บทที่ 4

การเปรียบเทียบผลการทดลองกับการคำนวณที่ได้จากทฤษฎี

ในบทนี้จะกล่าวถึงการนำทฤษฎีที่สำคัญบางทฤษฎีมาคำนวณค่า K ของวัสดุโพลีเมอร์(Polymer) เพื่อเป็นตัวอย่างพอสังเขป ซึ่งในความเป็นจริงแล้ว ปัจจุบันทฤษฎีต่าง ๆ ที่ใช้ในการคำนวณค่า K ยังมีความแม่นยำ ไม่เพียงพอ เมื่อเทียบกับผลการทดลอง และทฤษฎีส่วนใหญ่จะมีรากฐานมาจากการสังเกตพฤติกรรมเชิงความร้อนของเดอมาย (Debye) ในบทนี้จะกล่าวถึงการพัฒนาทางทฤษฎีและตัวอย่างการคำนวณเพื่อนำมาเปรียบเทียบกับผลการทดลองว่ามีค่าสอดคล้องกันแค่ไหน

4.1 สมการของเดอบาย[2](Debye's equation)

ทฤษฎีทั่วไปส่วนใหญ่ได้แสดงปรากฏการณ์เกี่ยวกับการนำความร้อนของวัสดุ โดยอาศัยความเข้าใจในลักษณะแบบจำลองของโฟนอน (Phonon Model) ขบวนการนี้พลังงานจะมีลักษณะเป็นกลุ่มหรือก้อน พลังงานนี้ผ่านระดับชั้นต่าง ๆ ด้วยความเร็วเท่าเสียง และพลังงานที่ผ่านไปจะเป็นสัดส่วนกับความหนาแน่นและความจุความร้อน สำหรับในผลึกของของแข็ง เช่น โพลีเมอร์ พฤติกรรมของโมเลกุลจะมีบทบาทในการกำหนดค่าพลังงานความร้อนที่ส่งผ่านไปในผลึก

จากสมการ (1.3.7) ในบทที่ 1 เขียนใหม่ตามเงื่อนไขของเดอบายได้ว่า

$$K = \Lambda c_v \rho u L \qquad (4.1.1)$$

เมื่อ K = สภาพการนำความร้อน, C_v = ความจุความร้อนเฉพาะเมื่อปริมาตรคงที่ ρ = ความหนาแน่น, u = ความเร็วของคลื่นเสียง, L = ระยะห่างเฉลี่ยระหว่างโมเลกุล, Λ = ค่าคงที่

ต่อมาในปีค.ศ. 1954-1956 คาร์ดอส (Kardos), สาเกียดิส (Sakiadis) และ เคาลีส (Coulis) ได้ปรับปรุงสมการใหม่กลายเป็น

$$K \approx c_p \rho u L \qquad (4.1.2)$$

4.2 <u>ฟังชั่นของความเร็วเสียงในโมล (Molar Sound Velocity function or The Rao function)</u>

Rama Rao ได้แสดงให้เห็นว่าสำหรับของเหลวประเภทของเหลวอินทรีย์ (Organic liquid) อัตราส่วนของ $u^{1/3}/\rho$ แท้จริงแล้วไม่ขึ้นกับอุณหภูมิและในสภาพรวมจะเขียนสมการได้ว่า

$$U = (M/\rho)\, u^{1/3}_{long} \qquad (4.2.1)$$

เมื่อ U = ฟังชั่นของความเร็วเสียงในโมล (Rao function)

M = มวลโมเลกุล (Molecular weight)

u_{long} = ความเร็วเสียงตามยาว (longitudinal sound velocity)

สำหรับวัสดุประเภทไอโซทรอปิก ($K_x = K_y = K_z$) ค่า U จะต่างไปจากสสารที่อยู่ในสถานะของเหลว ซึ่งชอเยอร์ (Schuyer) ได้แสดงค่า U ไว้เป็น

$$U = V u^{1/3} \left[\frac{1+\nu}{3(1-\nu)}\right]^{1/6} \qquad (4.2.2)$$

เมื่อ V ปริมาตรต่อโมล, ν อัตราส่วนของปัวซอง (Poisson ratio) ซึ่ง มีความหมายดัง (4.2.3) และสำหรับของเหลว $\nu = 1/2$ สมการ (4.2.2) จะกลับเป็น (4.2.1)

ν = อัตราการเปลี่ยนของด้านกว้างต่อหน่วยพื้นที่/อัตราการเปลี่ยนแปลงของด้านยาวต่อ 1 หน่วยพื้นที่ (4.2.3)

