราะห์ด้วยสเปกโทรสโกปี

3.2.1 ผลการเปลี่ยนแปลงสีหลังการเผาและการวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเครื่องมือพื้นฐาน

ตัวอย่างพลอยแทนซาไนท์ธรรมชาติก่อนและหลังเผาที่อุณหภูมิต่างๆ พบว่าการเผาภายใต้สภาวะออกซิเดชั่นทำให้สามารถเปลี่ยนสีพลอยแทนซาไนท์สีม่วงอมน้ำเงินยังเป็นโทนสีม่วงอมน้ำเงินไม่เปลี่ยนแปลง เพียงแต่มีความสว่างเพิ่มขึ้น ซึ่งการใช้อุณหภูมิต่างกันจะทำให้ได้สีต่างกันเล็กน้อยซึ่งผลการตรวจวัดค่าสีแสดงในหัวข้อถัดไป สำหรับผลการวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือพื้นฐานแสดงดังตารางที่ 3.3

ตารางที่ 3.4 ค่าดัชนีหักเห (R.I.) และค่าความถ่วงจำเพาะ (S.G.) ของแทนซาไนท์ธรรมชาติก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

ก่อนการเผา				หลังการเผา		
ตัวอย่างพลอยซอยไซท์ก่อนเผา	**R.I.**	**S.G.**	**สีแฝด**	**RI หลัง**	**SG หลัง**	**สีแฝด**
T1-400	1.690-1.700	3.36	Dichroic	1.690-1.700	3.36	Dichroic
T2-400	1.690-1.700	3.32	Dichroic	1.690-1.700	3.32	Dichroic
T3-400	1.695-1.710	3.34	Dichroic	1.695-1.710	3.34	Dichroic
T4-500	1.690-1.710	3.36	Dichroic	1.690-1.710	3.36	Dichroic
T5-500	1.695-1.710	3.33	Dichroic	1.695-1.710	3.33	Dichroic
T6-500	1.695-1.710	3.31	Dichroic	1.695-1.710	3.31	Dichroic
T7-600	1.695-1.710	3.35	Dichroic	1.695-1.710	3.35	Dichroic
T8-600	1.690-1.700	3.28	Dichroic	1.690-1.700	3.28	Dichroic
T9-600	1.695-1.710	3.45	Dichroic	1.695-1.710	3.45	Dichroic

3.2.2 การวิเคราะห์ด้วยเครื่อง Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF)

การวิเคราะห์ธาตุองค์ประกอบตัวอย่างแทนซาไนท์ธรรมชาติ (ซอยไซท์สีน้ำเงิน) ด้วย EDXRF พบว่าพบว่าธาตุประกอบหลักในรูปออกไซด์ของซอยไซต์คือ Al_2O_3 , SiO_2 และ CaO โดยมีค่าดังตารางที่ 4.4 โดยค่าเฉลี่ยของ Al_2O_3 26.681 ± 0.295 Wt% ค่าเฉลี่ยของ SiO_2 35.095 ± 0.113 Wt% และค่าเฉลี่ยของ CaO 35.866 ± 0.109 Wt% นอกจากนี้ยังพบธาตุมลทินปริมาณน้อยคือ V_2O_5 ประมาณ 0.238 ± 0.041 Wt% ซึ่งมีปริมาณมากกว่าในซอยไซท์เท่าตัว และยังพบธาตุปริมาณน้อยอีก 3 ชนิด ได้แก่ TiO_2 ประมาณ 1.746 ± 0.073 Wt% ซึ่งเป็นธาตุให้สีในแทนซาไนท์และยังพบ Cr_2O_3 และ Fe_2O_3 อีกด้วย

ตารางที่ 3.5 แสดงชนิดธาตุ ผลเชิงปริมาณ และค่าเฉลี่ยผลเชิงปริมาณด้วยเครื่อง Energy Dispersive X-ray Fluorescence (EDXRF)

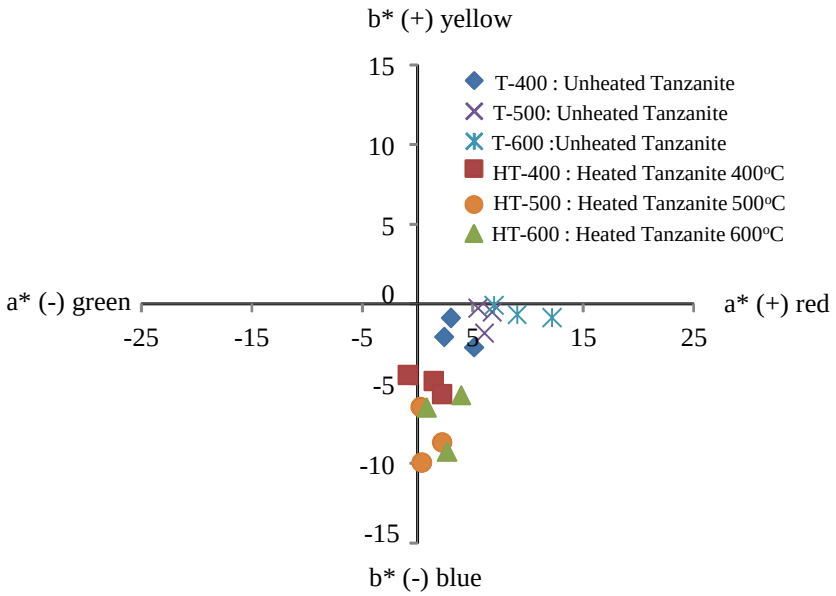
Oxide	wt%	Tanzanite
Al_2O_3	26.681	0.295
SiO_2	35.095	0.113
CaO	35.866	0.109
TiO_2	1.746	0.073
V_2O_5	0.238	0.041
Nd_2O_3	0.081	0.030
Cr_2O_3	0.029	0.499
Eu_2O_3	0.122	0.332
Fe_2O_3	0.133	0.075
Ga_2O_3	0.043	0.045
SrO	0.385	0.295

3.2.3 การเปลี่ยนแปลงสีของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

นำซอยไซต์ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400, 500 และ 600 องศาเซลเซียส แบ่งเป็นกลุ่ม T1, T2 และ T3 ตามลำดับ มาวัดค่า L,* a* และ b* ช่วงความยาวคลื่น 300 – 800 นาโนเมตร ได้ผลดังตางรางที่ 3.5

ตารางที่ 3.6 ค่า L*, a*, b* และค่า ΔE ของแทนซาไนท์

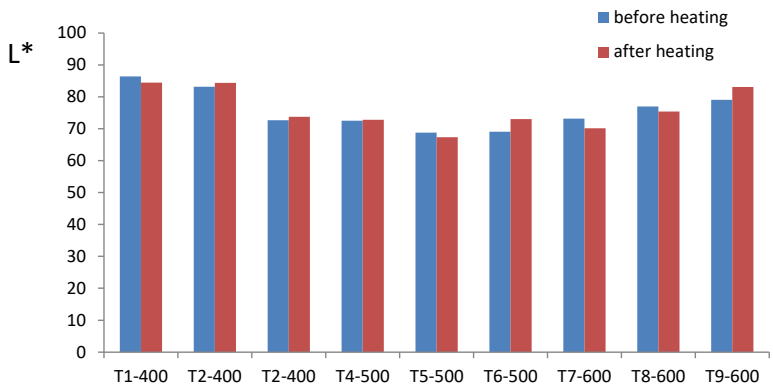
ตัวอย่าง	L* ก่อนเผา	a*ก่อนเผา	b*ก่อนเผา	L*หลังเผา	a*หลังเผา	b*หลังเผา	ΔE
T1-400	74.4075	1.0723	-4.8976	74.4682	1.477	-4.8528	0.411672
T2-400	73.2019	-1.169	-6.7432	74.4154	-0.8461	-4.4749	2.592688
T2-400	72.6695	2.4561	-2.0961	73.786	2.2262	-1.6746	1.215355
T4-500	72.5235	-0.2751	-7.8755	72.8526	2.731	-12.2855	5.347246
T5-500	78.8229	3.5163	-6.9693	79.3416	4.0004	-5.7547	1.406647
T6-500	69.1223	1.8493	-2.5951	73.0401	-0.8747	-6.5203	6.178716
T7-600	73.2202	-0.8953	-9.3208	74.1601	0.4068	-9.9746	1.733877
T8-600	76.9927	5.1106	0.8296	76.4267	0.2891	-2.4705	5.870083
T9-600	79.0677	9.6921	-6.3373	83.081	2.2209	-4.7099	8.635614



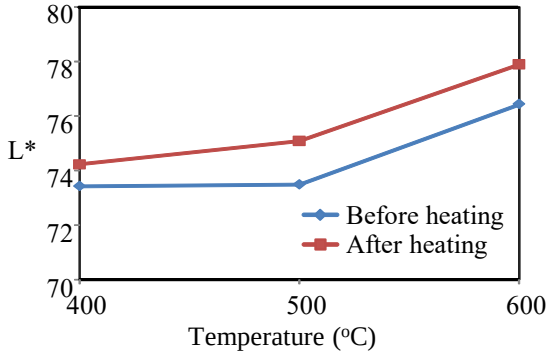
รูปที่ 3.12 กราฟแสดงค่า a* และ b* ของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการเผา

ผลการเปลี่ยนแปลงสีตัวอย่างแทนซาไนท์ ที่ผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600 องศาเซลเซียส ในตารางที่ 3.5 นำมาพลอทกราฟความสัมพันธ์การเปลี่ยนแปลงสีแสดงดังรูปที่ 3.12 จากรูป แทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส มีสีที่เปลี่ยนไปหลังการเผาเล็กน้อยเท่านั้น ส่วนแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 500 องศาเซลเซียส มีสีที่เปลี่ยนไปหลังการเผาคือ มีค่า a* ลดลง ไปทางค่าเป็นลบ แสดงว่ามีสีไปทางสีแดงและค่า b* เป็นลบเช่นกันคือมีค่าไปทางสีน้ำเงิน สอดคล้องกับสีพลอยหลังเผาที่เปลี่ยนจากน้ำตาลอมเหลืองเป็นม่วงอมน้ำเงินและน้ำเงินอมม่วง เช่นเดียวกับแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 600 องศาเซลเซียส มีค่า a* และ b* เปลี่ยนแปลงไปทางเป็นลบมากขึ้น แสดงให้เห็นว่ามีความเป็นสีน้ำเงินเพิ่มขึ้นนั่นเอง

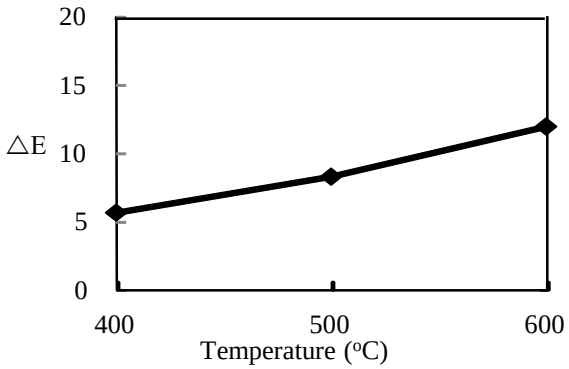
กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง L* ของแต่ละกลุ่มตัวอย่างทั้งก่อนและหลังการเผาที่อุณหภูมิต่างๆ ดังรูปที่ 3.13 ซึ่งเปรียบเทียบค่า L* ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนทุกๆ อุณหภูมินั้น ตัวอย่างบางเม็ดมีความสว่างเพิ่มขึ้นในขณะที่บางเม็ดมีความสว่างลดลงเหมือนกันในทุกอุณหภูมิ อาจเกิดเนื่องจากตำหนิภายในพลอยแต่ละเม็ดที่ต่างกัน ผลของตำหนิภายในพลอยนั้นทำให้เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นจะทำให้มีความสว่างลดลง ในขณะที่ถ้าตำหนิหรือบริเวณที่ไม่มีตำหนิ เมื่อเผาแล้วค่าความสว่างจะเพิ่มขึ้น เมื่อเปรียบเทียบค่าเฉลี่ยการเปลี่ยนแปลง L* ทั้งหมดของทุกอุณหภูมิโดยคำนวณหาค่าเฉลี่ยของ L* หลังเผาจะมีค่า L* สูงขึ้นเล็กน้อยเมื่อเผาที่อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส และค่าความสว่างจะเพิ่มขึ้นจนเห็นค่าความแตกต่างได้ชัดเจนเมื่อเผาที่อุณหภูมิเพิ่มขึ้นเป็น 600 องศาเซลเซียส ดังรูปที่ 3.14



รูปที่ 3.13 กราฟเปรียบทียบค่าความสว่างของแทนซาไซท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (กลุ่ม T1) 500 องศาเซลเซียส (กลุ่ม T2) และ 600 องศาเซลเซียส (กลุ่ม T3)



รูปที่ 3.14 กราฟแสดงค่าเฉลี่ยความสว่าง L* ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพของแทนซาไนท์



รูปที่ 3.15 กราฟเปรียบเทียบความแตกต่างของค่าความสว่างเฉลี่ย △L* ของแทนซาไนท์ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิต่างๆ

เพื่อให้เห็นว่าการเปลี่ยนแปลงสีและความสว่างของการเผาแต่ละอุณหภูมิต่างกันอย่างไร จึงต้องวิเคราะห์หาค่า ΔE ซึ่งเป็นการหาความต่างของทั้งค่าความสว่าง (L*) และค่าสี (a*b*) ผลการวิเคราะห์ค่า ΔE ของทุกอุณหภูมิแสดงดังตารางที่ 3.5 จากค่า ΔE ในตาราง นำมาหาค่าเฉลี่ยเป็น 3

จุด ที่อุณหภูมิ 400 , 500 และ 600 องศาเซลเซียส ดังแสดงในรูปที่ 3.15 พบว่า ค่า ΔE ที่อุณหภูมิ 600 องศาเซลเซียสมีค่ามากที่สุด แสดงว่ามีการเปลี่ยนแปลงสีของแทนซาไนท์มากที่สุด ส่วน ΔE ที่อุณหภูมิ 500 องศาเซลเซียสมีค่ารองลงมา และค่า ΔE ที่อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส ค่าน้อยที่สุด สามารถสรุปได้ว่าเมื่อเพิ่มอุณหภูมิจะทำให้ค่าความแตกต่างของสีมีค่ามากที่สุด

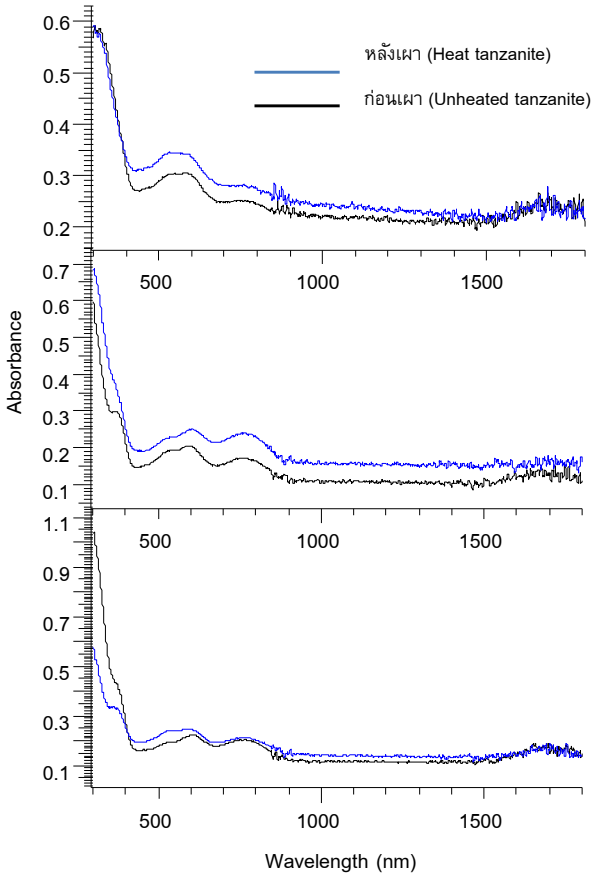
3.2.4 ยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของแทนซาไนท์ ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน

ยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส แสดงดังรูปที่ 3.16 - 3.18 ยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส (รูปที่ 3.16) แสดงแถบการดูดกลืนที่ตำแหน่ง 300-400 nm ซึ่งสัมพันธ์กับการดูดกลืนของ VO^{2+} (Oxidation state 5+ เป็นธาตุให้สีเหลือง) ซึ่งหากเปรียบเทียบกับยูวีวิสซิเบิลของซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองในรูปที่ 3.6 จะพบว่าที่ตำแหน่งการดูดกลืนของ VO^{2+} ของแทนซาไนท์จะมีค่าต่ำกว่า และนอกจากนี้ยังพบแถบการดูดกลืนที่ตำแหน่ง 505 และ 530 เกิดจาก Fe^{2+} และ V^{2+} (V^{2+} ให้สีม่วง) ส่วนที่ตำแหน่ง 450, 580 และ 610 nm สัมพันธ์กับการดูดกลืนแสงของ V^{3+} ซึ่งเป็นธาตุให้สีเขียว และแถบการดูดกลืนที่ตำแหน่ง 790 nm แสดงการดูดกลืนของ V^{4+} ซึ่งสัมพันธ์กับการให้สีน้ำเงินในซอยไซท์สีน้ำเงินหรือแทนซาไนท์ หากเปรียบเทียบค่าการดูดกลืนแสงของ V^{4+} ของแทนซาไนท์ในรูป 3.16 กับ ที่ตำแหน่งเดียวกันของซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองในรูปที่ 4.6 นั้นพบกว่าแถบการดูดกลืนที่ตำแหน่งนี้ของแทนซาไนท์มีค่าสูงกว่าสัมพันธ์กับสีของแทนซาไนท์ที่มีสีม่วงอมน้ำเงินชัดเจนขณะที่ซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองมีแถบการดูดกลืนนี้ต่ำไม่เด่นชัดเนื่องจากเป็นสีน้ำตาลอมเหลือง และจะมามีค่าสูงขึ้นเมื่อผ่านการเผาแล้วและสีเปลี่ยนเป็นสีน้ำเงินอมม่วงนั่นเอง

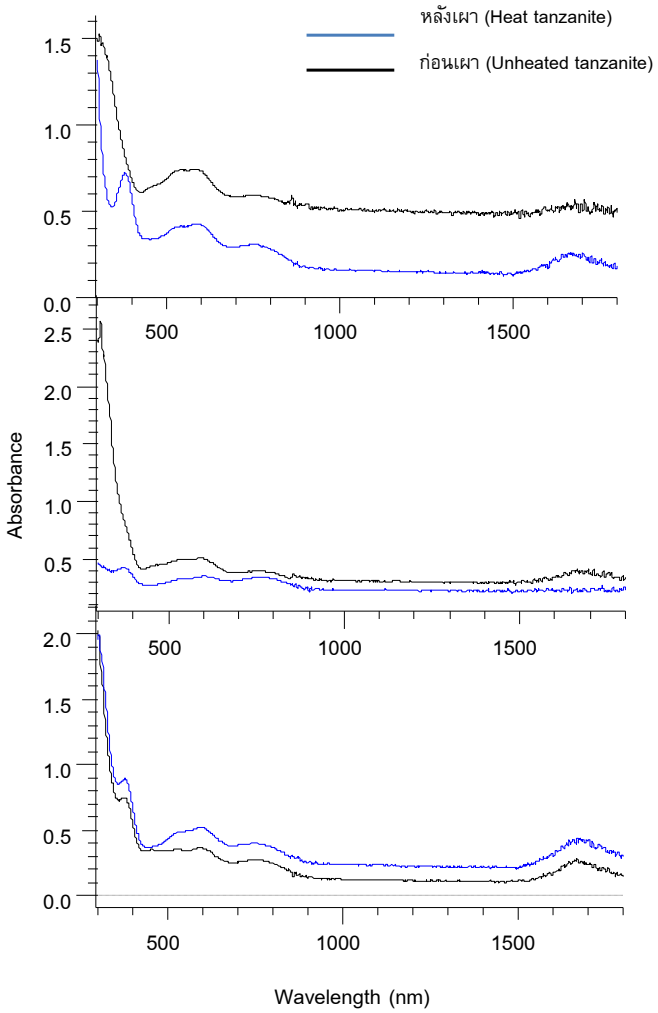
ภายหลังจากการการเผาที่อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส พบว่าแถบการดูดกลืนที่ตำแหน่งประมาณ 300-400 nm ที่สัมพันธ์กับ VO^{2+} มีการดูดกลืนแสงลดลงเล็กน้อย และพบการดูดกลืนแสงของ V^{3+} ลดลงเล็กน้อยเช่นกัน และพบว่ามีการดูดกลืนแสงที่ตำแหน่ง 790 ของ V^{4+} เพิ่มขึ้น ซึ่งสัมพันธ์กับการเกิดสีน้ำเงินขึ้นในซอยไซท์หลังเผา

การเปลี่ยนแปลงยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซต์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 องศาเซลเซียส พบว่ามีแนวโน้มไปทางเดียวกันทุกเม็ด คือ ก่อนการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนจะแสดงขอบการดูดกลืนที่ประมาณ 300 นาโนเมตร มีแถบการดูดกลืนกว้างไปถึง 400 นาโนเมตร หลังการปรับปรุงคุณภาพพบแถบการดูดกลืนสูงสุดที่ประมาณ 380 นาโนเมตร ชัดเจนขึ้น ซึ่งเป็นผลมาจาก V^{4+} เพิ่มขึ้น ตำแหน่งที่สองที่มีการเปลี่ยนแปลงคือ แถบการดูดกลืนที่ 450 นาโนเมตร ซึ่งแสดงแถบการดูดกลืนของ V^{3+} หลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนแถบการดูดกลืนตรงตำแหน่งนี้จะลดลง เป็นผลมาจาก V^{3+} ลดลง ดังแสดงในรูปที่ 3.17 การเปลี่ยนแปลงยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมของซอยไซต์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 600 องศาเซลเซียส พบว่ามีแนวโน้มไปทางเดียวกันทุกเม็ด คือ ก่อนการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนจะแสดงขอบการดูดกลืนที่ประมาณ 300 นาโนเมตร มีแถบการดูดกลืนกว้างไปถึง 400 นาโนเมตร หลังการปรับปรุงคุณภาพพบแถบการดูดกลืนนี้ลดลงอย่างมาก ตำแหน่งที่สองที่มีการเปลี่ยนแปลงคือ แถบการดูดกลืน

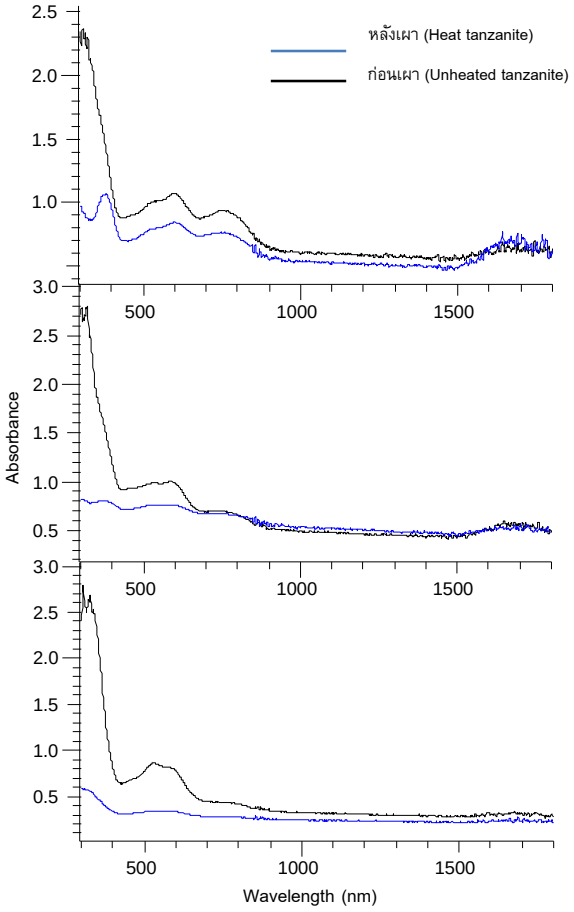
ที่ 450 นาโนเมตร ซึ่งแสดงแถบการดูดกลืนของ V^{3+} หลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนแถบการดูดกลืนตรงตำแหน่งนี้จะลดลง เป็นผลมาจาก V^{3+} ลดลง ดังแสดงในรูปที่ 3.18 ซึ่งส่งผลต่อการลดลงของสีม่วงเป็นน้ำเงินอมม่วง



รูปที่ 3.16 ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรัมเปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของแทนซาไนท์ T1-T3 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส



รูปที่ 3.17 ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรัมเปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของแทนซาไนท์ T4-T6 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 องศาเซลเซียส



รูปที่ 3.18 ยูวีวิสเนียร์ไออาร์สเปกตรัมเปรียบเทียบการดูดกลืนแสงของแทนซาไนท์ T7-T9 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 600 องศาเซลเซียส

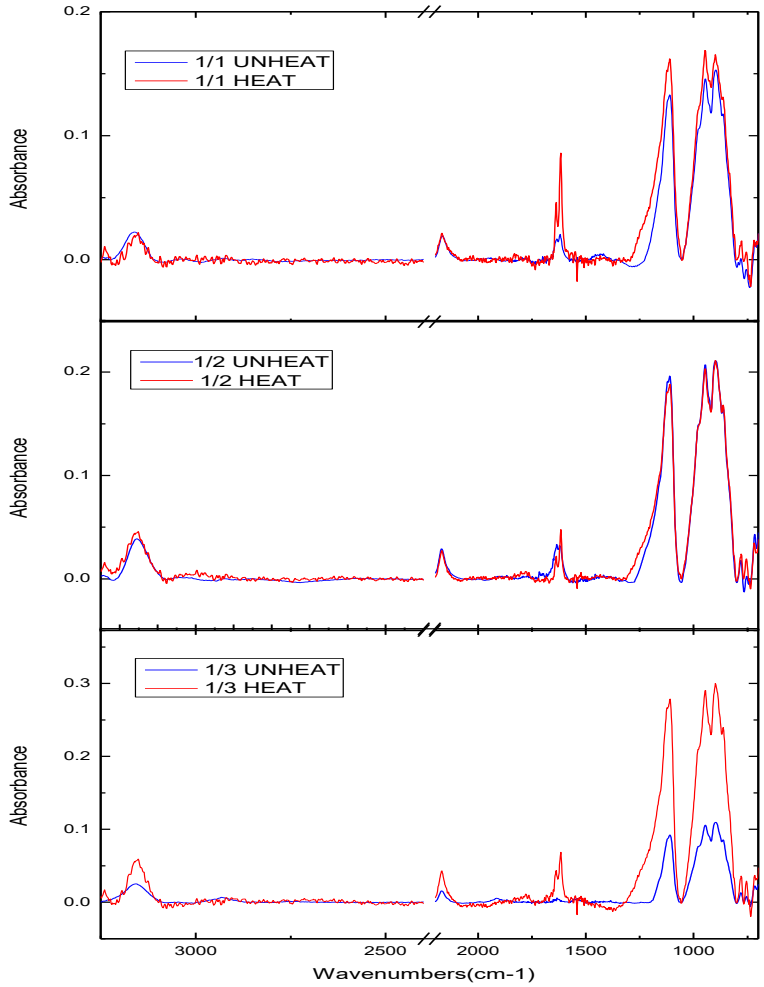
3.2.5 การวิเคราะห์แทนซาไนท์ด้วย Fourier Transform Infrared Spectrophotometer

3.2.5.1 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค KBr Pellet

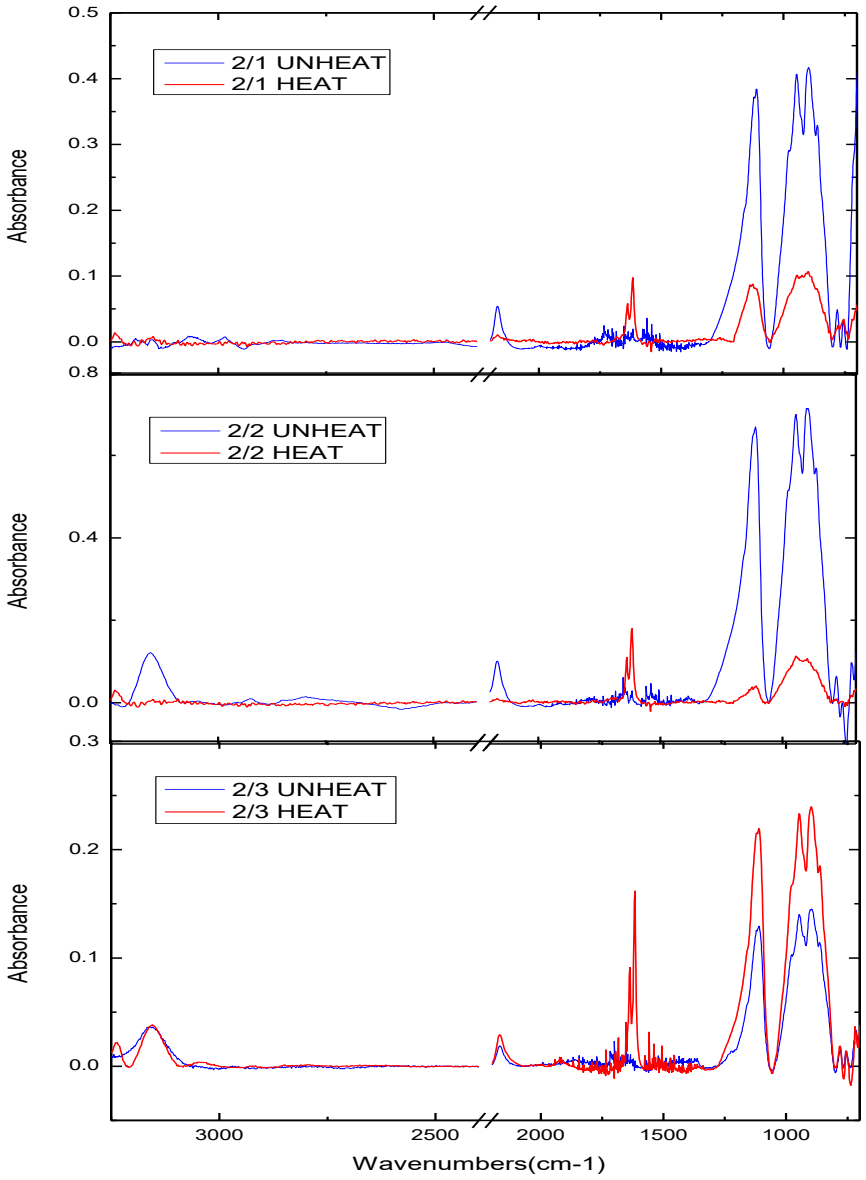
อินฟาเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์แสดงก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600 องศาเซลเซียส โดยการเตรียมตัวอย่างเทคนิค KBr pellet แสดงดังรูปที่ 4.20-4.22 พบว่าอินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ธรรมชาติทั้งก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน แสดงแถบการดูดกลืนเหมือนกับซอยไซท์ทั้งก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพ (รูปที่ 3.7-3.9) ได้แก่ แถบการดูดกลืนกว้าง (board band) ที่ตำแหน่ง 3460 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสงของ OH ในโมเลกุลน้ำ สำหรับการดูดกลืนในบริเวณที่ 2 ซึ่งเป็น fundamental band ของโครงสร้างหลัก hydroxyl sorosilicate, $Ca_2Al_3(SiO4)_3(OH)$ คือ พบการดูดกลืนของ Si-O-Si ของ [SiO4] ที่ตำแหน่ง 1180 cm^{-1} of the SiO_4 ตำแหน่ง OH librational mode ที่ตำแหน่ง 930 cm^{-1} ที่ตำแหน่ง 735 cm^{-1} และ 785 cm^{-1} คือการดูดกลืนของ R-O mode [R= Al, V, Fe] [7]. การดูดกลืนของ SiO-Si bending มีการซ้อนทับกันกับ (overlapped) R-OH บริเวณ 640–780 cm^{-1} และพบการดูดกลืนของการสั่นของ metal hydroxyl (R-OH) vibration ที่ 645 cm^{-1}

(shoulder) และ 595 cm^{-1} [7] และเมื่อนำซอยไซท์ไปเผาที่ทุกอุณหภูมิ พบว่ามีการดูดกลืนของอินฟราเรดสเปกตรัมที่คล้ายกับก่อนการเผา ทำให้ไม่สามารถแยกความแตกต่างของแทนซาน์ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพ กับซอยไซท์หลังเผาที่เปลี่ยนจากสีน้ำตาลอมเหลืองเป็นสีม่วงอมน้ำเงินด้วยอินฟราเรดสเปกตรัมได้

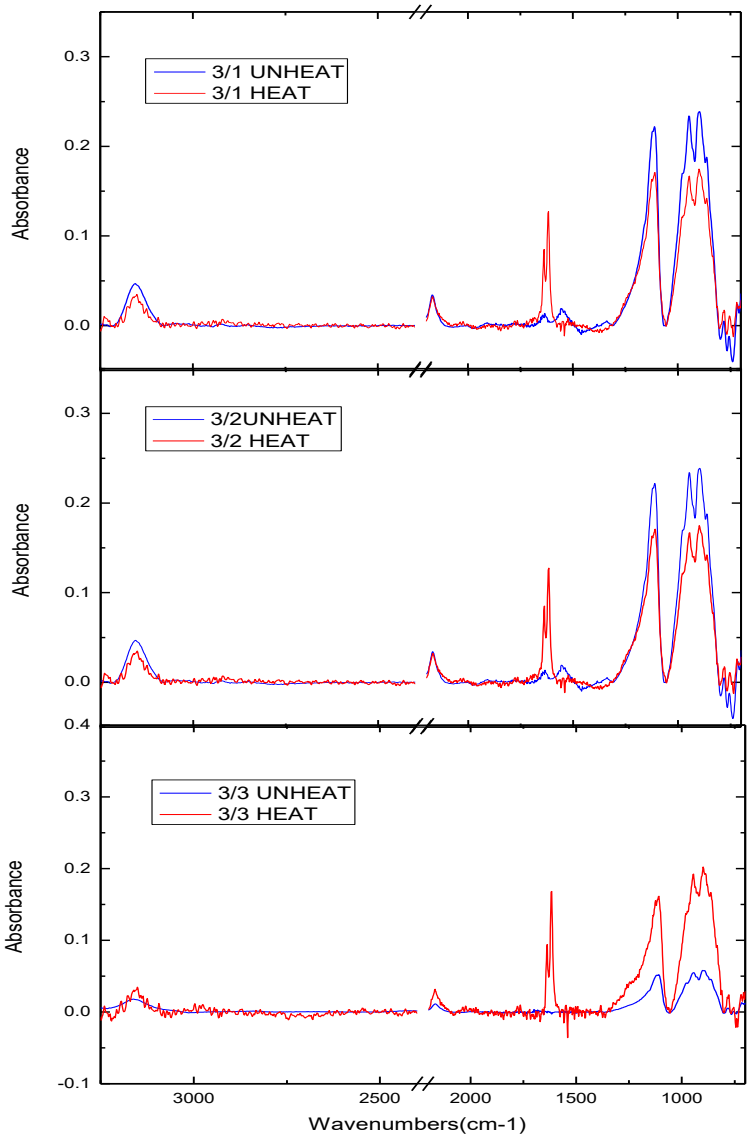
<u>หมายเหตุ</u> สเปกตรัมตำแหน่งประมาณ 2350 cm^{-1} คือการดูดกลืนของ CO_2 ในอากาศ ดังนั้นจะมีการเปลี่ยนแปลงระหว่างการทดลองจึงทำการ Break ช่วงสเปกตรัมไว้



รูปที่ 3.19 อินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีน้ำเงิน, หลังเผา : เส้นสีแดง)



รูปที่ 3.20 อินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 500 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีน้ำเงิน, หลังเผา : เส้นสีแดง)

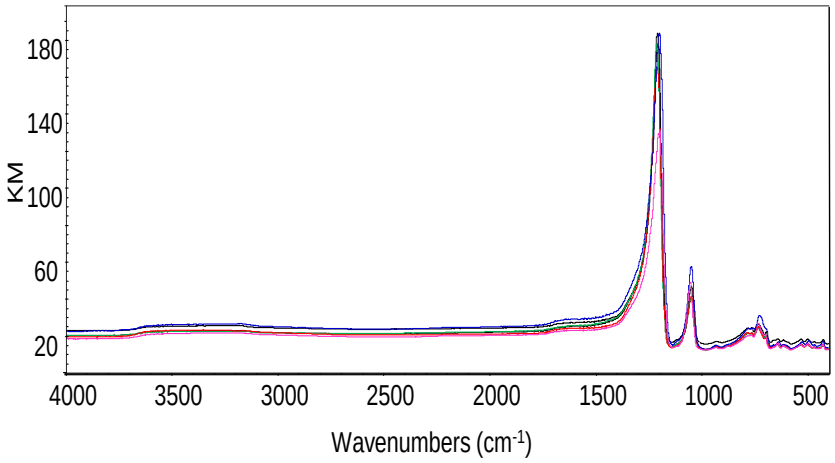


รูปที่ 3.21 อินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อน และหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 600 องศาเซลเซียส (ก่อนเผา: เส้นสีน้ำเงิน, หลังเผา : เส้นสีแดง)

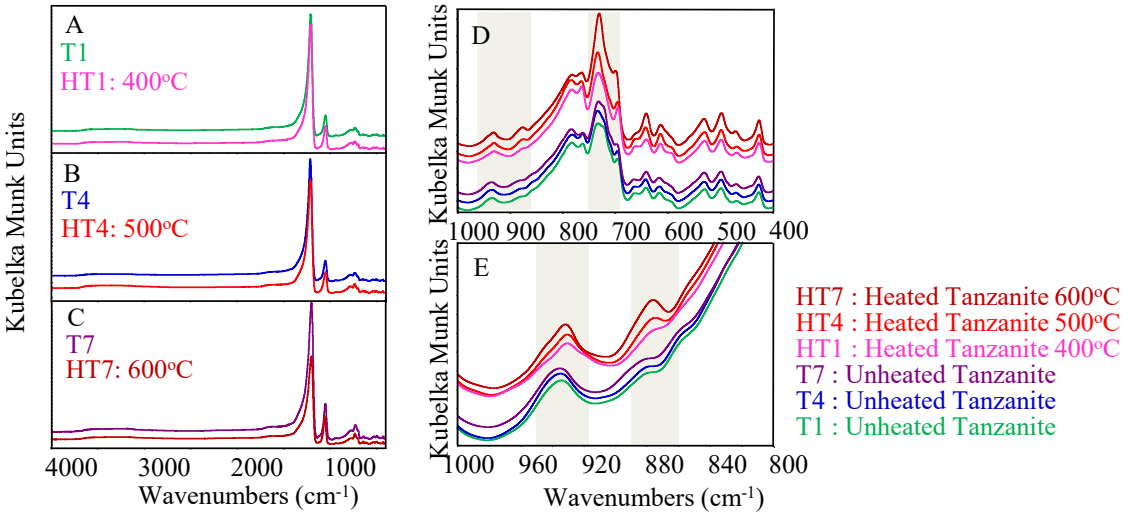
3.1.5.2 ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค DRIFT

ผลการวิเคราะห์แทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาที่ทุกอุณหภูมิและตรวจวิเคราะห์ด้วยเทคนิค DRIFT แสดงดังรูปที่ 3.22 และ 3.23 จากรูปที่ 3.24 เป็นดิฟฟิวรีแฟลกแตนซ์สเปกตรัมของแทนซาไนท์ที่เผาทุกอุณหภูมิวางเปรียบเทียบกัน สังเกตได้ว่าสเปกตรัมทุกเส้นแทบจะซ้อนทับกันสนิท แสดงให้เห็นว่าอาจไม่สามารถแยกแทนซาไนท์ธรรมชาติและที่ผ่านการเผามาได้ อินฟราเรดสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนการปรับปรุงคุณภาพในทุกอุณหภูมิ แสดงตำแหน่งการดูดกลืนในช่วงหลักๆ 2 บริเวณ เช่นเดียวกับที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิคส่องผ่านแบบ KRr pellet (รูปที่ 3.19 -3.21) และ

เหมือนกับการดูดกลืนของซอยไซท์ด้วยเทคนิค DRIFT (รูปที่ 3.10) ได้แก่ ช่วง 3300–3800 cm^{-1} และช่วง 500–1500 cm^{-1} ในบริเวณตำแหน่งแรก ประกอบด้วยแถบการดูดกลืนกว้าง (board band) ที่ตำแหน่ง 3460 cm^{-1} และ sharp peak ที่ตำแหน่งประมาณ 3150 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสงของ OH ในโมเลกุลน้ำในแทนซาไนท์ (ไม่มีการดูดกลืนของโมเลกุลน้ำอื่นๆ บนเช่นเดียวกับเทคนิค KBr) สำหรับการดูดกลืนในบริเวณที่ 2 ซึ่งเป็น fundamental band ของโครรงสร้างหลัก hydroxyl sorosilicate, $Ca_2Al_3(SiO4)_3(OH)$ คือ พบการดูดกลืนของ Si-O-Si ของ [SiO4] ที่ตำแหน่ง 1180 cm^{-1} of the SiO_4 ตำแหน่ง OH librational mode ที่ตำแหน่ง 930 cm^{-1} ที่ตำแหน่ง 735 cm^{-1} และ 785 cm^{-1} คือการดูดกลืนของ R-O mode [R= Al, V, Fe] [7]. การดูดกลืนของ SiO-Si bending มีการซ้อนทับกันกับ (overlapped) R-OH บริเวณ 640–780 cm^{-1} และพบการดูดกลืนของการสั่นของ metal hydroxyl (R-OH) vibration ที่ 645 cm^{-1} (shoulder) และ 595 cm^{-1} [7] เช่นเดียวกับสเปกตรัมที่ได้จากเทคนิคการส่องผ่าน อย่างไรก็ตามดิฟฟิวรีแฟลกแตนซ์สเปกตรัมของซอยไซท์ที่ผ่านการเผาที่ทุกอุณหภูมิมีการดูดกลืนของอินฟราเรดสเปกตรัมที่คล้ายกับก่อนการเผามาก แต่เมื่อนำแต่ละเส้นสเปกตรัมมาแยกพิจารณา จะได้ดังรูปที่ 3.23 ซึ่งแสดงให้เห็นว่ามีบางบริเวณที่พีคการดูดกลืนมีการ shift หรือเกิดไหล่พีคที่แตกต่างกันเกิดขึ้นเมื่อผ่านการเผาที่อุณหภูมิต่างกัน ซึ่งจะเห็นได้ว่ามีการดูดกลืนพีคเล็กๆที่ตำแหน่ง 1100-800 cm^{-1} ที่สัมพันธ์กับการสั่นของพันธะ Si-O and Si-O-Al และที่ตำแหน่ง 650–700 cm^{-1} ที่สัมพันธ์กับการสั่นแบบงอ (bending) ของ Si-O-Si และ R-OH ที่อาจเกิดจากอิทธิพลของการเผาทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเกิดขึ้นดังภาพขยาย(inset) ในรูปที่ 3.23



รูปที่ 3.22 Diffuse reflectance spectra ของแทนซาไนท์ T1-T9 ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส



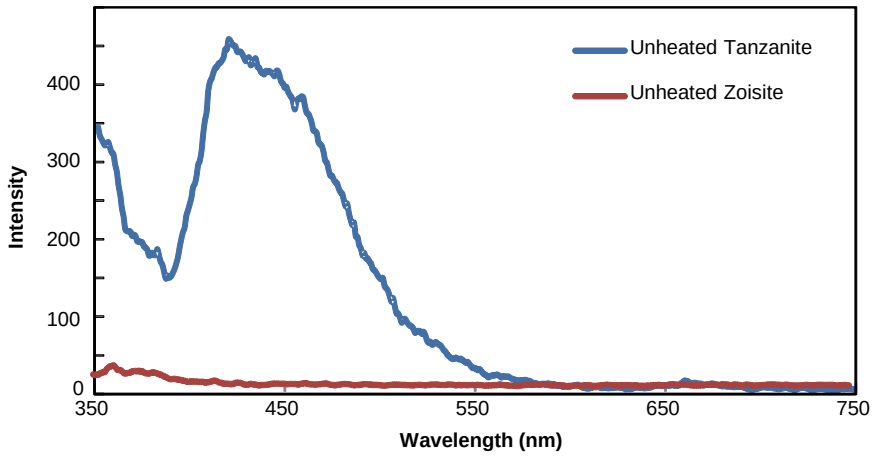
รูปที่ 3.23 เปรียบเทียบ Diffuse reflectance spectra ของซอยไซต์ในก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ 400-600 องศาเซลเซียส

3.3 การวิเคราะห์ด้วยฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรมิเตอร์ (Fluorescence Spectrometer)

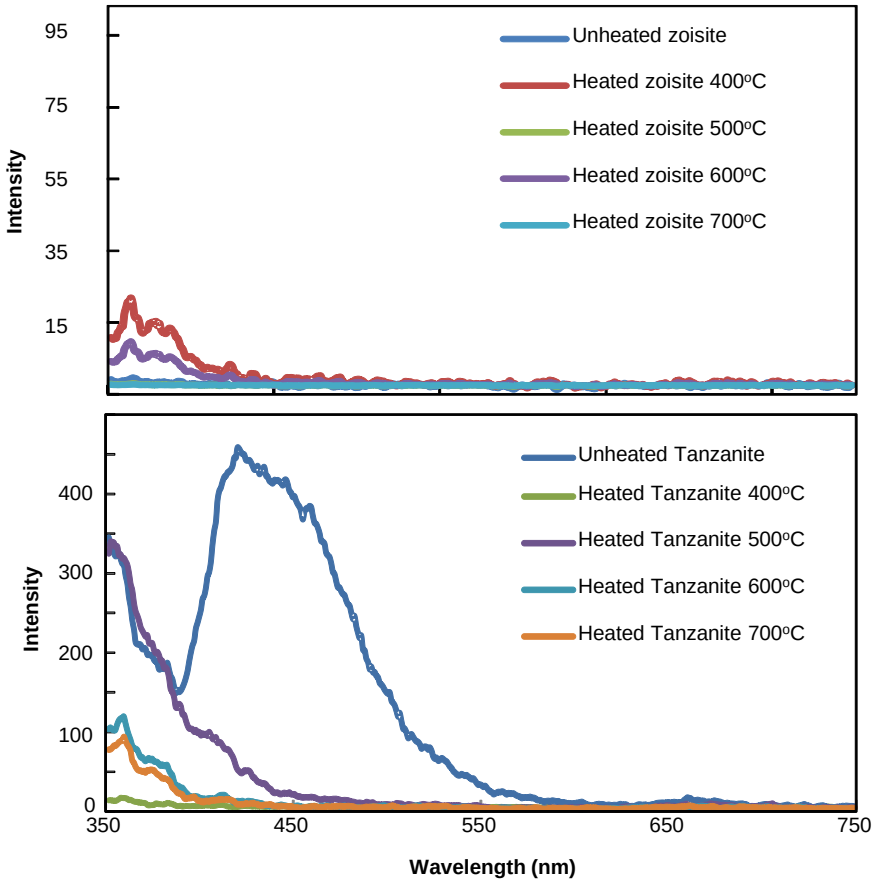
ซอยไซท์ธรรมชาติ และซอยไซท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพทุกอุณหภูมิได้นำไปวิเคราะห์เปรียบเทียบกับแทนซาไนท์ธรรมชาติและแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพ ด้วยเทคนิคฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี ผลการทดลอง แสดงดังรูปที่ 3.24 และ 3.25 จากผลการทดลองรูป 3.24 พบ emission band ที่ตำแหน่ง 350 และ 480 nm และซอยไซท์ธรรมชาติพบ emission band ที่ตำแหน่ง 350 nm ซึ่งน่าจะมาจากธาตุทรานซิชันหรือ rare earth ที่พบว่าเป็นองค์ประกอบในพลอยทั้ง 2 ชนิด ดังที่ตรวจพบด้วยเทคนิค EDXRF เมื่อนำพลอยทั้ง 2 ชนิด ไปทดลองเผาที่อุณหภูมิต่างๆ จะได้ผลการทดลองดังรูปที่ 3.25

รูปที่ 3.25 เห็นได้ว่า สเปกตรัมที่ได้จากเทคนิคฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปีของแทนซาไนท์และซอยไซท์ที่ผ่านการเผาที่อุณหภูมิต่างๆ ทำให้ emission band ลดลง จนมีลักษณะคล้ายกันมากเมื่อผ่านการเผา ดังนั้นหากจะแยกแทนซาไนท์ที่ไม่ผ่านการเผาเลยในธรรมชาติมีความเป็นไปได้ว่าสามารถจะทำได้ แต่เทคนิคนี้ขึ้นอยู่กับความหนาของตัวอย่างด้วย แต่ในกรณีที่เป็นอัญมณีที่ซื้อขายในตลาดพลอยที่ต้องผ่านการอบต่ำหรือผ่านความร้อน อาจจะไม่พบแถบสเปกตรัมที่ชัดเจนนัก ซึ่งจะมีลักษณะคล้ายกับซอยไซท์ที่ผ่านการเผาเปลี่ยนสีมาได้เช่นกัน ดังนั้น เทคนิคฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี อาจมีส่วนช่วยในการจำแนกได้บ้าง และควรจะต้องใช้เทคนิคอื่นๆ เพื่อได้ข้อมูลมาเสริมกันด้วย

เนื่องจากการวิเคราะห์ด้วยฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี ยังไม่สามารถให้ข้อมูลสเปกตรัมที่เพียงพอ ดังนั้นจึงได้ทำการทดลองเพิ่มโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี



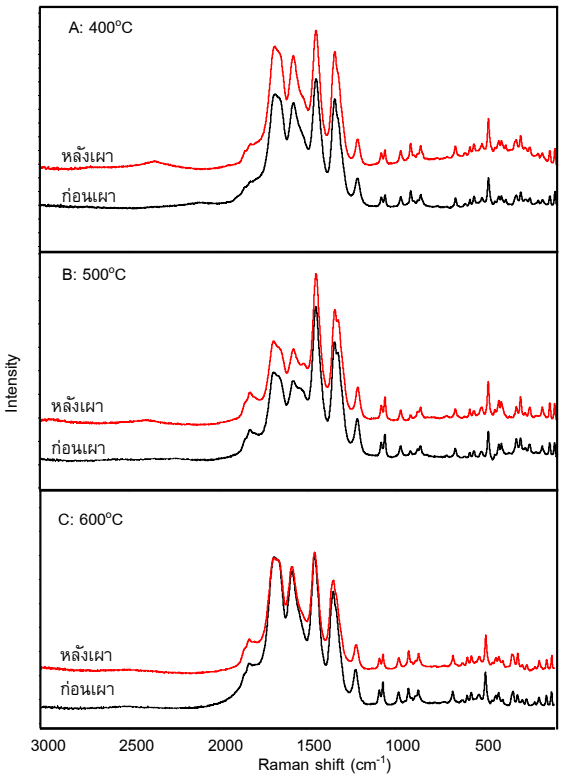
รูปที่ 3.24 ฟลูออเรสเซนส์สเปกตรัมของซอยไซท์ (สีน้ำตาลอมเหลือง) และแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงอมน้ำเงิน) ที่ไม่ได้ผ่านการปรับปรุงคุณภาพ



รูปที่ 3.25 ฟลูออเรสเซนส์สเปกตรัมของซอยไซท์ (ภาพบน) และ แทนซาไนท์ธรรมชาติ (ภาพล่าง) ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพที่อุณหภูมิต่างๆ

3.4 การวิเคราะห์ด้วยรามานสเปกโทรมิเตอร์ (Raman Spectrophotometer)

ผลการวิเคราะห์ซอยไซท์ก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพ แสดงดังรูปที่ 3.26 รามานสเปกตรัมที่ได้ทั้งของก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนมีลักษณะสเปกตรัมเหมือนกันที่ทุกอุณหภูมิ โดยมีพีคเกิดขึ้นจำนวนมากตั้งแต่ตำแหน่ง 100-2000 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับโครงสร้างหลังของซอยไซท์ และพบแถบการดูดกลืนจากการเกิดฟลูออเรสเซนต์ที่ช่วงคลื่น 1500-2000 cm^{-1} ซึ่งอาจเกิดจากธาตุ rare earth ในซอยไซท์ ซึ่งจากการตรวจวิเคราะห์จากบทความอ้างอิงบางแหล่งพบว่าเกิดจาก Nd อย่างไรก็ตาม สเปกตรัมของก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ทุกอุณหภูมิ ไม่สามารถบอกความแตกต่างของซอยไซท์ก่อนเผา (สีน้ำตาลอมเหลือง) และหลังเผา (สีม่วงอมน้ำเงิน) ได้เช่นเดียวกับการตรวจสอบด้วยเทคนิคอื่นๆ

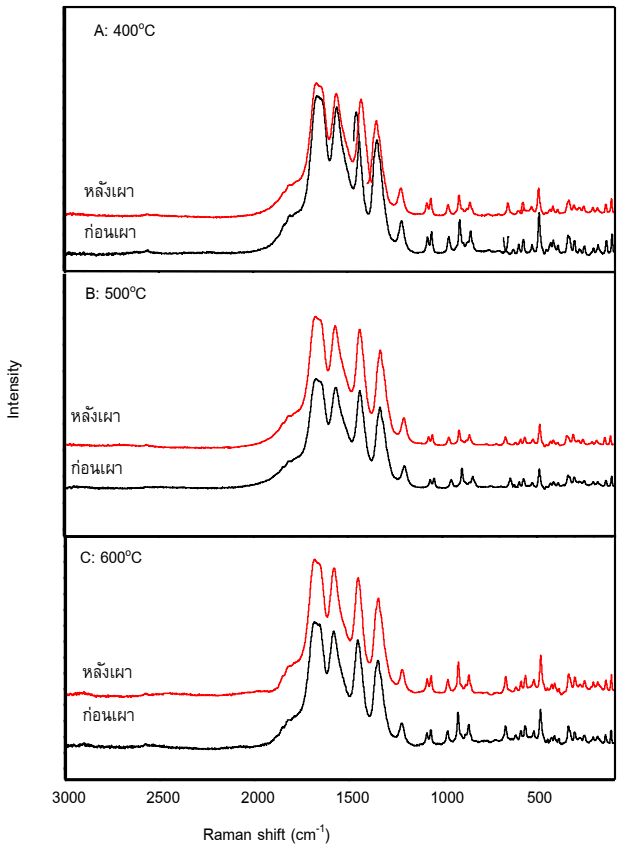


รูปที่ 3.26 รามานสเปกตรัมของซอยไซท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C

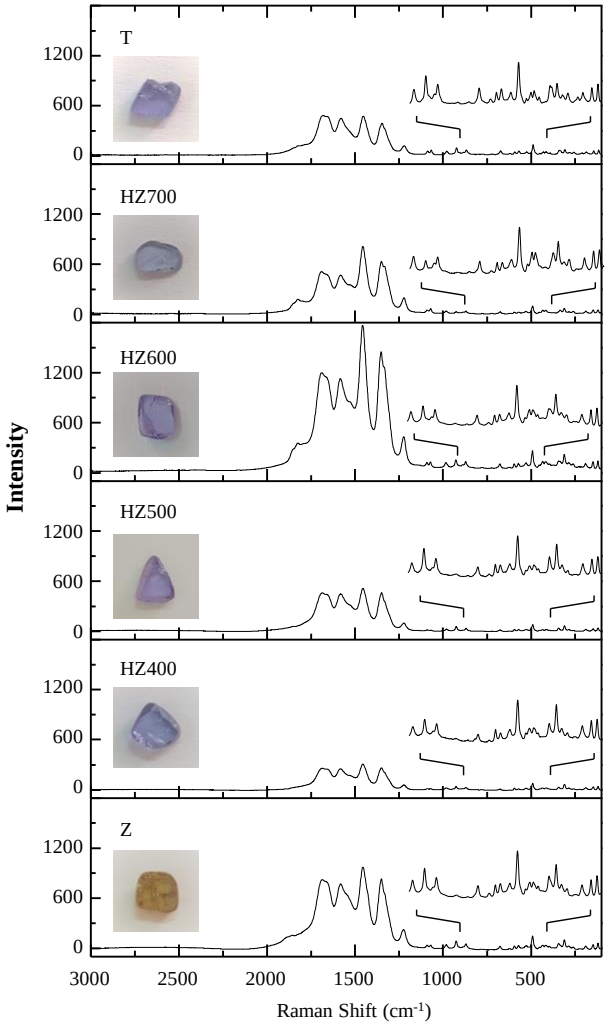
รูปที่ 3.27 แสดงผลการวิเคราะห์แทนซาไนท์ธรรมชาติ (ซอยไซท์สีม่วงอมน้ำเงิน) ก่อนเผา และหลังเผา รามานสเปกตรัมที่ได้ทั้งของก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนมีลักษณะสเปกตรัมเหมือนกันทุกอุณหภูมิ และเหมือนกับรามานสเปกตรัมของซอยไซท์ทั้งก่อนและหลังเผาในรูปที่ 3.26

ด้วย คือ พบพีคเกิดขึ้นจำนวนมากตั้งแต่ตำแหน่ง 100-2000 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับโครงสร้างหลังของซอยไซท์ และพบแถบการดูดกลืนจากการเกิดฟลูออเรสเซนต์ที่ช่วงคลื่น 1500-2000 cm^{-1} จาก Nd

รูปที่ 3.28 เป็นการนำรามานสเปกตรัมของซอยไซท์ที่เผาในทุกอุณหภูมิมาเปรียบเทียบกับสเปกตรัมของแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงอมน้ำเงิน) จะเห็นได้ว่า อย่างไรก็ตาม สเปกตรัมของแทนซาไนท์ทั้งก่อนและหลังปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนที่ทุกอุณหภูมิ ไม่สามารถบอกความแตกต่างได้และไม่สามารถจำแนกจากซอยไซท์ก่อนเผา (สีน้ำตาลอมเหลือง) และหลังเผา (สีม่วงอมน้ำเงิน) ได้เช่นกัน จึงจำเป็นต้องทำการทดลองนำรามานสเปกตรัมของตัวอย่างซอยไซท์และแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพทุกอุณหภูมิมาเปรียบเทียบกัน

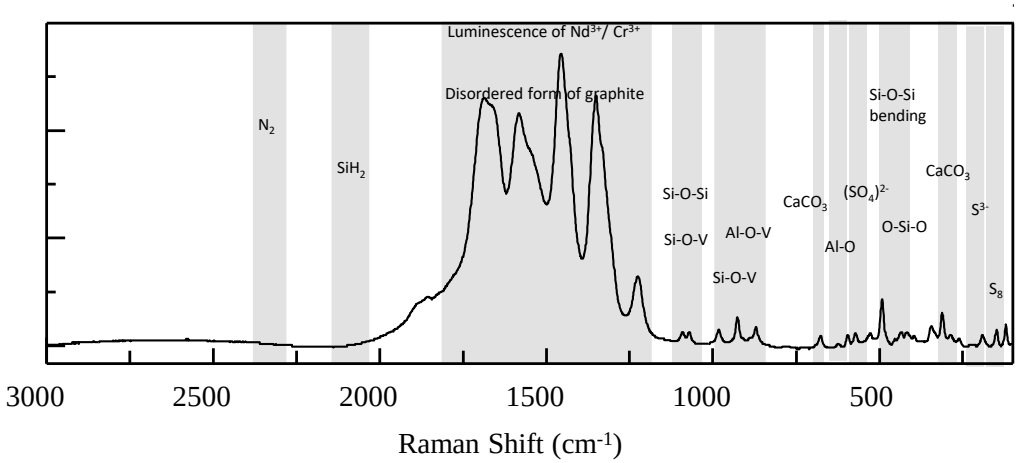


รูปที่ 3.27 รามานสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C



รูปที่ 3.28 รามานสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C

ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีทั้งหมดในงานวิจัยนี้แสดงให้เห็นว่า แม้ว่าจะพบว่าพีคการดูดกลืนของยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัมก่อนและหลังเผาของซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาลอมเหลือง) ธรรมชาติและผ่านการเผา กับแทนซาไนท์สีน้ำเงินอมม่วงธรรมชาติ จะเกิดการดูดกลืนที่ตำแหน่งเปลี่ยนไปเนื่องจากมีสีต่างกันทั้งก่อนและหลังเผา แต่อย่างไรก็ตาม สเปกตรัมทั้งหมดก็ไม่สามารถจำแนกจากกันได้ รวมทั้งสเปกตรัมที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอินฟราเรดและรามารสเปกโทรสโกปีด้วย ที่ ไม่สามารถจำแนกระหว่างซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาลอมเหลือง) ธรรมชาติและผ่านการเผา กับแทนซาไนท์สีน้ำเงินอมม่วงธรรมชาติ และที่ผ่านการเผาที่ทุกอุณหภูมิได้ ดังนั้นจึงจะทำการนำสเปกตรัมของเทคนิคอินฟราเรดและรามานมาทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเคโมเมทริกซ์ แต่พบว่าอินฟราเรดสเปกตรัมได้ผลการทดลองไม่ดีเนื่องจาก signal to noise ratio ต่ำ ดังนั้นงานวิจัยนี้จะใช้แสดงเฉพาะผลของรามานสเปกตรัมซึ่งมีมี sensitivity ดีกว่านำมาแสดงในหัวข้อต่อไป



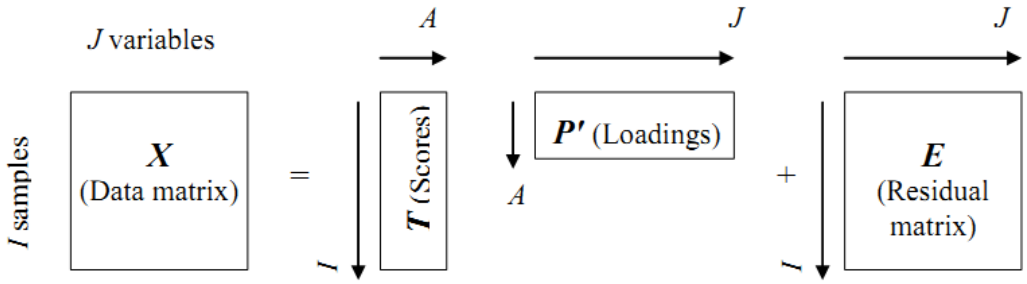
รูปที่ 3.29 รามานสเปกตรัมของแทนซาไนท์ก่อนและหลังการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C

3.5 การใช้หลักการทางเคโมเมทริกซ์ในการแยกกลุ่มของพลอย

ในปัจจุบันเครื่องมือ อุปกรณ์ เครื่องมือ และเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ได้มีการพัฒนาอย่างรวดเร็ว ซึ่งทำให้โอกาสสำหรับนักเคมีในการวิเคราะห์ระบบทางเคมีที่มีความสลับซับซ้อนมากสามารถทำได้อย่างสะดวกยิ่งขึ้น หรือที่เรียกกันว่ายุคของ “เคมีวิเคราะห์ยุคใหม่ (Modern Analytical Chemistry)” พื้นฐานในการวิเคราะห์ทางเคมีที่มีความซับซ้อนสูงคือการออกแบบการทดลองที่มีประสิทธิภาพ เพื่อให้ได้ผลการทดลองที่ดี ชัดเจนและตรงประเด็นกับปัจจัยที่ทำการศึกษา อย่างไรก็ตามในการวิเคราะห์ระบบทางเคมีที่ซับซ้อนสูงนี้จำเป็นต้องทำการทดลองจำนวนมาก เพื่อให้ได้ข้อมูลทางเคมีที่เพียงพอสำหรับใช้ในการวิเคราะห์และอธิบายระบบนั้นๆ การทดลองจำนวนมากนี้ได้ก่อให้เกิดปัญหาสำคัญในการแปลผลการทดลองเนื่องจากมนุษย์มีข้อจำกัดในการแปลข้อมูลที่มีจำนวนมาก และไม่สามารถกระทำได้ภายในเวลาเดียวกัน ทำให้เกิดความจำเป็นในการจัดเก็บข้อมูลและการพัฒนาหลักการทางสถิติหรือคณิตศาสตร์เข้ามาช่วยจัดรูปแบบข้อมูลอัตโนมัติให้ง่ายต่อการวิเคราะห์และทำให้การวิเคราะห์มีความสะดวกมากขึ้น ด้วยเหตุนี้คงปฏิเสธไม่ได้ว่าคอมพิวเตอร์นั้นเข้ามามีบทบาทอย่างมากในการวิเคราะห์ข้อมูลทางเคมีในปัจจุบันไม่ว่าข้อมูลเหล่านั้นจะอยู่ในรูปแบบของตัวเลขหรือสเปกตรัม นักเคมีจึงมีความจำเป็นที่จะต้องมีความรู้ในการจัดการและแปลความหมายข้อมูลเหล่านี้อย่างมีประสิทธิภาพ กระบวนการวิเคราะห์ข้อมูลทางเคมีสามารถทำให้ง่ายขึ้นโดยการผสมผสานความสามารถในการคำนวณของเครื่องคอมพิวเตอร์กับกระบวนการแปลผลโดยใช้หลักการทางสถิติและคณิตศาสตร์ให้อยู่ในรูปแบบที่สามารถอธิบายสมบัติทางกายภาพเชิงลึกได้ ทำให้เกิดการพัฒนาศาสตร์แขนงใหม่ที่เรียกว่า “เคโมเมทริกซ์ (Chemometrics) ” ซึ่งเป็นเทคนิคในการจัดการข้อมูลแบบอัตโนมัติเพื่อให้อยู่ในรูปแบบที่ง่ายต่อการวิเคราะห์ผลการทดลองจำนวนมาก เพื่อจัดการจำแนก จัดเก็บ แปลความหมายและทำนายผลการทดลองของสารตัวอย่างได้

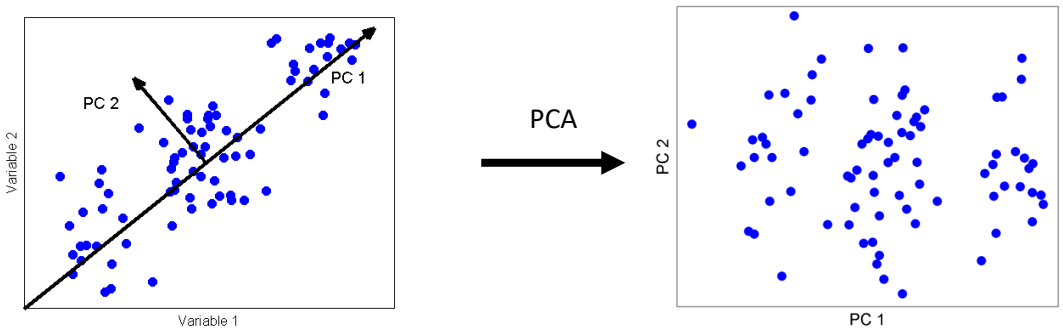
Principal Component Analysis (PCA)

เทคนิคนี้เป็นเทคนิคที่ได้รับความนิยมสูงสุดในการแปลงและแสดงผลของการทดลองให้อยู่ในรูปแบบที่ง่ายต่อการสรุปและอภิปรายผล โดยมีชื่อภาษาไทยว่า การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก หลักการของ PCA นั้นคือการเปลี่ยนแปลงตัวแปรในการทดลองให้อยู่ในรูปของตัวแปรสมมติ (latent variable) หรือเรียกอีกชื่อหนึ่งว่า Principle Component (PC) ซึ่งตัวแปรดังกล่าวเกิดจากสมการเชิงเส้นของตัวแปรที่ได้ในการทดลอง ถือเป็นเทคนิคหนึ่งในการลดจำนวนตัวแปรของการทดลองเพื่อให้ง่ายต่อการวิเคราะห์มากขึ้น อีกทั้งตัวเปรสมมติ (PC) เหล่านี้จะมีความเป็นอิสระต่อกัน (Orthogonal) คือไม่มีความสัมพันธ์กันนั่นเอง จะทำให้มีความสะดวกในการวิเคราะห์ข้อมูล เมื่อเทียบกับการวิเคราะห์โดยตรงจากตัวแปรอิสระปกติซึ่งมีความสัมพันธ์ซึ่งกันและกัน (Correlation) แม้ว่าตัวแปรสมมติจะช่วยในการวิเคราะห์ข้อมูลผลการทดลองในเชิงคุณภาพได้เป็นอย่างดีเพื่อบ่งบอกถึงความเหมือนและความแตกต่างกันของกลุ่มข้อมูล แต่จะไม่มีความหมายในทางกายภาพ สำหรับเทคนิค PCA นี้จะทำการแยกตัวแปรของข้อมูลปกติ ($\boldsymbol{X}$) โดยสมมติว่ามีจำนวนข้อมูลเป็น I ตัวอย่างของพลอย × J ค่าของ wavenumber เมื่อผ่านเทคนิค PCA แล้วจะสามารถแยกข้อมูลปกติออกเป็นสองข้อมูลย่อยที่มีชื่อว่าสกอร์ (Scores, T) และโหลดดิ้ง (Loading, P) ดังสมการ $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{T}\,\boldsymbol{P} + \boldsymbol{E}$ โดยมีขนาดและมิติดังรูปที่ 3.30

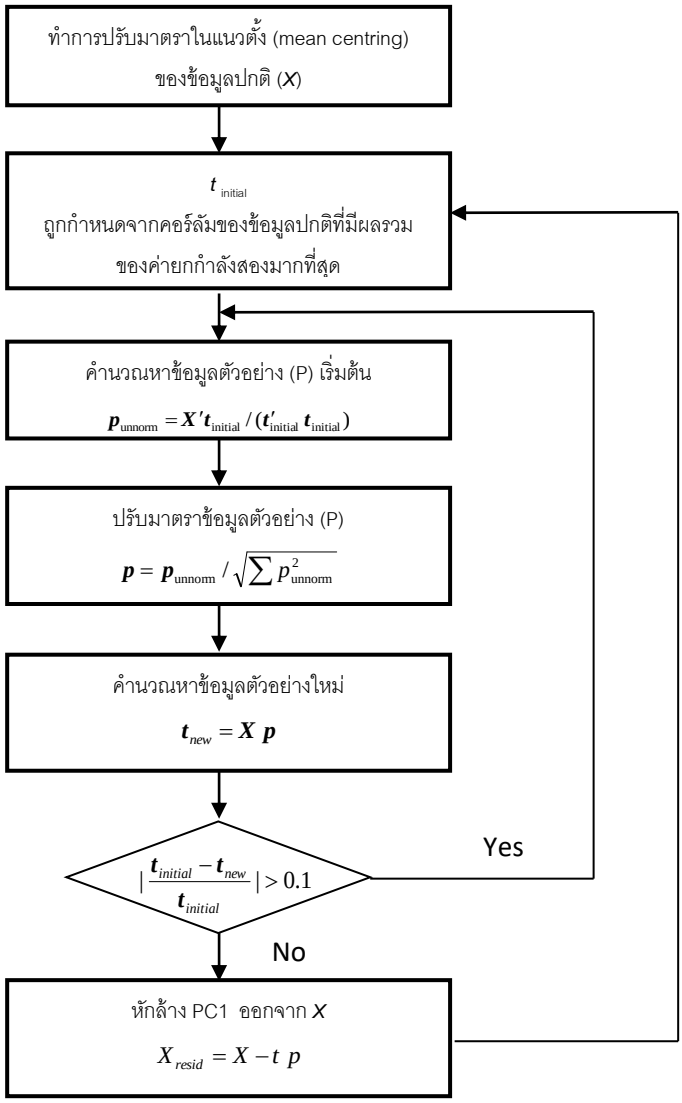


รูปที่ 3.30 รูปแสดงการแยกตัวประกอบของข้อมูลปกติ (X) ด้วยเทคนิค PCA เป็นสกอร์ (T) และโหลดดิ้ง (P)

เทคนิค PCA จะศึกษาความแปรผันของข้อมูล (variation) ในแต่ละชุดเทียบกับจุดกำเนิด ซึ่งอาจเป็นค่าเฉลี่ยของข้อมูลทั้งหมด ซึ่งโดยปกติ PC แรกนั้นจะให้ค่าความแปรผัน (Eigenvalue) ที่สูงที่สุดและค่าความแปรผันจะลดลงตามลำดับของ PC โดยถ้าความแปรผันนั้นไม่ได้เทียบกับจุดกำเนิดจะทำให้ PC ที่ได้จากข้อมูลมีลำดับของความแปรผันผิดเพี้ยนและไม่ถูกต้อง เพราะฉะนั้นการปรับมาตราในแนวตั้ง โดยเฉพาะการทำ Mean centring ของข้อมูลเริ่มต้นจึงมีความสำคัญอย่างมากก่อนที่จะนำเอาข้อมูลนั้นมาทำการคำนวณด้วยเทคนิค PCA สำหรับตัวอย่างการแสดงภาพ PC นั้นแสดงในรูปที่ 3.31



รูปที่ 3.31 (ซ้าย) ข้อมูลปกติ (ขวา) ข้อมูลตัวอย่างจากเทคนิค PCA



รูปที่ 3.32 แผนภาพการคำนวณ PCA

มีวิธีการคำนวณอยู่ด้วยกันหลายวิธีสำหรับเทคนิค PCA อย่างไรก็ตามการคำนวณด้วยวิธีต่าง ๆ เหล่านี้จะให้ผลลัพธ์ที่เป็นข้อมูลตัวอย่าง (Score) และข้อมูลตัวแปร (Loading) ที่เหมือนกัน ซึ่งวิธีที่นิยมใช้เป็นอย่างมากได้แก่ Non-linear Iterative Partials Least Squares (NIPALS) และ Singular Value Decomposition (SVD) โดยที่วิธี NIPALS จะเป็นวิธีที่คำนวณ PC ทีละ 1 PC ไปจนกระทั่งถึงจำนวน PC ที่กำหนด วิธีดังกล่าวนั้นเราสามารถที่จะควบคุมจำนวนของ PC ได้ ซึ่งถือเป็นการลดระยะเวลาในการคำนวณในขณะที่เทคนิค SVD เป็นวิธีที่จะคำนวณ PC ทั้งหมดของข้อมูลในเวลาเดียวกัน ซึ่งจะเป็นการยากในการควบคุมจำนวน PC และเสียเวลาในการคำนวณมาก โดยเฉพาะข้อมูลทางสเปกตรัมที่มีตัวแปรอิสระในข้อมูลปกติจำนวนมาก เพราะฉะนั้นในจะนำเสนอแต่เพียง NIPALS เท่านั้น โดยมีวิธีการคำนวณดังแสดงในแผนภาพข้างต้นในรูปที่ 3.32

จากเทคนิค PCA นั้น เราจะได้ PC แรกที่มีค่าความสำคัญมากที่สุดที่แสดงถึงอิทธิพลขององค์ประกอบหลักในข้อมูลปกติ และ PC ต่อ ๆ ไปจะมีความสำคัญน้อยลง ซึ่งแสดงถึงองค์ประกอบหลักลำดับย่อยลงมา เพราะฉะนั้น PC หลัง ๆ จึงมีค่าความสำคัญ (%variance) ที่น้อย ซึ่งแสดงถึงข้อมูลอิสระ (noise) ที่มาจากเครื่องมือ หรือค่าเบี่ยงเบนจากสภาวะในการทดลอง แต่ไม่ได้มาจากองค์ประกอบหลัก ซึ่งไม่ควรนำมาพิจารณา

T-statistics

เป็นเทคนิคพื้นฐานในการคัดเลือกตัวแปรที่มีประสิทธิภาพในการแยกกลุ่มของข้อมูล แต่จำกัดได้เพียงข้อมูลที่มี 2 กลุ่มเท่านั้น ขอยกตัวอย่างเป็นกลุ่ม A และ B โดยมีพื้นฐานในการพิจารณาความแตกต่างของค่าเฉลี่ยของข้อมูลในแต่ละกลุ่ม ($\bar{x}_A, \bar{x}_B$) และค่าการกระจายตัวในแต่ละกลุ่มพิจารณาจากค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (standard deviation s_A, s_B) โดยมีการคำนวณค่า t-statistic (t_j) ของตัวแปร j ดังนี้

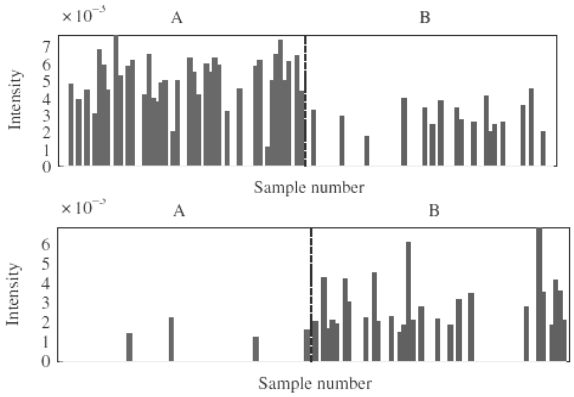
$$t_j = \frac{\bar{x}_A - \bar{x}_B}{S_j\sqrt{1/I_A + 1/I_B}}$$ โดยที่ I_A และ I_B คือจำนวนสมาชิกกลุ่ม A และ B ตามลำดับ

และ S คือ pooled standard deviation ระหว่างกลุ่ม A และ B โดยมีค่า

$$S_j = \sqrt{\frac{(I_A - 1)s_{j,A}^2 + (I_B - 1)s_{j,B}^2}{(I_A + I_B - 2)}}$$

โดยความสำคัญของตัวแปรที่คัดเลือกด้วย t-statistics จะพิจารณาจากค่า magnitude หรือค่าสัมบูรณ์ โดยที่ตัวแปรใดมี magnitude สูงสุด จะถูกพิจารณาว่ามีประสิทธิภาพสูงสุดในการจำแนกกลุ่มตัวอย่างหรือมี ranking =1 นอกจากนั้นเครื่องหมายยังมีความหมายในเชิงปริมาณ โดยจากสมการข้างต้นถ้าได้ค่า t-statistic เป็น + แสดงถึงปริมาณการกระจายตัวของข้อมูลในตัวแปร j มีค่า

มากกว่าในกลุ่ม A ในขณะที่ถ้าได้ค่าเป็น – จะแสดงถึงปริมาณการกระจายตัวของข้อมูลที่มากกว่าวาในกลุ่ม B ดังแสดงในรูปที่ 3.33



Positive t-statistic (+) Negative t-statistic (-)

รูปที่ 3.33 การกระจายตัวของข้อมูลในกลุ่ม A และ B โดยใช้สมการ $t_j = \frac{\bar{x}_A - \bar{x}_B}{S_j\sqrt{1/I_A + 1/I_B}}$

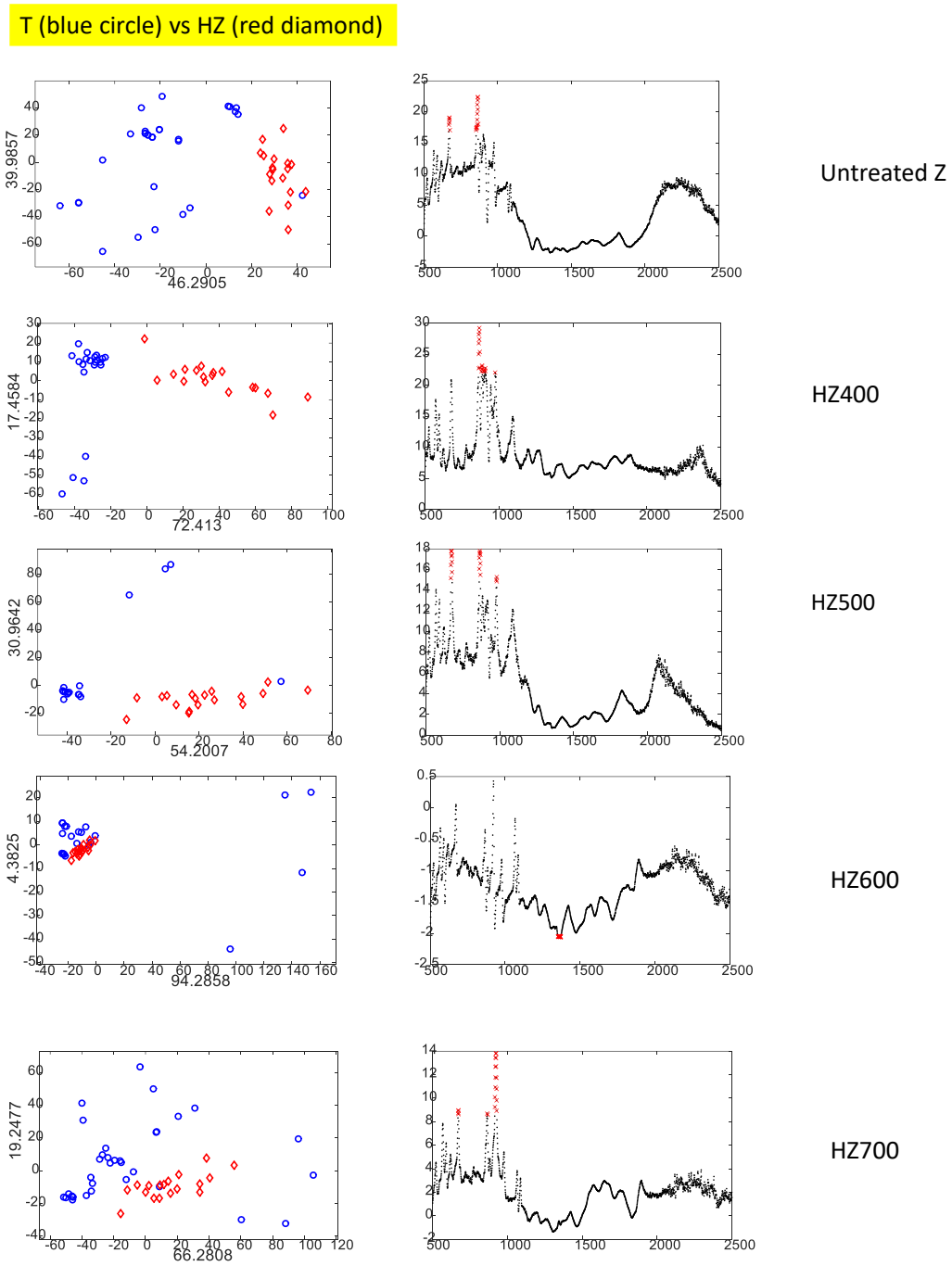
3.6 การจำแนกซอยไซท์ (zoisite) และแทนซาไนท์ (tanzanite) ด้วยเทคนิคเคโมเมทริกซ์

การตรวจวัดแทนซาไนท์และซอยไซท์ที่ผ่านการเผาในตอนนี้ ได้ทำการปรับปรุงคุณภาพด้วยการเผาไปจนถึง 700 °C เพื่อจะศึกษาว่าหาเผาที่อุณหภูมิสูงขึ้นอีกจะมีผลต่อการเปลี่ยนแปลงสเปกตรัมหรือไม่ (เนื่องจากโดยทั่วไปในท้องตลาดมีข้อมูลว่าการปรับปรุงสีซอยไซท์จะทำที่อุณหภูมิ 400-700 °C เท่านั้น)

3.6.1 การเปรียบเทียบแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงน้ำเงิน) เปรียบเทียบซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาลอมเหลือง) และซอยไซท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (สีม่วงน้ำเงิน)

การตรวจวัดพลอยประเภทแทนซาไนท์ธรรมชาติ (T) เปรียบเทียบซอยไซท์ธรรมชาติ (Z) และซอยไซท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (HZ) ในระหว่าง 400 – 700 °C (HZ400 – HZ700) ด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี แล้วนำเอาสเปกตรัมที่ได้ไปทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ดังรูปที่ 3.34 เมื่อพิจารณาจากค่าของ score ที่ได้จากแต่ละตัวอย่างจะพบว่าสามารถแยกกลุ่มตัวอย่างของแทนซาไนท์ออกจากซอยไซท์ได้แม้ว่าจะเป็นการเทียบกับซอยไซท์ที่ผ่านการให้ความร้อนมาแล้ว โดยเมื่อพิจารณาจากค่า t-value แล้วจะพบว่า ซอยไซท์ธรรมชาติจะพบความแตกต่างที่ช่วง 750, และ 805 cm^{-1} ดังที่แสดงไว้ดังกากบาทสีแดงในรูป 3.34 ด้านขวาของ Untreated Z ซึ่งเป็นช่วงที่บ่งบอกถึง Si-O-Si symmetric stretching ของ silicate ของโครงสร้างหลัก (กากบาทสีแดง แสดงจุดที่มีความแตกต่างระหว่าง 2 กลุ่มที่ศึกษามากที่สุด แต่ไม่สามารถบอกได้ว่าอันไหนมากกว่าอันไหน) แต่เมื่อเปรียบเทียบกับซอยไซท์ที่ผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 400 °C (HZ400) จะพบความแตกต่างที่ 980 cm^{-1} เป็นช่วงที่บ่งบอกถึงการสั่นของ Si-O-V และเมื่อเผาที่อุณหภูมิ 500 °C (HZ500) จะพบความแตกต่างที่ ช่วง 750, 805 และ 980 cm^{-1} เป็นช่วง

ที่บ่งบอกถึงการสั่นของ Si-O-Si symmetric stretching ของ silicate และ Si-O-V เมื่อเผาที่อุณหภูมิ 600 °C (HZ600) จะพบความแตกต่างที่ 1350 cm^{-1} เป็นช่วงที่บ่งบอกถึงการเปลี่ยนแปลงของ Luminescence of Nd^{3+} ที่พบในแทนซาไนท์ และเมื่อเผาที่อุณหภูมิ 700 °C (HZ700) จะพบความแตกต่างที่ ช่วง 750, 805 และ 980 cm^{-1} เป็นช่วงที่บ่งบอกถึงการสั่นของ Si-O-Si symmetric stretching ของ silicate และ Si-O-V เช่นเดียวกับการเผาที่อุณหภูมิ 500 °C ซึ่งผลการทดลองนี้สามารถถือบอกความแตกต่างของลักษณะเฉพาะของแทนซาไนท์ธรรมชาติและซอยไซท์ธรรมชาติและซอยไซท์ที่ผ่านการเผาที่ทุกอุณหภูมิได้ โดยตำแหน่งที่พบการเปลี่ยนแปลงหรือความแตกต่างนี้สัมพันธ์กับการเปลี่ยนสีของซอยไซท์และแทนซาไนท์ที่พบการเปลี่ยนแปลงของ V ที่วิเคราะห์ได้จากยูวีวิสซิเบิลสเปกตรัม

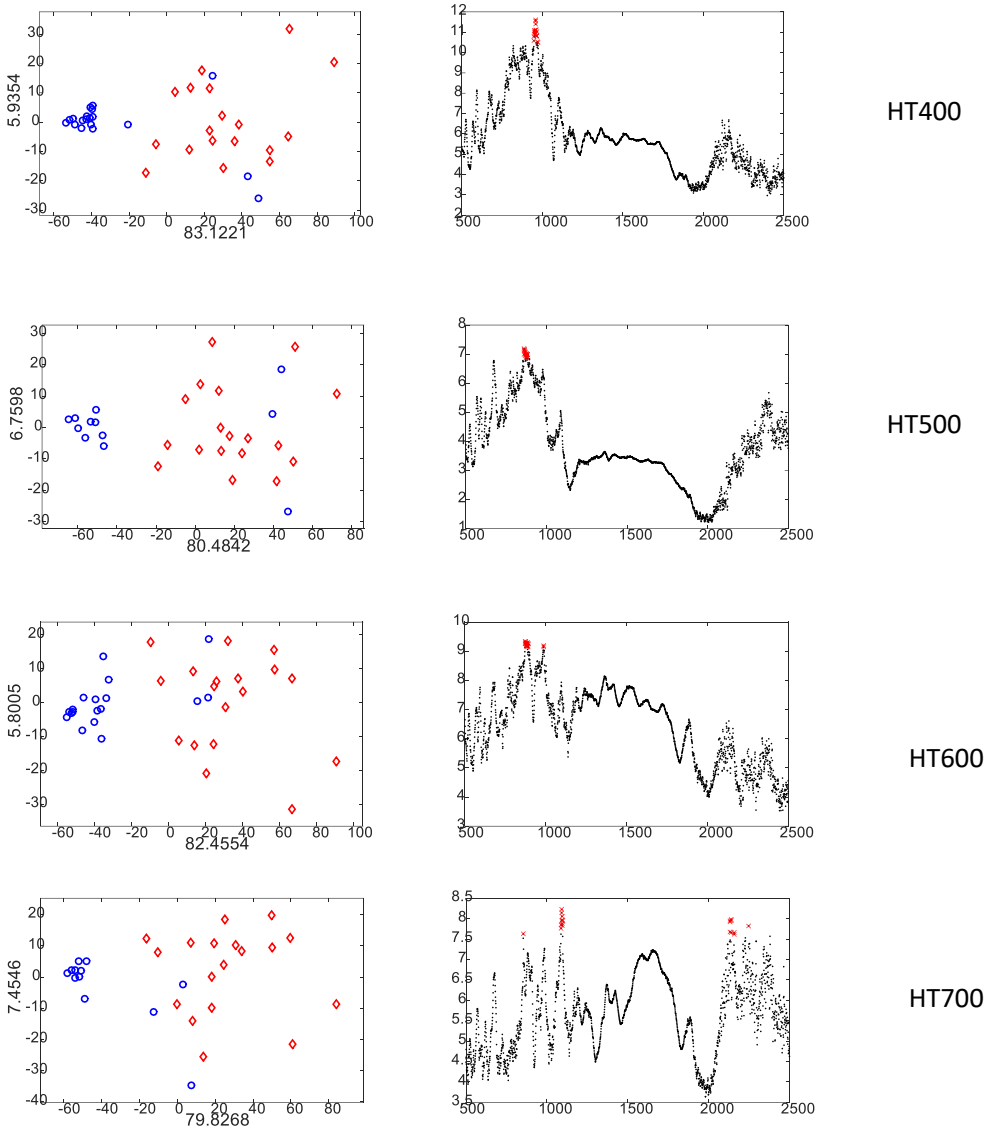


รูปที่ 3.34 (ซ้าย) แสดงถึงค่า score ของแทนซาไนท์ (สีน้ำเงิน) และซอยไซท์ (สีแดง) และ (ขวา) แสดงค่า t-value ของแต่ละ wavenumber โดย wavenumber ที่แยกความเป็นลักษณะเฉพาะของพลอยทั้งสองชนิดได้จะถูกแทนด้วยสัญลักษณ์สีแดง

3.6.2 การเปรียบเทียบแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีม่วงน้ำเงิน) เปรียบเทียบกับแทนซาไนท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (สีม่วงน้ำเงิน-น้ำเงินอมม่วง)

จากการตรวจวัดพลอยประเภทแทนซาไนท์ (T) เปรียบเทียบแทนซาไนท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (HT) ในระหว่าง 400 – 700°C (HT400 - HT700) ด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโคปี จากนั้นนำเอาสเปกตรัมที่ได้ไปทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ดังรูปที่ **3.35** เมื่อพิจารณาจากค่าของ score ที่ได้จากแต่ละตัวอย่างจะพบว่าสามารถแยกกลุ่มตัวอย่างของแทนซาไนท์ออกจากแทนซาไนท์ ที่ผ่านการให้ความร้อนมาแล้ว โดยเมื่อพิจารณาจากค่า t-value แล้วจะพบว่า เมื่อแทนซาไนท์ผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 400-500 °C จะพบความแตกต่างที่ช่วง 980 cm^{-1} ดังที่แสดงไว้ดังกากบาทสีแดงในรูป 3.35 ด้านขวา ของ HT400 และ HT500 ซึ่งเป็นช่วงที่บ่งบอกถึง Si-O-V or Si-O stretching (silicates) และ Si-O-Si asymmetric stretch ของโครงสร้างหลัก เมื่อพิจารณาแทนซาไนท์ผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 600 °C จะพบความแตกต่างที่ช่วง 980 และ 1050 cm^{-1} ดังที่แสดงไว้ดังกากบาทสีแดงในรูป HT600 ซึ่งเป็นช่วงที่บ่งบอกถึง Si-O-V or Si-O stretching (silicates) และ Si-O-Si asymmetric stretch ของโครงสร้างหลัก แต่เมื่อเผาที่อุณหภูมิ 700 °C จะพบความแตกต่างเพิ่มขึ้น ที่ตำแหน่ง 2100 และ 2300 cm^{-1} ด้วย ซึ่งเป็นตำแหน่งที่สัมพันธ์กับ SiH_2 และ N_2 ซึ่งมักพบในตำหนิ (inclusion) ในแทนซาไนท์ ตามลำดับ ซึ่งผลการวิเคราะห์ทั้งหมดนี้แสดงให้เห็นว่าเมื่อแทนซาไนท์ผ่านการเผาที่อุณหภูมิสูงขึ้นจะพบความแตกต่างของลักษณะเฉพาะของสเปกตรัมของแทนซาไนท์ธรรมชาติและแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาได้มากขึ้น

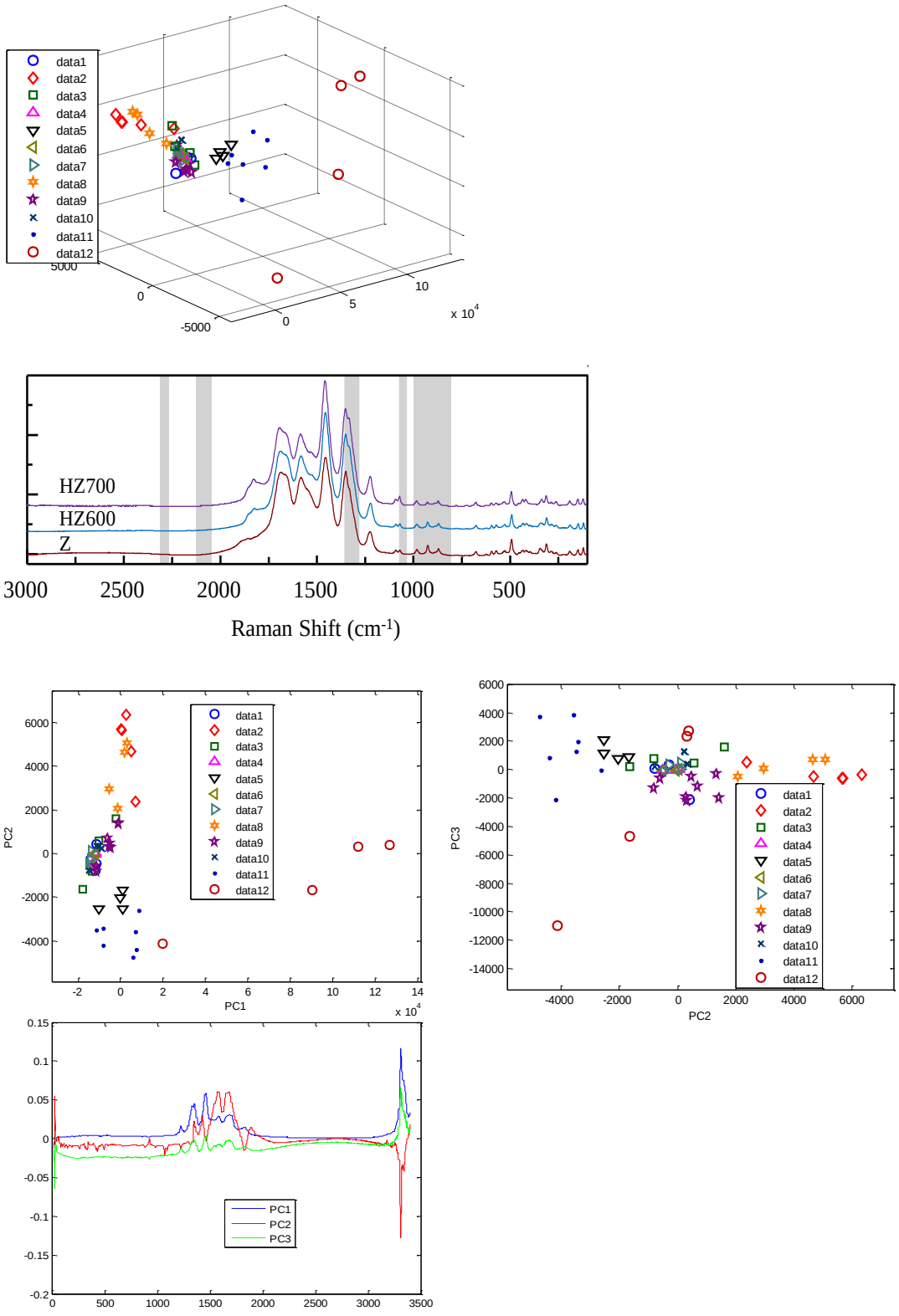
T (blue circle) vs HT (red diamond)



รูปที่ 3.35 (ซ้าย) แสดงถึงค่า score ของแทนซาไนท์ (สีน้ำเงิน) และแทนซาไนท์ที่ผ่านการให้ความร้อน (สีแดง) และ (ขวา) แสดงค่า t-value ของแต่ละ wavenumber โดย wavenumber ที่แยกความเป็นลักษณะเฉพาะของพลอยทั้งสองชนิดได้จะถูกแทนด้วยสัญลักษณ์สีแดง

3.6.3 การจำแนกซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาล) และซอยไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน - น้ำเงินอมม่วง) ที่ผ่านการเผา

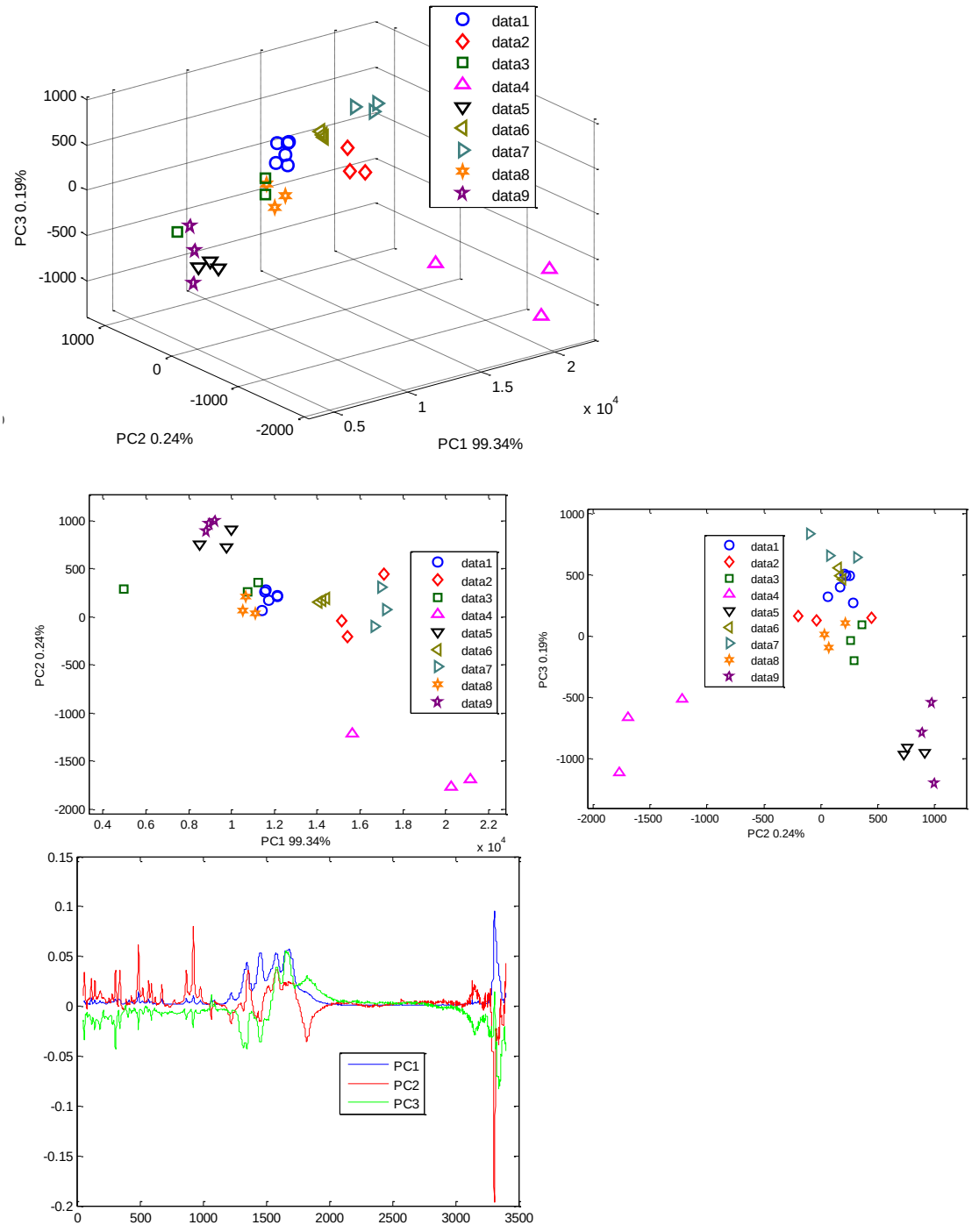
จากการตรวจวัดพลอยประเภทซอยไซท์ธรรมชาติเปรียบเทียบซอยไซท์ที่ผ่านการให้ความร้อนในระหว่าง 400 – 700 °C ด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโคปี โดยสเปกตรัมจะแบ่งเป็น Data 1-6 ซอยไซท์ธรรมชาติ Data 7 คือ ซอยไซท์ที่เผาที่ 400 องศา Data 8 คือ ซอยไซท์ที่เผา 500 องศา Data 9, 10 คือ ซอยไซท์ที่เผา 600 องศา Data 11-12 คือ ซอยไซท์ที่เผาที่ 700 องศาเซลเซียส จากนั้นนำเอาสเปกตรัมที่ได้ไปทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ดัง รูปที่ 3.36 เมื่อพิจารณาจากค่าของ score ที่ได้จากแต่ละตัวอย่างจะพบว่าสามารถแยกกลุ่มตัวอย่างของซอยไซท์ธรรมชาติไม่สามารถแยกออกจากซอยไซท์ที่เผาในอุณหภูมิต่ำกว่า 600 องศาเซลเซียสได้ อาจเนื่องมาจากองค์ประกอบทางเคมีนั้นยังไม่เปลี่ยนไป แต่เมื่อนำซอยไซท์ไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 600 องศา เป็นต้นไปนั้นจะทำให้สัดส่วนขององค์ประกอบทางเคมีนั้นเปลี่ยนแปลงไป จึงทำให้จาก score plot นั้นซอยไซท์ที่เผาที่อุณหภูมิ 600-700 องศานั้นแยกออกจากซอยไซท์ธรรมชาติ อย่างชัดเจน (จุดสีส้ม เป็นของ 600 แยกด้วย PC2 ที่เป็นค่าบวก สีน้ำเงินเล็กและวงกลมแดงเป็น 700 แยกด้วย PC2 ด้านลบ)



รูปที่ 3.36 การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ในการจำแนกซอยไซท์ธรรมชาติ (สีน้ำตาล) และซอยไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน - น้ำเงินอมม่วง) ที่ผ่านการเผา

3.6.4 การจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีน้ำเงิน) และแทนซาไนท์ (สีน้ำเงินสด) ที่ผ่านการเผา

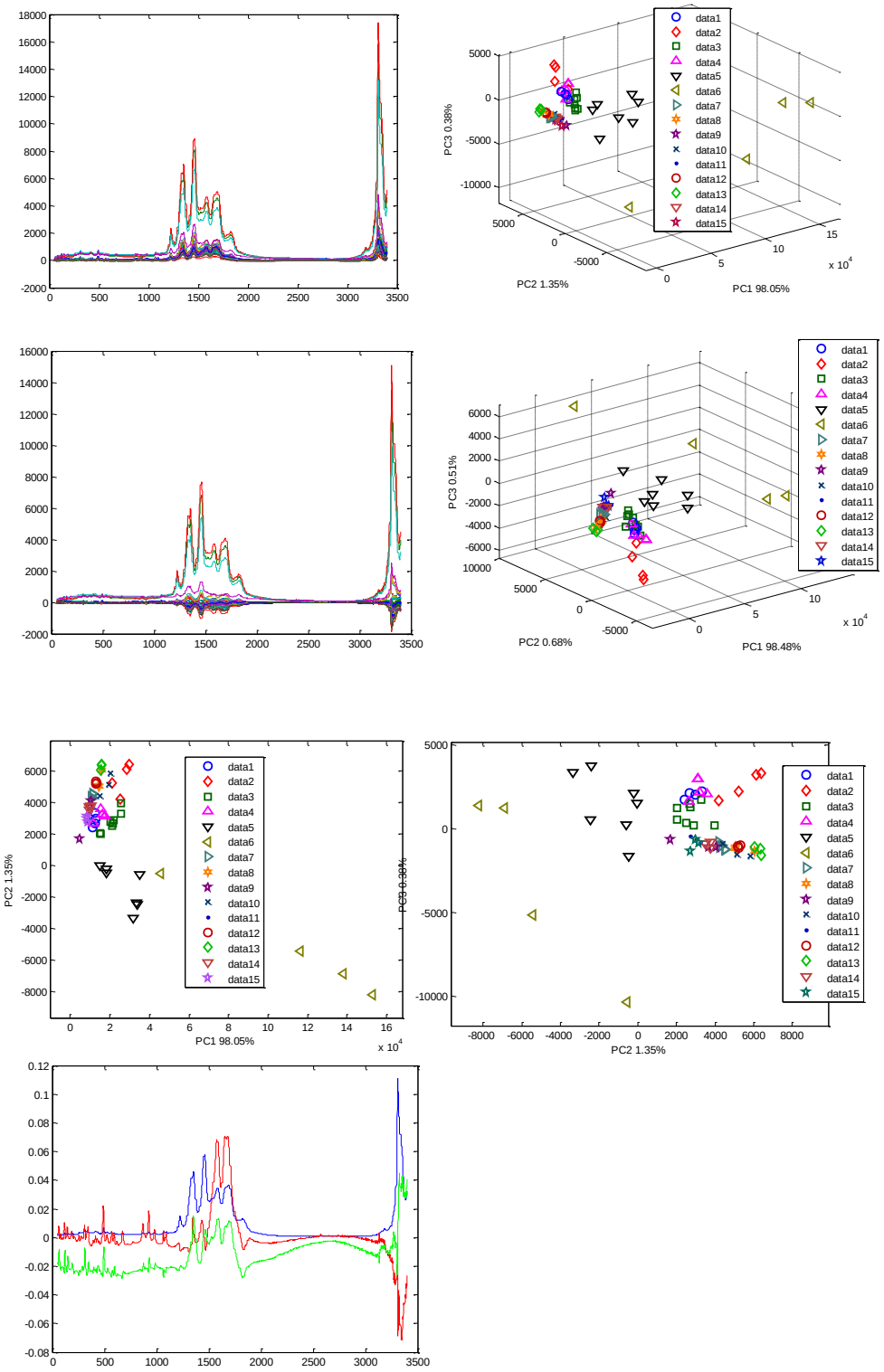
จากการตรวจวัดพลอยประเภทแทนซาไนท์ธรรมชาติเปรียบเทียบแทนซาไนท์ที่ผ่านการให้ความร้อนในระหว่าง 400 – 700 °C ด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโคปี โดยสเปกตรัมจะแบ่งเป็น Data 1-5 แทนซาไนท์ธรรมชาติ Data 6 -9 คือแทนซาไนท์ที่เผาที่ 400 – 700 องศาเซลเซียส ตามลำดับ จากนั้นนำเอาสเปกตรัมที่ได้ไปทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ดังรูปที่ 3.37เมื่อพิจารณาจากค่าของ score ที่ได้จากแต่ละตัวอย่างจะพบว่าสามารถแยกกลุ่มตัวอย่างของแทนซาไนท์ธรรมชาติและแทนซาไนท์ที่เผาได้อย่างชัดเจน อาจเนื่องมาจากองค์ประกอบทางเคมีที่เปลี่ยนไปในช่วง ช่วง 1300-1800 (PC1) ช่วง 200-1000 (PC2) ช่วง 1800-2000 (PC3) ซึ่งแสดงถึงองค์ประกอบทางเคมี ดังนี้ คือ ช่วง 200-1000 (PC2) คือโครงสร้างหลักของซอยไซท์ ได้แก่การสั่นของ $CaCO_3$ (calcite), Si-O-Si และ Al-O, Al-O-V, Si-O-V และ Si-O stretching (silicates) ไม่แยกชัดเจน แสดงว่าการเผาไม่ได้ทำให้โครงสร้างทางเคมีบริเวณนี้แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ การเผาที่ อุณหภูมิ 600°C สามารถแยกความแตกต่างได้ด้วยช่วง 1300-1800 (PC1) ซึ่งสัมพันธ์กับการเกิด Luminescence of Nd^{3+} และ Cr^{3+} แสดงว่าถ้าสเปกตรัมในส่วนนี้ต่างกันคืออาจผ่านการเผาที่อุณหภูมิ 600 °C ช่วง 1800-2000 (PC3) สัมพันธ์กับตำหนิภายในซอยไซท์และแทนซาไนท์ ประเภท H_2S, N_2 และ methane หรือ Unknown REE ซึ่งแยกได้จากจากการเผาที่อุณหภูมิ 700 °C หรืออาจใช้บริเวณนี้เป็นตัวบ่งชี้ได้ว่าแทนซาไนท์นั้นผ่านการเผามา



รูปที่ 3.37 การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ในการจำแนกแทนซาไนท์ธรรมชาติ (สีน้ำเงิน) และแทนซาไนท์ (สีน้ำเงินสด) ที่ผ่านการเผา

3.6.5 การจำแนกซอยไซท์ที่ผ่านการเผา (สีม่วงอมน้ำเงิน) กับแทนซาไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน) ทั้งธรรมชาติและผ่านการเผา

วัตถุประสงค์คือ แค่ต้องการแยกซอยไซท์ที่เผาได้ฟ้า (1-6) ออกจากแทนซาไนทท์ธรรมชาติทั้งที่ไม่เผา (7-11) และที่เผาที่อุณหภูมิต่างๆ (12-15) จากการตรวจวัดพลอยประเภทซอยไซท์ที่ผ่านการเผาให้ได้ม่วงน้ำเงินทุกอุณหภูมิที่ศึกษาคือ 400 – 700 °C เปรียบเทียบกับแทนซาไนท์ธรรมชาติสีม่วงน้ำเงินและแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาต่ำสีม่วงน้ำเงินหรือน้ำเงินอมม่วง โดยใช้อุณหภูมิ 400 – 700 °C ด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโคปี โดยสเปกตรัมจะแบ่งเป็น Data 1-6 ซอยไซท์ที่ผ่านการเผาให้ได้ม่วงน้ำเงิน Data 7 - 11 แทนซาไนท์ธรรมชาติ และ Data 12-15 คือแทนซาไนท์ที่เผาที่ 400 – 700 องศาเซลเซียส ตามลำดับ จากนั้นนำเอาสเปกตรัมที่ได้ไปทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ดังรูปที่ 3.38 เมื่อพิจารณาจากค่าของ score ที่ได้จากแต่ละตัวอย่างจะพบว่าสามารถแยกกลุ่มตัวอย่างของแทนซาไนท์ธรรมชาติและแทนซาไนท์ที่เผาได้อย่างชัดเจน อาจเนื่องมาจากองค์ประกอบทางเคมีที่เปลี่ยนไป ผลการวิเคราะห์ PCA พบว่า ค่าที่ได้ดูแยกกันเป็นกลุ่มชัดเจน แต่แค่แนวแกน PC2 และ PC3 ถ้าแยกกันตามแนวแกน PC2 จะมีความแตกต่างกันช่วง 1600-1800 cm^{-1} ซึ่งเป็นช่วงที่สัมพันธ์กับการเกิดLuminescence ของ Nd^{3+}



รูปที่ 3.38 การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักหรือ PCA ในการจำแนกซอยไซท์ที่ผ่านการเผา (สีม่วงอมน้ำเงิน) กับแทนซาไซท์ (สีม่วงอมน้ำเงิน) ทั้งธรรมชาติและผ่านการเผา

บทที่ 4
สรุปผลการวิจัย

4.1 สรุปผลการวิจัย

แทนซาไนท์คือพลอยตระกูลซอยไซท์ที่มีสีน้ำเงินอมม่วงถึงม่วงอมน้ำเงิน ซึ่งมีราคาสูงมากและหายาก ดังนั้นจึงมักมีการนำซอยไซท์สีน้ำตาลหรือน้ำตามอมเหลืองมาทำการปรับปรุงคุณภาพด้วยการให้ความร้อนหรือการเผา เพื่อทำให้เปลี่ยนสีเป็นสีน้ำเงินอมม่วงหรือม่วงอมน้ำเงิน เพื่อเป็นการเพิ่มมูลค่า แต่ยังไม่มีวิธีการจำแนกระหว่างแทนซาไนท์ธรรมชาติและแทนซาไนท์ที่มาจากการเผาได้ งานวิจัยนี้ได้ศึกษาการเผาซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองตั้งแต่อุณหภูมิ 400-700°C หลังการเผา ซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองเปลี่ยนสีเป็นสีม่วงอมน้ำเงินเช่นเดียวกับแทนซาไนท์ และทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปคโทรสโกปีเชิงโมเลกุลได้แก่ เทคนิคยูวีวิสซิเบิลสเปกโทรสโกปี เทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโคปี เทคนิคฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี และเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี และนำสเปกตรัมมาจำแนกหาความแตกต่างของซอยไซท์ที่ผ่านการเผากับแทนซาไนท์ธรรมชาติด้วยเทคนิคเคโมเมตริกซ์

การปรับปรุงคุณภาพซอยไซท์ด้วยสภาวะการเผาในงานวิจัยนี้ ทำให้ซอยไซท์สีน้ำตาลอมเหลืองเปลี่ยนสีเป็นสีม่วงอมน้ำเงินเช่นเดียวกับแทนซาไนท์ การเผาที่อุณหภูมิต่างกันจะได้สีต่างกันเล็กน้อย การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคยูวีวิสซิเบิลพบกว่าก่อนและหลังการเผาได้สเปกตรัมต่างกันคือมีการดูดกลืนของ VO^{2+} และ V^{3+} ลดลง ในขณะการดูดกลืนแสงของ V^{4+} เพิ่มขึ้น ซึ่งเป็นผลให้เห็นสีม่วงน้ำเงิน การวิเคราะห์ด้วยเทคนิค DRIFT อินฟราเรดสเปกตรัมสามารถบอกความแตกต่างของซอยไซท์และแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาได้บริเวณ 1100-800 cm^{-1} ที่สัมพันธ์กับการสั่นของพันธะ Si-O and Si-O-Al และที่ตำแหน่ง 650–700 cm^{-1} ที่สัมพันธ์กับการสั่นแบบงอ (bending) ของ Si-O-Si และ R-OH ในขณะที่การวิเคราะห์ด้วยเทคนิค KBr pellet ไม่พบความแตกต่าง การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคฟลูออเรสเซนต์พบการเปลี่ยนแปลงสเปกตรัมหลังเผาแต่ยังไม่สามารถจำแนกระหว่างพลอยเผาสองชนิดนี้ได้ และเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี พบการสั่นของตำแหน่งหลักของซอยไซท์และพบว่ามีการเกิด Luminescence ของธาตุ rare earth ในซอยไซท์และแทนซาไนท์ และได้ผลสเปกตรัมที่มีคุณภาพที่สามารถนำไปวิเคราะห์ต่อด้วยเทคนิคเคโมเมตริกซ์ ผลของการวิเคราะห์เคโมเมตริกซ์พบว่าสามารถจำแนกความแตกต่างของแทนซาไนท์ธรรมชาติและแทนซาไนท์ที่เผาช่วง 1600-1800 cm^{-1} ซึ่งเป็นช่วงที่สัมพันธ์กับการเกิด Luminescence ของ Nd^{3+} และความแตกต่างที่ ช่วง 750, 805 และ 980 cm^{-1} เป็นช่วงที่บ่งบอกถึงการสั่นของ Si-O-Si symmetric stretching ของ silicate และ Si-O-V แสดงให้เห็นว่าเทคนิคเคโมเมตริกซ์สามารถมีส่วนช่วยให้จำแนกแทนซาไนท์ที่มาจากซอยไซท์ที่ผ่านการเผา และแทนซาไนท์ธรรมชาติได้

4.2 ข้อจำกัดของงานวิจัยและข้อเสนอแนะเพื่อการวิจัยต่อในอนาคต

1. แทนซาไนท์และซอยไซท์เป็นพลอยที่มีราคาแพงและหายาก ทำให้ในงานวิจัยนี้ได้ตัวอย่างมาทดลองปริมาณน้อย ดังนั้นในการนำมาศึกษาต้องวางแผนงบประมาณ แผนการทดลองแต่ละ

เครื่องมืออย่างดีเพื่อไม่ให้ตัวอย่างเสียหาย และควรทำการทดลองเผาในช่วงอุณหภูมิกว้างกว่าที่ศึกษาในงานวิจัยนี้

2. การวิเคราะห์โดยการใช้เครื่องมือวิเคราะห์ขั้นสูงชนิดอื่นเพิ่มเติม โดยเฉพาะชนิดอะตอมมิคสเปกโทรสโกปีอาจได้ข้อมูลที่สนับสนุนการจำแนกพลอยมากขึ้น

4.3 การนำผลงานวิจัยไปใช้ประโยชน์

1. **ด้านเศรษฐกิจ/พาณิชย์** ผลงานวิจัยจากโครงการวิจัยนี้จะได้ข้อมูลของซอยไซท์และแทน-ซาไนท์ที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล (อินฟราเรด ยูวีวิสิเบิลเนียร์ไออาร์รามาน และฟลูออเรสเซนส์สเปกตรัม) และวิธีทางเคโมเมทริกซ์ในการประเมินชนิดแทนซาไนท์ ซึ่งใช้ประโยชน์เชิงพาณิชย์ในการจำแนกตัวอย่างแทนซาไนท์ธรรมชาติ และแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาเปลี่ยนสี ซึ่งสามารถนำไปใช้ร่วมกับการตรวจสอบในห้องปฏิบัติการอัญมณี เมื่อได้รับตัวอย่างมาวิเคราะห์จะสามารถจำแนกแทนซาไนท์และมีผลต่อการประเมินราคาในการตกลงซื้อขายอย่างมาก เพิ่มความน่าเชื่อถือในการซื้อขายอัญมณีในประเทศไทย ส่งเสริมการซื้อขายอย่างเป็นธรรม
2. **ด้านวิชาการ การเผยแพร่ในวารสาร** ผลวิจัยนี้ให้องค์ความรู้ใหม่ของการวิเคราะห์แทนซาไนท์ธรรมชาติและที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยการให้ความร้อนหรือการเผาด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล และองค์ความรู้ใหม่ในด้านวิธีในการจำแนกแทนซาไนท์ดังกล่าวด้วยเคโมเมทริกซ์ ซึ่งผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับแทนซาไนท์ยังมีไม่มากในระดับชาติและนานาชาติ อีกทั้งการจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาที่ให้ข้อมูลที่น่าเชื่อถือได้ยังไม่เคยมีผลการวิจัยออกมาก่อน ทำให้ผลงานวิจัยจะสามารถเผยแพร่ในวารสารวิชาการระดับชาติและนานาชาติได้ ทั้งวารสารทางด้านอัญมณี ด้านเทคนิคสเปกโทรสโกปีในการวิเคราะห์อัญมณี และด้านเคโมเมทริกซ์

4.4 Output/ Outcome

4.4.1 ผลงานตีพิมพ์ในวารสารวิชาการทั้งในระดับนานาชาติ

1. บทความวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ

P Thongnopkun* and P Chanwanitsakun. (2018). Effect of heat treatment on spectroscopic properties of tanzanite. *Journal of Physics: Conference Series,* **1144**, 012183. (วารสารวิจัยระดับนานาชาติ ในฐานข้อมูล SJR Q3 Impact Factor 2017 : 0.27)

2. ผลงานวิจัยนำเสนอโปสเตอร์ในงานสัมมนาวิชาการ The International Mineralogical Association 2018 ครั้งที่ 22 ณ เมืองเมลเบิร์น (Melbourne) ประเทศออสเตรเลีย (Australia) ระหว่างวันที่ 13 สิงหาคม พ.ศ.2561 ถึงวันที่ 17 สิงหาคม พ.ศ. 2561 ในหัวข้อ “Color improvement using heat treatment and characteristic spectra of brownish yellow zoisite” ซึ่งเป็นการประชุม เวทีระดับโลกที่จัดเพื่อแลกเปลี่ยนความรู้ในด้านที่เกี่ยวข้องกับธรณีวิทยา

อัญมณี และวัสดุศาสตร์ และการหาความร่วมมือในองค์กรภาครัฐและเอกชนของทั่วโลก จัดโดยสมาคมธรณีวิทยาแห่งประเทศออสเตรเลีย (the Geological Society of Australia)

4.4.2 ผลงานเชิงสาธารณะ

1. สเปกตรัมของแทนซาไนท์และซอยไซท์ จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเพื่อใช้บอกลักษณะและจำแนกระหว่างแทนซาไนท์ และซอยไซท์ที่เผาและไม่เผา
2. สภาวะการเผาเปลี่ยนสีซอยไซท์และแทนซาไนท์เพื่อการปรับปรุงคุณภาพสี
3. เทคนิคเคโมเมทริกซ์ในการจำแนกแทนซาไทน์และซอยไซท์ที่ผ่านการเผาปรับปรุงคุณภาพ ที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้กับการวิเคราะห์อัญมณีเชิงพาณิชย์ได้

4.5 ผลลัพธ์จากงานวิจัย

1. เทคนิคเคโมเมทริกซ์ในการจำแนกแทนซาไทน์และซอยไซท์ที่ผ่านการเผาปรับปรุงคุณภาพ ที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้กับการวิเคราะห์อัญมณีเชิงพาณิชย์ได้ และกระบวนการศึกษาและจำแนกพลอยชนิดนี้จะเป็นต้นแบบในการนำไปใช้กับอัญมณีชนิดอื่นๆ ต่อไปได้ หรือสามารถนำไปใช้ในการตรวจวิเคราะห์จำแนกอัญมณีในห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณีเพื่อเป็นต่อชุมชนท้องถิ่นในการซื้อขายอัญมณีได้
2. องค์ความรู้ด้านการเผาแทนซาไนท์และซอยไซท์เพื่อปรับปรุงสี และการวิเคราะห์แทนซาไทน์และซอยไซท์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล ซึ่งเป็นประโยชน์เชิงพาณิชย์และเชิงวิชาการในการนำไปอ้างอิงการวิเคราะห์อัญมณี
3. ผลงานวิจัยแสดงศักยภาพนักวิจัยไทยในการจำแนกอัญมณีด้วยเทคนิคเคโมเมทริกซ์ซึ่งยังไม่พบว่ามีการใช้เทคนิคนี้ในงานด้านอัญมณีศาสตร์
4. การพัฒนาศักยภาพนักวิจัยและพัฒนานักวิจัยรุ่นใหม่ทั้งอาจารย์และนิสิต

บรรณานุกรม

ABC stone (2015). *Tanzanite Gemstone*. Retrieved November 20, 2015, from http://www.gemstonescompany.com/tanzanite-gemstone.htm

Barot, N.R., Boehm, E.W. (1992). Gems-quality green zoisite. *Gems & Gemology, Spring*, 4-15.

Bocchio, R., Adamo, I., Bordoni, V., Caucia, F., Diella, V. (2012). Gem-quality zoisite from Merelani (Northeastern Tanzania): review and new data. *Periodico di Mineralogia, 81*, 3, 379-391.

Brereton R. (2009). *Chemometrics for Pattern Recognition*. John Wiley & Sons.

Brooker, R. P., Bell, C. J., Bonville, L. J., Kunz, H. R. and Fenton, J. M. (2015). Determining Vanadium Concentrations Using the UV-Vis Response Method*. J. Electrochem. Soc*. 162, A608–13.

Burns R.G. (1993). *Mineralogical Applications of Crystal Field Theory, 2nd ed. Cambridge Topics in Mineral Physics and Chemistry*, Vol. 5, Cambridge University Press, Cambridge, UK.

Derkaoui, I., Khenfouch, M., Elmokri, I., Mothudi, B. M., Dhlamini, M. S., Moloi, S. J., Zorkani, I., Joriol, A. and Maaza, M. (2017). Structural and optical properties of hydrothermally synthesized vanadium oxides nanobelts. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng*. 186, 012007.

Egkasit, S., and Thongnopkun, P. (2005). *Transflectance Spectra of Faceted Diamonds Acquired by Infrared Microscopy*. *Applied Spectroscopy. 59,* 1160-1165.

El-Abassay, R.M., Donfack, P., Materny, A. (2011). Discrimination between Arabica and Robusta green coffee using visible micro Raman spectroscopy and chemometric analysis. *Food Chemistry, 126,* 1443-1448.

Ferrer, N., Jogués-Carulla, J. M. (1996). Characterization Study of Cut Gem Diamond by IR Spectroscopy. *Diamond and Related Materials, 5*, 598-602.

Faye, G.H., Nickel E. H. (1971). On the pleochroism of vanadium-bearing zoisite from tanzania. *Can. Mineral*. 10, 812–821.

Fritsh, E., Stockton, C. M. (1987). Infrared Spectroscopy in Gem Identification. *Gems. & Gemology, Spring*, 18-26.

Hurlbut, C.S. Jr. (1969). Gems zoisite from Tanzania. *American mineralogist, 54,* 5-6, 702-709.

Javier-Ccallata, H., Watanabe S. (2013). Crystal field effect on EPR and optical absorption properties of natural green zoisite. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 104*, 505-511.

Jenkins, A. L., Larsen, R. A. (2004). Gemstone Identification Using Raman Spectroscopy. *Spectroscopy*, *19*, 20-25.

Jolyon & Katya Ralph (2015). *Zoistie.* Retrieved November 1, 2015, from http://www.gemdat.org/gem-4430.html

Kiefert, L. Schmidt S.Th. (1996). Some Tanzanite Imitation*. Gems Gemol*. 32, 270–276.

Koziarska, B. and Godlewski, M. (1994). Optical properties of zoisite. *Phys. Rev. B.* 50, 297–300.

Langer, K. and Raith, M. (1974). Infrared Spectra of Al-Fe(III)-Epidotes and Zoisites, $Ca_2(Al_{1-p}Fe_{3+p})$-$Al_2O(OH)[Si_2O_7]$-$[SiO_4]$. *Am. Mineral.* 59, 1249–58.

Langer, K., Lattard , D. (1980) Identification of a low-energy OH-valence vibration in zoisite. *American Mineralogist*, *65*, 779-783.

Makreski, P. and Jovanovski, G. (2009). Minerals from Macedonia XXIII. Spectroscopic and structural characterization of schorl and beryl cyclosilicates. *Spectrochim. Acta A.* 73, 460–67.

Olivier, B. (2006). *The geology and petrology of the Merelani tanzanite deposit, ne Tanzania*. (Doctor of Philosophy dissertation). Retrieved November 2, 20015, from http://scholar.sun.ac.za/handle/10019.1/1093

Reddy, S. L., Maheswaramma, L.K., Reddya, R.R., Reddy, A.V., Nakamurac, Y., Reddy B.J., Endoe, T., Frost, R.L. (2011). Electron paramagnetic resonance, NIR studies on zoisite, clinozoisite and chrom-zoisite minerals. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscope*, *78*, 1240-1244

Reis, N., Franca, A.S., Oliverira, L.S. (2013). Discrimination between roasted coffee, roasted corn and coffee husks by Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy. *LWT-Food Science and Technology, 50,* 715-722.

Schmetzer K. and Bank H. (1979). Bluish-green zoisite from Merelani, Tanzania. *Journal of Gemmology, 16*, 512-513.

Tanzanite. (2015) Retrieved November 20, 2015, from http://www.winnoijewelry.com/this-amazing-tanzanite

Tanzanite vs Shappire. (2015) Retrieved November 20, 2015, from http://sweetpics.site/t/tanzanite-vs-sapphire.html

Thongnopkun, P., Ekgasit, S. (2005). FTIR Spectra of Faceted Diamonds and Diamond Simulants. *Diamond and Relatated Materials, 14,* 1592-1599.

Tretyakova, L. I., Reshetnyak, N. B., Yu. Tretyakova, V. A., (1997). Combined Spectroscopic Method for Non-destructive Gem Identification. *Journal of Gemmology, 25,* 532-539.

Zoisite gems by colour (2549). Retrieved November 2, 2015. from http://www.gemdat.org/gem-4430.html

บทสรุปสาหรับผู้บริหาร
(Executive Summary)

ข้าพเจ้า รองศาสตราจารย์ ดร.พิมพ์ทอง ทองนพคุณ ได้รับทุนสนับสนุนโครงการวิจัย จาก มหาวิทยาลัยบูรพา ประเภทงบประมาณเงินรายได้ จากเงินอุดหนุนรัฐบาล (งบประมาณแผ่นดิน) มหาวิทยาลัยบูรพา โครงการวิจัยเรื่อง การพิสูจน์เอกลักษณ์พลอยแทนซาไนท์ที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนโดยเคโมเมทริกซ์และเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเพื่อประโยชน์เชิงพาณิชย์
(Characterization of Heated Tanzanites by Chemometrics and Molecular Spectroscopic Techniques for Commercial Application)

รหัสโครงการ 579402001617 สัญญาเลขที่ 55/2559
ได้รับงบประมาณรวมทั้งสิ้น 450,000 บาท (สี่แสนห้าหมื่นบาทถ้วน)
ระยะเวลาการดำเนินงาน 1 ปี (ระหว่างวัน 31 มีนาคม 2559 ถึง 31 มีนาคม 2560)

บทคัดย่อ

แทนซาไนท์คืออัญมณีที่มีชื่อเสียงมากชนิดหนึ่งในการค้าอัญมณี แทนซาไนท์มีสีน้ำเงินม่วงที่เป็นเอกลักษณ์เฉพาะตัว เป็นพลอยชนิดซอยไซท์ ประเภทแคลเซียมอะลูมิเนียมไฮดรอกโซโรซิลิเกตในกลุ่มอิพิโดท เนื่องจากแทนซาไนท์มีสีสวยและหายากในธรรมชาติ ดังนั้นแทนซาไนท์ส่วนใหญ่ที่พบในการค้าอัญมณีจะมาจากการปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนหรือการเผามาจากซอยไซท์เพื่อปรับปรุงสีให้ได้สีน้ำเงินถึงม่วง ณ เวลานี้ การปรับปรุงคุณภาพด้วยความร้อนในซอยไซท์และแทนซาไนท์ยังไม่สามารถตรวจพบได้ วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือการจำแนกซอยไซท์ที่มาจากการเผาให้ได้สีน้ำเงินกับแทนซาไนท์ธรรมชาติด้วยการวิเคราะห์ลักษณะทางสเปกโทรสโกปีและการวิเคราะห์ด้วยเคโมเมทริกซ์

งานวิจัยนี้ทำการปรับปรุงคุณภาพสีของแทนซาไนท์ธรรมชาติและซอยไซท์จากแทนซาเนียด้วยการเผาภายใต้สภาวะบรรยากาศที่อุณหภูมิ 400-700 องศาเซลเซียส สีของตัวอย่างซอยไซท์หลังเผาเปลี่ยนจากสีเหลืองอมน้ำตาลเป็นสีม่วงอมน้ำเงินภายใต้การเผาทุกอุณภูมิ การวิเคราะห์ตัวอย่างทั้งก่อนและหลังเผาจะวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือพื้นฐานในการวิเคราะห์อัญมณีและทำการเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงสีและความแตกต่างของสีด้วยการวัดสีระบบ CIELAB วิเคราะห์สาเหตุการเปลี่ยนสีและองค์ประกอบทางเคมีด้วยเทคนิคเอกซเรย์ฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปีแบบกระจายพลังงาน ยูวีวิสิเบิลสเปกโทรสโกปี ฟรูเรียร์ทรานสฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรสโกปี และรามานสเปกโทรสโกปี ผลการเปลี่ยนสีของตัวอย่างและคุณสมบัติของสเปกตรัมเป็นประโยชน์ต่อการปรับปรุงคุณภาพสีและการวิเคราะห์ตัวอย่างแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผา รามานสเปกตรัมสามารถนำมาใช้ร่วมกับการวิเคราะห์ด้วยเคโมเมทริกซ์ด้วยวิธี PCA ซึ่งให้ข้อมูลที่สัมพันธ์กับองค์ประกอบทางเคมีที่ใช้จำแนกความแตกต่างของซอยไซท์ที่ผ่านการเผาและแทนซาไนท์สีธรรมชาติได้

Output/ Outcome

ผลผลิตจากงานวิจัย

1. สเปกตรัมของแทนซาไนท์และซอยไซท์ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุลเพื่อใช้บอกลักษณะและจำแนกระหว่างแทนซาไนท์และซอยไซท์ที่เผาและไม่เผา

2. สภาวะการเผาเปลี่ยนสีซอยไซท์และแทนซาไนท์เพื่อการปรับปรุงคุณภาพสี
3. เทคนิคเคโมเมทริกซ์ในการจำแนกแทนซาไทน์และซอยไซท์ที่ผ่านการเผาปรับปรุงคุณภาพ ที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้กับการวิเคราะห์อัญมณีเชิงพาณิชย์ได้
4. บทความวิจัยตีพิมพ์ระดับนานาชาติ

   P Thongnopkun* and P Chanwanitsakun. (2018). Effect of heat treatment on spectroscopic properties of tanzanite. *Journal of Physics: Conference Series,* **1144**, 012183. (วารสารวิจัยระดับนานาชาติ ในฐานข้อมูล SJR Q3 Impact Factor 2017 : 0.27)
5. ผลงานวิจัยในงานสัมมนาวิชาการ The International Mineralogical Association 2018 ครั้งที่ 22 ณ เมืองเมลเบิร์น (Melbourne) ประเทศออสเตรเลีย (Australia) ระหว่างวันที่ 13 สิงหาคม พ.ศ.2561 ถึงวันที่ 17 สิงหาคม พ.ศ. 2561 ในหัวข้อ “Color improvement using heat treatment and characteristic spectra of brownish yellow zoisite” ซึ่งเป็นการประชุมเวทีระดับโลกที่จัดเพื่อแลกเปลี่ยนความรู้ในด้านที่เกี่ยวข้องกับธรณีวิทยา อัญมณี และวัสดุศาสตร์ และการหาความร่วมมือในองค์กรภาครัฐและเอกชนของทั่วโลก จัดโดยสมาคมธรณีวิทยาแห่งประเทศออสเตรเลีย (the Geological Society of Australia)

ผลลัพธ์จากงานวิจัย

1. เทคนิคเคโมเมทริกซ์ในการจำแนกแทนซาไทน์และซอยไซท์ที่ผ่านการเผาปรับปรุงคุณภาพ ที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้กับการวิเคราะห์อัญมณีเชิงพาณิชย์ได้ และกระบวนการศึกษาและจำแนกพลอยชนิดนี้จะเป็นต้นแบบในการนำไปใช้กับอัญมณีชนิดอื่นๆ ต่อไปได้ หรือสามารถนำไปใช้ในการตรวจวิเคราะห์จำแนกอัญมณีในห้องปฏิบัติการวิเคราะห์อัญมณีเพื่อเป็นต่อชุมชนท้องถิ่นในการซื้อขายอัญมณีได้
2. องค์ความรู้ด้านการเผาแทนซาไนท์และซอยไซท์เพื่อปรับปรุงสี และการวิเคราะห์แทนซาไทน์และซอยไซท์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล ซึ่งเป็นประโยชน์เชิงพาณิชย์และเชิงวิชาการในการนำไปอ้างอิงการวิเคราะห์อัญมณี
3. ผลงานวิจัยแสดงศักยภาพนักวิจัยไทยในการจำแนกอัญมณีด้วยเทคนิคเคโมเมทริกซ์ซึ่งยังไม่พบว่ามีการใช้เทคนิคนี้ในงานด้านอัญมณีศาสตร์
4. การพัฒนาศักยภาพนักวิจัยและพัฒนานักวิจัยรุ่นใหม่ทั้งอาจารย์และนิสิต

ข้อเสนอแนะ

การนำผลงานวิจัยไปใช้ประโยชน์

1. **ด้านเศรษฐกิจ/พาณิชย์** ผลงานวิจัยจากโครงการวิจัยนี้จะได้ข้อมูลฐานข้อมูลสเปกตรัม (Database spectra) ของแทนซาไนท์ที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเชิงโมเลกุล (อินฟราเรด ยูวีวิสิเบิลเนียร์ไออาร์ รามาน และฟลูออเรสเซนส์สเปกตรัม) และวิธีทางเคโมเมทริกซ์ในการประเมินชนิดแทนซาไนท์ ซึ่งใช้ประโยชน์เชิงพาณิชย์ในการจำแนกตัวอย่างแทนซาไนท์ธรรมชาติ และแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาเปลี่ยนสี ซึ่งสามารถนำไปใช้ร่วมกับการตรวจสอบในห้องปฏิบัติการอัญมณี เมื่อได้รับตัวอย่างมาวิเคราะห์จะสามารถจำแนกแทนซาไนท์และมีผลต่อการประเมินราคาในการตกลงซื้อขายอย่างมาก เพิ่มความน่าเชื่อถือในการซื้อขายอัญมณีในประเทศไทย ส่งเสริมการซื้อขายอย่างเป็นธรรม

2. **ด้านวิชาการ การเผยแพร่ในวารสาร** ผลวิจัยนี้ให้องค์ความรู้ใหม่ของการวิเคราะห์แทนซาไนท์ธรรมชาติและที่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพด้วยการให้ความร้อนหรือการเผาด้วยเทคนิคสเปก-โทรสโกปีเชิงโมเลกุลทั้ง 4 ชนิด และองค์ความรู้ใหม่ในด้านวิธีในการจำแนกแทนซาไนท์ดังกล่าวด้วยเคโมเมทริกซ์ ซึ่งผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับแทนซาไนท์ยังมีไม่มากในระดับชาติและนานาชาติ อีกทั้งการจำแนกแทนซาไนท์ที่ผ่านการเผาที่ให้ข้อมูลที่น่าเชื่อถือได้ยังไม่เคยมีผลการวิจัยออกมาก่อน ทำให้ผลงานวิจัยจะสามารถเผยแพร่ในวารสารวิชาการระดับนานาชาติได้

ข้อจำกัดของงานวิจัยและข้อเสนอแนะเพื่อการวิจัยต่อในอนาคต

1. แทนซาไนท์และซอยไซท์เป็นพลอยที่มีราคาแพงและหายาก ในการนำมาศึกษาต้องวางแผนการทดลองแต่ละเครื่องมืออย่างดีเพื่อไม่ให้ตัวอย่างเสียหาย และควรทำการทดลองเผาในช่วงอุณหภูมิกว้างกว่าที่ศึกษาในงานวิจัยนี้
2. การวิเคราะห์โดยการใช้เครื่องมือวิเคราะห์ขั้นสูงชนิดอื่นเพิ่มเติม โดยเฉพาะชนิดอะตอมมิคสเปกโทรสโกปีอาจได้ข้อมูลที่สนับสนุนการจำแนกพลอยมากขึ้น