ซึ่งค่า ν ของโพลีเมอร์ชนิดต่าง ๆ แสดงอยู่ในตาราง 4.1

ตาราง 4.1 แสดงค่าอัตราส่วนป้วซองของโพลีเมอร์ชนิดต่าง ๆ

ชื่อชนิดโพลีเมอร์	C_p (10^3J/kg.k)	ρ (10^3kg/m^3)	Poisson ratio (ν)
ยางธรรมชาติ	-	0.91	0.49[5]
โพลีสทีลีน (LD)	1.63	0.92	0.49
ไนลอน	1.47	1.14	0.44
โพโลเมทีล เมทะไซเลท	1.38	1.17	0.40
โพลีสไตรีน	1.21	1.05	0.38
อีปอกซิ เรซิน	1.25	1.18	0.4

จัดสมการ (4.2.2) ใหม่ได้เป็น

$$u_{long} = \left(\frac{U}{V}\right)^3 \left(\frac{3(1-\nu)}{1+\nu}\right)^{1/2} \qquad (4.2.4)$$

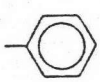
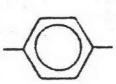
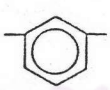
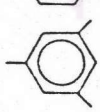
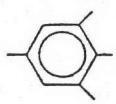
แทนค่า u_{long} ลงในสมการ (4.1.2) จะได้ว่า

$$K = C_p \rho L (U/V)^3 (3(1-\nu)/1+\nu)^{1/2} \qquad (4.2.5)$$

ค่า U จะเป็นไปตามตาราง 4.2

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตาราง 4.2 แสดงค่าราวฟังชั่น (Rao function) ในหน่วย $cm^{10/3}/S^{1/3}.mol.$

Group	U		Group	U	
	in liquids	in solid polymers		in liquids	in solid polymers
$-CH_3$	1360	1400	-F		(500)
$-CH_2-$	895	880	-Cl	1060	1150
$\diagup CH-$	460	450	-Br	1180	
$\diagup C\diagdown$	40	50	-I	1400	
$=CH_2$	1235		-O-	350	400
=CH-	745	700	-OH	630	600
$=C\diagup$	255	50			
			-CO-	870	900
$\diagup CH_{ar}$	760		-COO-	1220	1250
$\diagup C_{ar}$	260		-COO-	1570	1600
			-COOH	1430	
	4045	4650			
	3555	4100	$-NH_2$	965	
	3500		-NH-	640	
	3450		$\diagup N-$	65	100
		3700	-C≡N	1310	
		3350	-CONH-	1365	1700

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

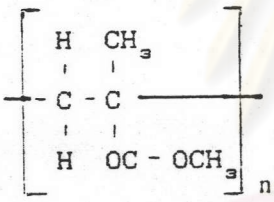
4.3 ตัวอย่างการคำนวณเทียบกับผลการทดลอง

หัวข้อนี้จะคำนวณค่าสภาพการนำความร้อนของพลาสติก PMMA หรือ Poly (methyl methcrylate) ณ.อุณหภูมิห้องเพื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่ทำการทดลองได้ในบทก่อน โดยจะคำนวณจากสมการ (4.1.6)

$$K = C_p \rho L(U/V)^3 \left(3(1-\nu)/(1+\nu)\right)^{1/2} \qquad (4.3.1)$$

จากตาราง 4.1 จะได้ว่า C_p = 1380 j/kg.k, ρ = 1.17 g/cm^3.mol, ν = 0.40
M ของ PMMA จะมีค่าเป็น 100.1 g/mol และ $L = 5.0 \times 10^{-11}$ m

ต่อไปคำนวณหาค่า U จากตาราง 4.2 ซึ่งสูตรโครงสร้างทางเคมีของ PMMA คือ



		U
1	$(-CH_2-)$	880
1	$(\overset{\backslash}{\underset{/}{C}}\overset{/}{\underset{\backslash}{}})$	50
2	(CH_3)	2800
1	(-COO-)	1250
		4980

ดังนั้น U/V = 4980/(100.1/1.17) = 58.2 (cm$^{1/3}$/S$^{1/3}$) หรือ $(U/V)^3$ = 1.97 x 10^3 m/s.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

แทนค่าในสมการ (4.3.1) จะได้

$$K = 1380 \times 1170 \times 5 \times 10^{-11} \times 1.97 \times 10^{3} \times 1.13$$

ดังนั้น $K = 0.18$ J/S.m.K

ซึ่งจากการทดลองในบทที่ 2, 3 เราจะได้ค่า $K \simeq 0.19$ J/S.m.K จึงถือได้ว่าผลทางทฤษฎีและผลการทดลองจากเครื่องมือที่พัฒนาขึ้นสอดคล้องกันพอสมควร ซึ่งจากขั้นตอนต่าง ๆ เริ่มตั้งแต่การสร้างเครื่องมือ, การเตรียมการทดลอง และการทดลอง ทุกขั้นตอนไม่มีความยุ่งยากมากนัก ดังนั้นเครื่องมือที่พัฒนาขึ้นจึงความเหมาะสมที่จะนำไปใช้ในห้องปฏิบัติการได้ แล้วแต่โอกาส และจุดประสงค์ของผู้นำไปใช้

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย