

การศึกษาความเหมาะสมของปูนในงานหล่อเครื่องประดับโลหะผสมทองและโลหะไทเทเนียม



บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของวิทยานิพนธ์ตั้งแต่ปีการศึกษา 2554 ที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR)
เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของวิทยานิพนธ์ ที่ส่งผ่านทางบัณฑิตวิทยาลัย

The abstract and full text of theses from the academic year 2011 in Chulalongkorn University Intellectual Repository (CUIR)
are the thesis authors' files submitted through the University Graduate School.

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมโลหการและวัสดุ ภาควิชาวิศวกรรมโลหการ
คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2559
ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Investigations of jewelry investments and suitability for gold alloys and titanium
casting

Mr. Thanawat Phetrattanarangsri



A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering Program in Metallurgical and Materials

Engineering

Department of Metallurgical Engineering

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

Academic Year 2016

Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การศึกษาความเหมาะสมของปูนในงานหล่อเครื่องประดับโลหะผสมทองและโลหะไทเทเนียม
โดย	นายธนวัฒน์ เพชรรัตนรังสี
สาขาวิชา	วิศวกรรมโลหการและวัสดุ
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.บุญรัตน์ โล่ห์วงศ์วัฒน
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เอกสิทธิ์ นิสารัตนพร

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

..... คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์
(รองศาสตราจารย์ ดร.สุพจน์ เตชวรสินสกุล)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร.ปฐมมา วิสุทธิพิทักษ์กุล)
..... อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.บุญรัตน์ โล่ห์วงศ์วัฒน)
..... อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เอกสิทธิ์ นิสารัตนพร)
..... กรรมการ
(ดร.เชษฐา พันธุ์เครือบุตร)
..... กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย
(ดร.สุรศักดิ์ กุยมาลี)

ธนวัฒน์ เพชรรัตน์รังสี : การศึกษาความเหมาะสมของปูนในงานหล่อเครื่องประดับโลหะผสมทองและโลหะไทเทเนียม (Investigations of jewelry investments and suitability for gold alloys and titanium casting) อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: ผศ. ดร.บุญรัตน์ โล่ห์วงศ์วัฒน์, อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม: ผศ. ดร.เอกสิทธิ์ นิสารัตนพร, 180 หน้า.

ในอุตสาหกรรมเครื่องประดับนิยมใช้กระบวนการหล่อแบบซีเมนต์โดยใช้ปูนเป็นวัสดุสำหรับสร้างแบบซึ่งในการหล่อทองนั้นนิยมปูนในกลุ่มยิปซัมที่ประกอบด้วย cristobalite, quartz และยิปซัม และในระหว่างการอบปูน พบการสลายตัวของน้ำและการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite, quartz และ แคลเซียมซิลิเกต ในส่วนพฤติกรรมของปูนกลุ่มสปิเนลที่ใช้ในการหล่อไทเทเนียมมีส่วนประกอบหลักเป็น แมกนีเซียมออกไซด์ และ อะลูมิเนียมออกไซด์ ขณะทำการอบเกิดการสลายตัวของแมกนีเซียม อะซิเตท ที่เป็นตัวประสานกลายเป็น แมกนีเซียมออกไซด์ และเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นทำให้เกิดปฏิกิริยาระหว่างแมกนีเซียมออกไซด์ และ อะลูมิเนียมออกไซด์ กลายเป็นแมกนีเซียมอะลูมิเนียมเนตสปิเนล

หลังจากปรับเปลี่ยนรูปแบบการอบปูนจากการพิจารณาพฤติกรรมของปูนขณะได้รับความร้อนพบว่า การเปลี่ยนรูปแบบการอบปูนทำให้ปูนมีความแข็งแรงเพิ่มขึ้นและไม่ทำให้คุณภาพชิ้นงานหล่งานหล่อด้อยลง ซึ่งสามารถลดระยะเวลาในการอบปูนในกลุ่มยิปซัมลงได้ แต่อย่างไรก็ตามปูนที่มีขนาดอนุภาคเล็กที่สุดจะมีความเรียบผิวที่ดีที่สุดแต่มีความสามารถในการซึมผ่านที่ไม่ดีจึงทำให้เกิดตำหนิได้ผิวชิ้นงานซึ่งทำให้ความแข็งแรงที่ผิวชิ้นงานลดลง

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

ภาควิชา	วิศวกรรมโลหการ	ลายมือชื่อนิสิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมโลหการและวัสดุ	ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาหลัก
ปีการศึกษา	2559	ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาร่วม

5770189521 : MAJOR METALLURGICAL AND MATERIALS ENGINEERING

KEYWORDS: INVESTMENT CASTING / GYPSUM-BONDED INVESTMENT / SPINEL-BASE INVESTMENT / THERMOCHEMICAL

THANAWAT PHETRATTANARANGSRI: Investigations of jewelry investments and suitability for gold alloys and titanium casting. ADVISOR: ASST. PROF. BOONRAT LOHWONGWATANA, Ph.D., CO-ADVISOR: ASST. PROF. EKASIT NISARATANAPORN, Ph.D., 180 pp.

In the jewelry industry, the investment was used to produce investment mold for lost wax casting. The popular investment for gold casting is the gypsum-boned investment that consists of three phase including cristobalite, quartz, and gypsum as a binder. During burning out, the dehydration of gypsum, cristobalite and quartz inversions and III-II calcium sulfate transition were indicated by using several characterization techniques. In spinel-based investment view, titanium casting can use the spinel-based investment that consists of magnesia and alumina. During burning out mold, magnesium acetate as binder decomposes to magnesia. When the temperature increased, magnesium aluminate spinel was occurred by the reaction of magnesia and alumina.

After developed the burnout cycle from consideration in the thermal behavior of investments, the investment molds that were burned out by using new burnout cycle, can increase the strength of investment molds and the quality of casting product were not decreased. In gypsum-bonded investment, the new burnout cycle can decrease burnout time in casting process. However, the smallest particle size of investment can produce good surface quality in casting product but has a low permeability of the mold that causes porosity defects at subsurface of casting product and decreasing hardness on casting surface.

Department: Metallurgical Engineering Student's Signature

Field of Study: Metallurgical and Advisor's Signature

Materials Engineering Co-Advisor's Signature

Academic Year: 2016

กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณบริษัท คริสตี้เจมส์ จำกัด สำนักงานกองทุนสนับสนุนงานวิจัย และสมาคมผู้ค้าอัญมณีและเครื่องประดับ ที่ช่วยสนับสนุนเงินวิจัย

ขอขอบพระคุณ คุณาจารย์ภาควิชาวิศวกรรมโลหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ซึ่งกรุณาสละเวลาให้ความรู้ คำแนะนำ ความช่วยเหลือ การแก้ปัญหา ตลอดจนเอื้อเฟื้อเครื่องมือและอุปกรณ์ต่างๆ ตลอดการทำงานวิจัย

ขอขอบพระคุณ เจ้าหน้าที่สำนักงาน (ธุรการ) ที่ได้ให้ความช่วยเหลือในการใช้งานสถานที่และอุปกรณ์ต่างๆ ของภาควิชาฯ และช่วยเหลือในการติดต่อประสานงานต่างๆ

ขอขอบพระคุณ นายบุริมพัทธ์ ศักดิ์โกมลศรี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น ที่เอื้อเฟื้อเครื่องมือและอุปกรณ์ในการทดสอบ

ขอขอบพระคุณ นายชนกันต์ ธงไชย นายปัญญา วิโรจน์ นายกำพล ลีลาฤดี นายสืบสกุล ยศพิทักษ์ นางสาวกมลพัชร ศรีทอง และนิสิตปริญญาโท ภาควิชาวิศวกรรมโลหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ซึ่งกรุณาสละเวลา ให้ความรู้ คำแนะนำ และความช่วยเหลือตลอดการทำวิจัย

ขอขอบพระคุณ อาจารย์ ดร.เชษฐา พันธุ์ศรีบุตร ดร.อัจฉรา คำกองแก้ว และอาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.บุญรัตน์ โล่ห์วงศ์วัฒน ผู้ประสิทธิ์ประสาทวิชาความรู้ ผู้ที่คอยช่วยเหลือให้คำปรึกษาจนงานวิจัยสำเร็จลุล่วงมาได้ด้วยดี ท้ายที่สุด ขอขอบคุณครอบครัวผู้เป็นที่รักและผู้ให้กำลังใจตลอดการทำงานวิจัยด้วยดีมาตลอด

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	จ
กิตติกรรมประกาศ	ฉ
สารบัญ.....	ช
สารบัญภาพ.....	ญ
สารบัญตาราง.....	ฐ
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ที่มาและความสำคัญของปัญหา.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย.....	2
1.3 ขอบเขตการศึกษา	2
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	2
บทที่ 2 วรรณกรรมปริทรรศน์	3
2.1 กระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหาย (lost wax casting).....	3
2.2 โลหะทองคำ (Gold).....	4
2.3 ปูนในกลุ่มยิปซัม (Gypsum-bonded investment).....	7
2.4 โลหะไทเทเนียม (Titanium)	9
2.5 ปูนในกลุ่มสปิเนล (Spinel-based investment).....	12
บทที่ 3 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย.....	14
3.1 วัสดุที่ใช้ในงานวิจัยใช้ในงานวิจัย	14
3.1.1 โลหะที่ใช้ในการหล่อแบบขี้ผึ้งหาย	14
3.1.2 ปูนเซรามิก	14
3.1.3 ต้นแบบพอลิเมอร์.....	14

3.2 ตรวจสอบส่วนผสมทางเคมี.....	14
3.2.1 ตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของโลหะ	14
3.2.2 ตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของผงปูนเซรามิก	14
3.3 การเตรียมชิ้นงานเพื่อตรวจสอบปูนเซรามิก	15
3.4 การศึกษาสมบัติทางความร้อนของปูนเซรามิกและต้นแบบพอลิเมอร์.....	20
3.5 การวิเคราะห์โครงสร้างจุลภาคและการทดสอบสมบัติทางกลของปูนเซรามิก.....	21
3.6 การออกแบบชิ้นงานโลหะ.....	22
3.7 การหล่อชิ้นงานโลหะ	23
3.8 การวิเคราะห์ลักษณะพื้นผิวและความแข็งของชิ้นงานโลหะ	23
3.9 วิเคราะห์และรายงานผลการทดลอง	23
บทที่ 4 ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง	24
4.1 ส่วนผสมทางเคมีของวัสดุที่ใช้ในการทดลอง	24
4.1.1 ผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของโลหะทองผสมและโลหะไทเทเนียม บริสุทธิ์.....	24
4.1.2 ผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของผงปูนทั้ง 4 แบบ	24
4.2 การศึกษาส่วนประกอบและขนาดของอนุภาคปูน.....	25
4.2.1 ผลการศึกษาส่วนประกอบของปูนกลุ่มยิปซัม.....	25
4.2.2 ผลการศึกษาส่วนประกอบของปูนกลุ่มสปิเนล	31
4.2.3 ผลการศึกษาขนาดอนุภาคของผงปูน	33
4.3 การศึกษาพฤติกรรมของปูนระหว่างกระบวนการเตรียมเข้าปูน	34
4.3.1 ผลการศึกษาพฤติกรรมทางความร้อนระหว่างกระบวนการอบปูนเซรามิก.....	34
4.3.1.1 พฤติกรรมทางความร้อนของปูนกลุ่มยิปซัม	34
4.3.1.2 พฤติกรรมทางความร้อนของปูนกลุ่มสปิเนล.....	38

4.3.2 ผลของการอบปุ่นต่อสัณฐานวิทยาของอนุภาคปูน	39
4.3.3 ผลการศึกษาสมบัติทางความร้อนของต้นแบบพอลิเมอร์.....	43
4.4 ผลของรูปแบบการอบต่อความแข็งแรงของเบ้าปูน	44
4.5 ผลของรูปแบบการอบต่อคุณภาพชิ้นงานทอง	45
4.5.1 การศึกษาความเรียบผิวของชิ้นงานโลหะหลังการหล่อ.....	45
4.5.2 การศึกษาความแข็งผิวของชิ้นงานหลังงานหล่อ	47
4.5.3 การศึกษาโครงสร้างจุลภาคและตำหนิได้ผิวของชิ้นงานหลังงานหล่อ.....	48
บทที่ 5 สรุปผลการทดลอง	52
5.1 สรุปผลการทดลองปูนในกลุ่มยิปซัม.....	52
5.2 สรุปผลการทดลองปูนในกลุ่มสปีเนล	53
รายการอ้างอิง	54
ภาคผนวก.....	59
ภาคผนวก ก	60
ภาคผนวก ข	86
ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์	180

สารบัญภาพ

	หน้า
ภาพที่ 2.1 แสดงกระบวนการหล่อแบบซีพิ้งหาย.....	3
ภาพที่ 2.2 แผนภาพเฟส Au-Ag-Cu	5
ภาพที่ 2.3 แสดงโครงสร้างจุลภาคของทองคำ 18K	6
ภาพที่ 2.4 แสดงตำหนิที่เกิดจากการหดตัว.....	6
ภาพที่ 2.5 แสดงผล XRD ของผงปูน และปูนหลังการผสมน้ำ.....	8
ภาพที่ 2.6 แสดงโครงสร้างจุลภาคจาก SEM ของผงปูนที่ผสมน้ำ.....	8
ภาพที่ 2.7 แสดงกระดูกไทเทเนียมที่ทดแทนกระดูกในร่างกายมนุษย์	10
ภาพที่ 2.8 แสดงโครงสร้างจุลภาคของไทเทเนียมบริสุทธิ์	11
ภาพที่ 2.9 แสดง alpha-case layer	11
ภาพที่ 2.10 แสดงขนาดอนุภาคของผงปูนที่ใช้ในการหล่อไทเทเนียม	13
ภาพที่ 3.1 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 1	16
ภาพที่ 3.2 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 2 ของปูนกลุ่มยิปซัม	18
ภาพที่ 3.3 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 3 ของปูนกลุ่มยิปซัม	19
ภาพที่ 3.4 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 3 ของปูนกลุ่มสปีเนล.....	20
ภาพที่ 3.5 แสดงเครื่อง DSC/TG.....	21
ภาพที่ 3.6 แสดงขนาดต้นแบบพอลิเมอร์.....	22
ภาพที่ 4.1 แสดงส่วนประกอบของผงปูนกลุ่มยิปซัมจากเทคนิค XRD	26
ภาพที่ 4.2 แสดงความแตกต่างระหว่าง $\text{CaSO}_4(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$ กับ $\text{CaSO}_4(\text{H}_2\text{O})_{0.625}$	27
ภาพที่ 4.3 แสดงส่วนประกอบของ Green part ของปูนกลุ่มยิปซัมจากเทคนิค XRD.....	29
ภาพที่ 4.4 แสดงส่วนประกอบของปูนที่ผ่านการอบจากเทคนิค XRD.....	30

ภาพที่ 4.5 แสดงส่วนประกอบของผงปูน, Green part และปูนหลังการอบ ของกลุ่มสปิเนลจากเทคนิค XRD.....	31
ภาพที่ 4.6 แสดงสเปกตรัมของ spinel liquid จากการทดสอบ FTIR	33
ภาพที่ 4.7 แสดงสมบัติทางความร้อนของ Investment A ด้วยเทคนิค DSC/TG	34
ภาพที่ 4.8 แสดงสมบัติทางความร้อนของปูนกลุ่มยิปซัม	36
ภาพที่ 4.9 แสดงพฤติกรรมทางความร้อนจากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค In-situ XRD (ก) การเปลี่ยนแปลง XRD patterns ที่อุณหภูมิต่าง; (ข) การสูญเสียน้ำในผลึกยิปซัม; (ค) การเปลี่ยนเฟสของ cristobalite; (ง) การเปลี่ยนเฟสของแคลเซียมซิลเฟต; (จ) การเปลี่ยนเฟสของ quartz	37
ภาพที่ 4.10 แสดงสมบัติทางความร้อนของปูน Investment T ด้วยเทคนิค DSC/TG.....	39
ภาพที่ 4.11 แสดงสัณฐานวิทยาของปูนกลุ่มยิปซัม (ก) ผงปูน (ข) ปูนหลังทำการอบ	40
ภาพที่ 4.12 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคผงปูน Investment A.....	40
ภาพที่ 4.13 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคปูน Investment A หลังการอบ.....	41
ภาพที่ 4.14 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment T (ก) ผงปูน; (ข) ปูนหลังทำการอบ	41
ภาพที่ 4.15 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคผงปูน Investment T	42
ภาพที่ 4.16 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคปูน Investment T หลังการอบ.....	42
ภาพที่ 4.17 แสดงสมบัติทางความร้อนของต้นแบบพอลิเมอร์	43
ภาพที่ 4.18 แสดงความแข็งแรงของปูนหลังทำการอบด้วยรูปแบบการอบที่ต่างกัน	45
ภาพที่ 4.19 แสดงค่าความแข็งแรงผิวชิ้นงานจากรูปแบบการอบที่ 1 และ 3	47
ภาพที่ 4.20 แสดงภาพตัดขวางบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment A	49
ภาพที่ 4.21 แสดงภาพตัดขวางบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment B.....	49
ภาพที่ 4.22 แสดงภาพตัดขวางบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment C	49

ภาพที่ 4.23 แสดงภาพโครงสร้างจุลภาคขบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment C.....	50
ภาพที่ 4.24 แสดงตำหนักจากแก๊สบริเวณใต้ผิวชิ้นงานที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 3 ของปูน Investment C	50
ภาพที่ 4.25 แสดงโครงสร้างจุลภาคใต้ผิวชิ้นงานไทเทเนียมบริสุทธิ์ ที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment T.....	51



สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 2.1 แสดงเกรดทองคำ.....	4
ตารางที่ 3.1 แสดงชิ้นงานที่ทำการอบไล่ต้นแบบพอลิเมอร์ในรูปแบบต่างๆ.....	15
ตารางที่ 4.1 แสดงผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของโลหะ	24
ตารางที่ 4.2 แสดงผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของผงปูน.....	25
ตารางที่ 4.3 แสดงปริมาณสารประกอบในผงปูนกลุ่มยิปซัม.....	28
ตารางที่ 4.4 แสดงปริมาณสารประกอบในผงปูนกลุ่มสปีเนล.....	32
ตารางที่ 4.5 แสดงขนาดอนุภาคผงปูน.....	34
ตารางที่ 4.6 แสดงค่าความขรุขระของผิวชิ้นงานหลังการหล่อ.....	46

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของปัญหา

ในปัจจุบันธุรกิจเครื่องประดับทั้งภายในประเทศและภาคการส่งออกมีการแข่งขันเพิ่มสูงขึ้น ในภาคอุตสาหกรรมจึงมีความจำเป็นอย่างมากที่จะต้องพัฒนาคุณสมบัติของเครื่องประดับโลหะรวมถึงกระบวนการผลิตเพื่อให้ได้คุณภาพที่ดีซึ่งสามารถเพิ่มจำนวนและมูลค่าการส่งออกได้ การพัฒนากระบวนการผลิตจึงเป็นปัจจัยสำคัญที่ต้องทำการศึกษาในการเพิ่มกำลังการผลิตโดยการลดระยะเวลาและค่าใช้จ่ายในกระบวนการผลิตเครื่องประดับโลหะ เช่น แหวน กำไล สร้อย ต่างหู ฯลฯ ที่นิยมผลิตด้วยกระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหาย (Investment casting หรือ Lost-wax casting) เนื่องจากกระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหายมีความแม่นยำสูงและสามารถผลิตชิ้นงานที่มีรูปร่างซับซ้อนรวมทั้งได้ผิวชิ้นงานที่มีความเรียบผิวที่ดี นอกจากนี้กระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหายนี้ยังเป็นกระบวนการที่มีต้นทุนการผลิตต่ำเมื่อเทียบกับการขึ้นรูปด้วยวิธีการอื่นๆ อาทิ การทุบขึ้นรูป (Forging) เป็นต้น [1] อย่างไรก็ตามเครื่องประดับโลหะที่ผลิตได้จำเป็นต้องมีสมบัติที่ดีในหลายๆด้าน เช่น สีผิวของเครื่องประดับ ความเรียบผิว ความแข็งแรง รวมทั้งความทนทานต่อการใช้งาน ซึ่งขึ้นกับปัจจัยที่เป็นตัวแปรสำคัญระหว่างกระบวนการหล่อ ได้แก่ ส่วนผสมของโลหะที่ใช้ ขั้นตอนกรรมวิธีการผลิตแบบขี้ผึ้งหาย นอกจากนี้ยังมีปัจจัยสำคัญที่ใช้ในกระบวนการได้แก่ สมบัติของปูนที่ใช้ในกระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหาย (Investment material) เนื่องจากปูนที่เลือกใช้จะส่งผลอย่างมากกับคุณภาพของชิ้นงานเครื่องประดับโลหะ

ปัจจัยเกี่ยวกับปูนในกระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหายมีความสำคัญในหลายขั้นตอน ตั้งแต่การเลือกใช้ปูนที่มีสมบัติที่เหมาะสมกับโลหะที่ต้องการหล่อ การผสมปูน และการอบปูน ตัวแปรเหล่านี้เป็นตัวกำหนดสมบัติที่ดีของแบบหล่อปูนเซรามิก (ceramic mold) ทั้งในด้านสมบัติทางความร้อน (thermal properties) สมบัติทางกายภาพ (physical properties) และสมบัติเชิงกล (mechanical properties) ซึ่งส่งผลโดยตรงต่อสมบัติของชิ้นงานเครื่องประดับโลหะที่หล่อด้วยกระบวนการขี้ผึ้งหาย [2, 3] โดยแบบหล่อปูนเซรามิกที่ดีควรมีลักษณะพื้นผิวที่เรียบในบริเวณที่สัมผัสกับน้ำโลหะและมีสมบัติการซึมผ่านที่ดี (permeable) นอกจากนี้ยังต้องมีความแข็งแรงตลอดกระบวนการหล่อ [4] แต่อย่างไรก็ตามเมื่อศึกษาทางด้านงานวิจัยที่เกี่ยวกับการพัฒนาสมบัติของปูนหล่อในกระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหายเพื่อใช้ในอุตสาหกรรมทั้งในและนอกประเทศนั้น ยังพบว่ามียังมีปริมาณงานวิจัยที่พบอยู่ไม่มากนัก ซึ่งในอุตสาหกรรมโดยทั่วไปจะใช้ประสบการณ์และทักษะของแรงงานที่ทำหน้าที่ในอุตสาหกรรมนั้นๆ อีกทั้งกระบวนการอบปูนที่มีในปัจจุบันยังใช้เวลานานทำให้ประสิทธิภาพในการ

ผลิตถูกจำกัดด้วยปัจจัยดังกล่าว เนื่องจากผู้ผลิตอาจไม่สามารถทำการศึกษาถึงเวลาที่เหมาะสมทำให้อาจต้องสูญเสียค่าใช้จ่ายในด้านพลังงานเพิ่มสูงขึ้นจากการอบปูนที่เกินความจำเป็น

จากปัญหาดังกล่าวจึงได้มีงานวิจัยนี้ขึ้นเพื่อศึกษาวิจัยและทำความเข้าใจเกี่ยวกับสมบัติของปูนแต่ละแบบที่ใช้ในงานหล่อเครื่องประดับ รวมถึงสิ่งที่เกิดขึ้นในกระบวนการหล่อ โดยงานวิจัยนี้คาดหวังว่าจะสามารถทำให้อุตสาหกรรมเครื่องประดับเลือกใช้ปูนที่มีสมบัติตรงกับโลหะที่ต้องการผลิตและออกแบบขั้นตอนการอบปูนที่เหมาะสมสำหรับการหล่อขึ้นรูปในอุตสาหกรรมเครื่องประดับ ซึ่งจะลดเวลาและต้นทุนในการผลิตเครื่องประดับโลหะที่มีคุณภาพที่ดีรวมถึงเพิ่มอัตราการผลิตให้ดีขึ้นได้อีกด้วย

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

1. เพื่อให้ทราบถึงโครงสร้างจุลภาค อุณหภูมิสำคัญและการเปลี่ยนแปลงเฟสของปูนหล่อเครื่องประดับโลหะผสมทองและโลหะไทเทเนียม

2. เพื่อให้ทราบถึงผลของรูปแบบการอบปูนที่มีผลต่อโครงสร้างจุลภาค และคุณสมบัติต่างๆของเครื่องประดับโลหะผสมทองและโลหะไทเทเนียม

1.3 ขอบเขตการศึกษา

1. ศึกษาปูนหล่อเครื่องประดับทอง 18K ที่แตกต่างกัน ซึ่งเป็นปูนในกลุ่มยิปซัม (Gypsum-bonded investment) จำนวน 3 แบบ และปูนในกลุ่มสปิเนล (spinel-based investment) สำหรับหล่อโลหะไทเทเนียม CP grade 2 จำนวน 1 แบบ

2. ศึกษาผลของรูปแบบการอบปูนทั้ง 4 แบบต่อลักษณะทางกายภาพของพื้นผิวของแบบหล่อปูนเซรามิก โดยอุณหภูมิที่เหมาะสมสำหรับการอบปูนจะอ้างอิงจากคู่มือแนะนำการใช้งานของปูนแต่ละแบบและปรับเปลี่ยนรูปแบบการอบปูนเพื่อเร่งและหน่วงระยะเวลาการอบปูนทั้ง 4 แบบ

3. ศึกษาลักษณะทางกายภาพของผิวโลหะที่มีลักษณะเป็นรูปแบบอย่างง่ายและไม่ซับซ้อน

4. ศึกษาสมบัติทางกลและทางกายภาพของชิ้นงานที่ได้จากการอบปูนที่แตกต่างกัน

5. ศึกษาสมบัติทางความร้อนของต้นแบบซีฟิ่งสำหรับโลหะผสมทองและโลหะไทเทเนียม

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. เข้าใจผลของระยะเวลาในการอบปูนที่มีต่อชิ้นงานเครื่องประดับโลหะ และพฤติกรรมที่เกิดขึ้นระหว่างการอบปูน

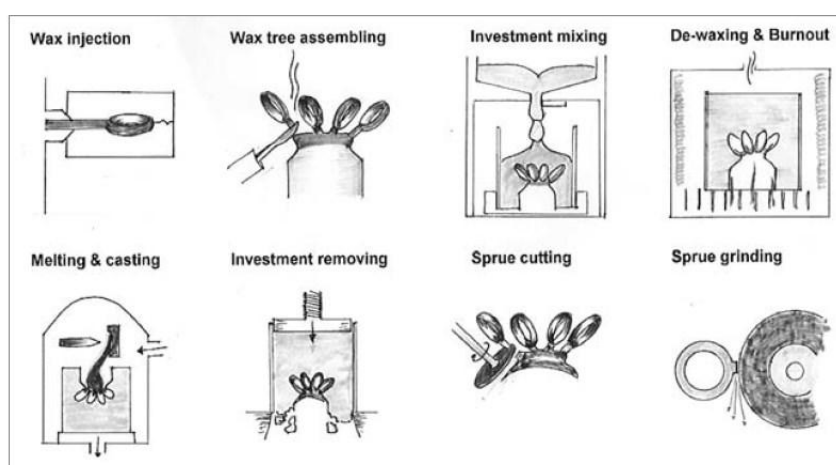
2. สามารถนำองค์ความรู้ที่ได้ไปทำการปรับเปลี่ยนอุณหภูมิและระยะเวลาในการอบปูนให้มีระยะเวลาสั้นลงและยังคงคุณภาพชิ้นงานเครื่องประดับโลหะที่ดีได้ เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการผลิตในภาคอุตสาหกรรมเครื่องประดับ

บทที่ 2

วรรณกรรมปริทรรศน์

2.1 กระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหาย (lost wax casting)

กระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหายนั้นเป็นกระบวนการที่มีมาตั้งแต่ช่วงบาบิโลเนีย (Babylonian period) ซึ่งช่วงแรกใช้ในการหล่อโลหะทองสัมฤทธิ์ (bronze) ต่อมาจึงมีการนำทองคำมาหล่อขึ้นรูปชิ้นงาน โดยกระบวนการดังกล่าวสามารถทำให้ได้ชิ้นงานที่มีรูปร่างสวยงามและมีรายละเอียดที่ดีกว่ากระบวนการอื่นๆ แต่อย่างไรก็ตามช่วงเวลาต่อมากระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหายก็เริ่มลดน้อยลงในอุตสาหกรรมสมัยใหม่จนกระทั่ง Philbrook D. และ William H. ได้นำกระบวนการดังกล่าวมาปรับใช้กับงานทางทันตกรรมทั้งการครอบฟันและการอุดฟัน และเริ่มมีการพัฒนากระบวนการหล่อมาเรื่อยๆ จนหลังสงครามโลกครั้งที่สองได้มีการทำแม่แบบขี้ผึ้งมาใช้ในการผลิตต้นแบบที่เป็นขี้ผึ้งขึ้น[6] ทำให้ต่อมาอุตสาหกรรมเครื่องประดับได้ใช้กระบวนการดังกล่าวมากขึ้นและมีการพัฒนาอย่างต่อเนื่อง ดังจะเห็นได้จากงานวิจัยที่มีอยู่มากมายทั้งในและต่างประเทศ



ภาพที่ 2.1 แสดงกระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหาย [5]

กระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหายเริ่มต้นด้วยการสร้างต้นแบบขี้ผึ้งโดยการฉีดขี้ผึ้งเข้าไปในแม่แบบขี้ผึ้ง เมื่อได้ต้นแบบขี้ผึ้งแล้วจึงทำการเทปูนที่ผสมกับตัวประสาน ทั้งให้แบบปูนแข็งตัว จากนั้นทำการอบเพื่อไล่ขี้ผึ้งและเพิ่มความแข็งแรงของปูน จากนั้นนำแบบปูนเข้าเครื่องหล่อและทำการหล่อจนได้ชิ้นงานโลหะที่มีรูปร่างที่ต้องการ นำชิ้นงานออกจากต้น(ทางเดินน้ำโลหะ) และทำการตกแต่งชิ้นงานให้มีความเงางามมากขึ้น ซึ่งกระบวนการหล่อเครื่องประดับด้วยวิธีขี้ผึ้งหายนั้นแสดงในภาพที่ 2.1

2.2 โลหะทองคำ (Gold)

โลหะทองคำเป็นโลหะมีค่าที่แสดงถึงสัญลักษณ์ของความมั่งคั่งและถูกใช้เป็นทุนสำรองเงินตราระหว่างประเทศ เนื่องจากทองคำนั้นถือว่าเป็นโลหะที่มีมูลค่าในตัวเองจึงมีผู้นิยมนำทองคำมาทำเป็นเครื่องประดับจำนวนมากตัวโลหะทองคำมีความงดงามมันวาว มีความคงทน ไม่หมองไม่ผุกร่อนเพราะมีความเฉื่อยในการเกิดปฏิกิริยา ในปัจจุบันได้มีแบ่งประเภททองคำให้หลายเกรด (Karat) ตามความบริสุทธิ์หรือปริมาณของทองคำในโลหะผสมที่ใช้ในการทำเครื่องประดับต่างๆ ดังแสดงในตารางที่ 2.1

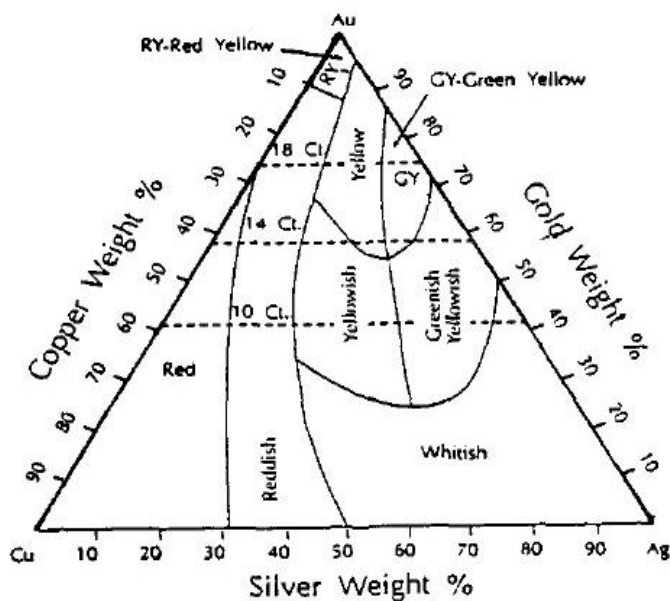
ตารางที่ 2.1 แสดงเกรดทองคำ[7]

Gold Content and Notation		
USA Karat stamping	Parts Gold	Gold%
24K	24/24	99.9%
22K	22/24	91.7%
18K	18/24	75.0%
14K	14/24	58.3%
12K	12/24	50.0%
10K	10/24	41.7%
9K	9/24	37.5%

ธาตุทองคำมีสัญลักษณ์ทางเคมีคือ Au ซึ่งมาจากภาษาละตินว่า Aurum ซึ่งทองอยู่ในกลุ่มโลหะทรานซิชัน (transition metal) โดยมีจุดหลอมเหลวอยู่ที่ประมาณ 1060 องศาเซลเซียส จุดเดือดอยู่ที่ประมาณ 2700 องศาเซลเซียส และมีความถ่วงจำเพาะ 19.3 ทองคำจะมีลักษณะที่อ่อนและมีความเหนียวสามารถตีออกเป็นแผ่นได้ ในงานเครื่องประดับจึงต้องมีการเติมธาตุผสมต่างๆ เพื่อให้วัสดุมีความแข็งแรงมากยิ่งขึ้นเพื่อเพิ่มความคงทนในการใช้งาน เช่นการเติมทองแดงจะทำให้โครงสร้างผลึกของทองเกิดการบิดเบี้ยวเนื่องจากอะตอมของทองแดงนั้นมีขนาดเล็กกว่าอะตอมของทองประมาณ 11.93% ทำให้การเติมทองแดงจึงส่งผลต่อความแข็งแรงรวมถึงความแข็งของทองที่เพิ่มขึ้นด้วย[8]

โดยทั่วไปในอุตสาหกรรมเครื่องประดับนิยมใช้ทองคำเกรด 18K เนื่องจากมีความแข็งแรงและสามารถปรับเปลี่ยนสีได้จากการเติมธาตุผสมต่างๆ ซึ่งนอกจากชนิดของธาตุที่เลือกใช้แล้วปริมาณสัดส่วนในการผสมก็มีผลต่อคุณสมบัติของโลหะได้อีกด้วย [9-11] โดยทอง 18K ที่ประกอบด้วยทองคำร้อยละ 75 โดยน้ำหนักและมีส่วนผสมอื่นๆ ได้แก่ เงิน และทองแดง อย่างละ 12.5 เปอร์เซ็นต์ จะมีจุดหลอมเหลวอยู่ที่ 885-895 องศาเซลเซียส และความหนาแน่นที่ 15.45 กรัมต่อลูกบาศก์

เซนติเมตร[12] ถ้าเทียบกับทองคำบริสุทธิ์จะมีจุดหลอมเหลวและความหนาแน่นที่ต่ำกว่า ซึ่งในอุตสาหกรรมทั่วไปจะมีการปรับเปลี่ยนส่วนผสมของเงินและทองแดง ตามแผนภาพเฟสของระบบที่มีสามองค์ประกอบตามภาพที่ 2.2

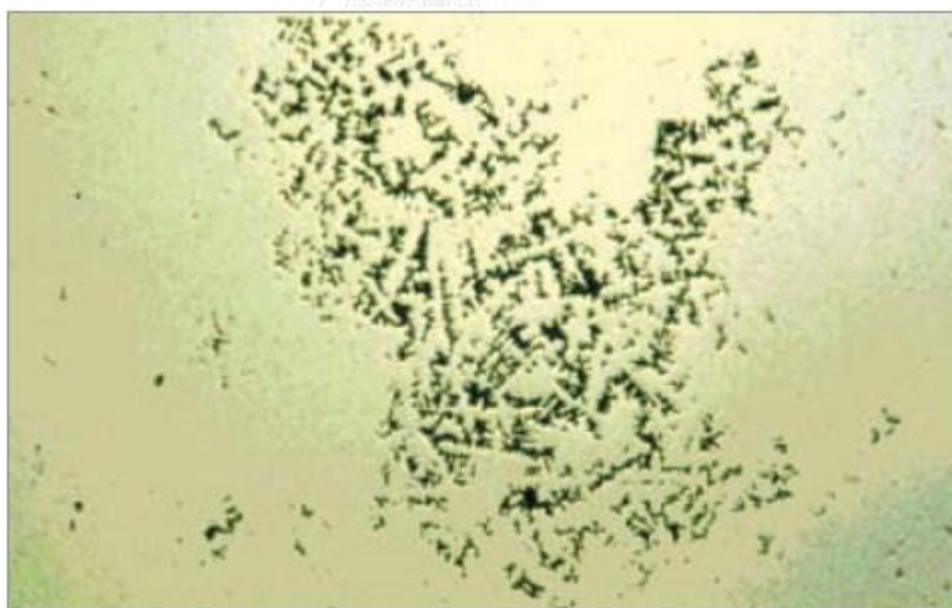


ภาพที่ 2.2 แผนภาพเฟส Au-Ag-Cu [13]

มีงานวิจัยจาก X.J. Zhang *et al.*[13] เลือกใช้ส่วนผสมของทองคำ 75.5% โดยน้ำหนัก เงิน 14.7% และ ทองแดง 9.8% ได้โครงสร้างจุลภาพเป็นดังภาพที่ 2.3 จะเห็นได้ว่าเป็นโครงสร้างเดนไดรต์ (dendritic structure) ของทองและบริเวณรอบๆ เดนไดรต์ที่เป็นเฟสยูเทกติกของทองและทองแดงอย่างชัดเจน[13] แต่อย่างไรก็ตามการโตของเดนไดรต์สามารถขัดขวางการเติมเต็มของน้ำโลหะบริเวณรอบๆ เดนไดรต์ได้และส่งผลให้เกิดรูที่เกิดจากการหดตัว (shrinkage pore) ได้ดังแสดงในภาพที่ 2.4 [12]



ภาพที่ 2.3 แสดงโครงสร้างจุลภาคของทองคำ 18K [13]



ภาพที่ 2.4 แสดงตำหนิที่เกิดจากการหดตัว[12]

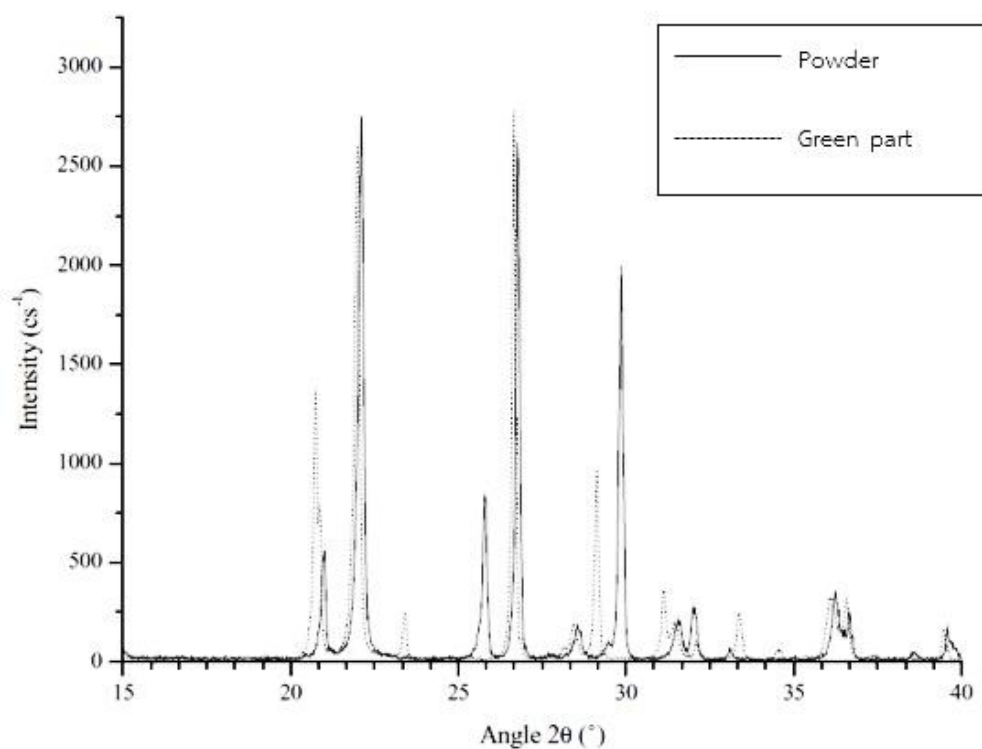
2.3 ปูนในกลุ่มยิปซัม (Gypsum-bonded investment)

ในการหล่อเครื่องประดับโลหะทองปัจจัยที่มีผลอย่างมากต่อคุณภาพของชิ้นงานเครื่องประดับที่ดี ส่วนหนึ่งมาจากปูนที่ใช้ในกระบวนการหล่อซึ่งปูนที่ดีต้องมีความแข็งแรงตลอดทุกอุณหภูมิในกระบวนการหล่อ มีความพรุนที่เหมาะสมเพื่อให้เกิดที่ที่เกิดในกระบวนการหล่อสามารถแทรกตัวออกมาได้ และผิวของปูนที่สัมผัสกับน้ำโลหะต้องมีผิวที่เรียบซึ่งขึ้นอยู่กับขนาดของอนุภาคปูนและส่วนผสมต่างๆในผงปูนรวมถึงอัตราส่วนของส่วนผสมในผงปูน

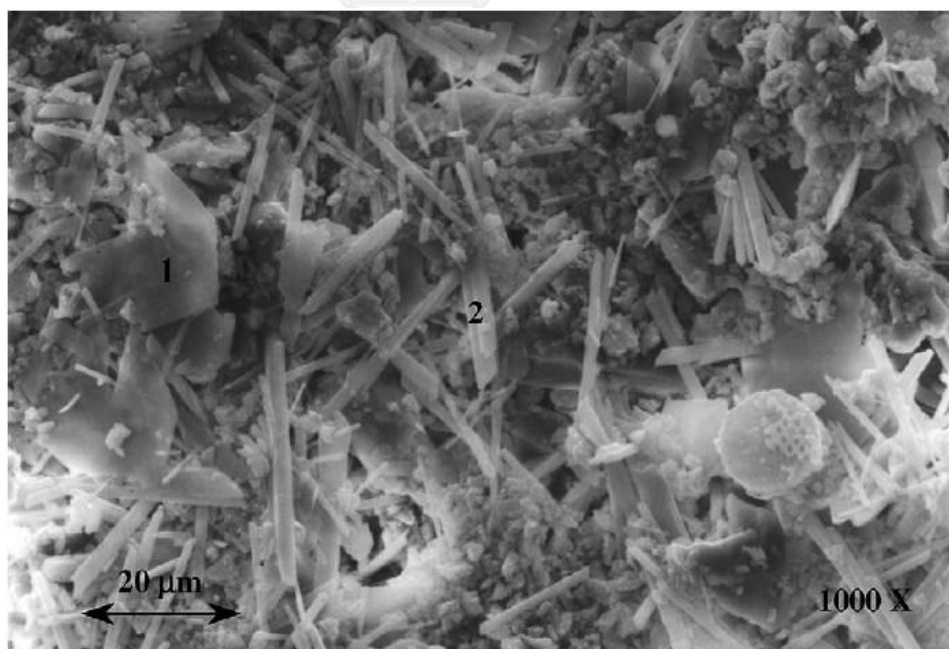
ปูนในกลุ่มยิปซัมที่ใช้ในงานหล่อเครื่องประดับทองโดยทั่วไปประกอบด้วย $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ (calcium sulphate hemihydrate) ประมาณ 25-30% ทำหน้าที่เป็นตัวประสาน (binder) และ SiO_2 (silica) 70-75% ทำหน้าที่เป็นวัสดุทนไฟ (refractory material) ซึ่งประกอบด้วยสองเฟสได้แก่ quartz และ cristobalite โดยสัดส่วนของ quartz และ cristobalite ส่งผลต่อคุณสมบัติของเบ้าปูน (mold) เนื่องจากทั้งสองเฟสมี คุณสมบัติทางกลที่ขึ้นกับความร้อน (thermomechanical properties) อุณหภูมิการเปลี่ยนเฟส (phase transition temperature) และ ค่าสัมประสิทธิ์การขยายตัวทางความร้อน (thermal expansion coefficient) ที่แตกต่างกัน [6, 14]

การศึกษาผลของ quartz และ cristobalite ที่มีต่อปูนในกลุ่มยิปซัมของ Yun-Jong Kim *et al.*[15] พบว่า cristobalite จะเริ่มมีการขยายตัวมากขึ้นเมื่ออุณหภูมิ 250 องศาเซลเซียสซึ่งการขยายตัวนั้นเป็นการชดเชยการหดตัวของปูนใน mold ทำให้การหดตัว (shrinkage) ลดลง ดังนั้น cristobalite จึงเป็นส่วนสำคัญในการควบคุมการขยายตัวทางความร้อน ในส่วนของ quartz ทำหน้าที่เสริมความแข็งแรง กล่าวคือการทำมีสัดส่วนของ quartz ที่เพิ่มขึ้นนั้นส่งผลให้ความแข็งแรงของปูนมีแนวโน้มเพิ่มขึ้น ดังนั้นการเลือกสัดส่วนที่เหมาะสมในการผสม silica ทั้งสองเฟสจึงมีความสำคัญ โดยงานวิจัยก่อนหน้าพบสัดส่วนที่ดีที่สุดอยู่ที่ 42% cristobalite ต่อ 22% quartz โดยน้ำหนักซึ่งเลือกจากความแข็งแรงและการขยายตัวทางความร้อนที่ดีที่สุด

นอกจากนี้ยังมีการศึกษาผลของยิปซัม[6] ซึ่งเป็นสาเหตุหนึ่งที่ทำให้เกิดความเสียหายในงานหล่อเครื่องประดับ เนื่องจากผง $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ เมื่อทำการผสมน้ำจะทำให้น้ำเข้าไปในผลึกเกิดปฏิกิริยา hydration เป็น $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ ดังแสดงจากผล XRD ในภาพที่ 2.5 แสดงผล XRD ของผงปูน และปูนหลังการผสมน้ำ [6] และเมื่อพิจารณาภาพถ่าย SEM ของปูนที่ทำการผสมน้ำพบ $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ ที่มีสัณฐานวิทยาเป็นลักษณะคล้ายแท่ง และ silica มีสัณฐานวิทยาเป็นลักษณะคล้ายก้อนดังแสดงในภาพที่ 2.6



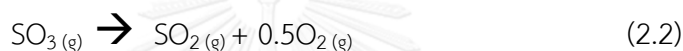
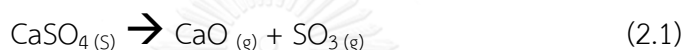
ภาพที่ 2.5 แสดงผล XRD ของผงปูน และปูนหลังการผสมน้ำ [6]



ภาพที่ 2.6 แสดงโครงสร้างจุลภาคจาก SEM ของผงปูนที่ผสมน้ำ [6]

ต่อมาเมื่อทำการอบปูนจะเกิดการดูดความร้อนเกิดปฏิกิริยา dehydration ทำให้น้ำที่อยู่ในผลึกสลายตัวไป ที่อุณหภูมิประมาณ 140 องศาเซลเซียส จาก $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ กลายเป็น CaSO_4 และ

2 โมลของน้ำ ($2(\text{H}_2\text{O})$)[16] ต่อมาที่อุณหภูมิประมาณ 250 องศาเซลเซียส เกิดปฏิกิริยาดูดพลังงานซึ่งเป็นผลมาจากการเปลี่ยนเฟสจาก α -cristobalite เป็น β -cristobalite เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นถึงประมาณ 572 องศาเซลเซียส quartz จะเกิดการเปลี่ยนเฟสจาก α -quartz เป็น β -quartz [6] โดยอุณหภูมิที่สูงขึ้นส่งผลให้เกิดการเปลี่ยนเฟสและเกิดการขยายตัวทางความร้อนขึ้นซึ่งการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite และ quartz เกิดการขยายตัว 1.6% และ 1.3% ตามลำดับ[17] เมื่อสิ้นสุดขั้นตอนการอบปูน เบ้าปูนจะถูกนำไปรองรับน้ำโลหะหลอมเหลวที่มีอุณหภูมิประมาณ 900-1200 องศาเซลเซียส ซึ่งเป็นอุณหภูมิเดียวกับอุณหภูมิที่เกิดการสลายตัวของยิปซัม โดยการสลายตัวเป็นไปตามสมการที่ 2.1 และ 2.2 ตามลำดับ[2] ซึ่งแก๊ส SO_2 และ O_2 ที่เกิดขึ้นจากการสลายตัวของยิปซัมอาจทำให้เกิดรูพรุนที่ผิวของชิ้นงานส่งผลให้คุณภาพชิ้นงานเครื่องประดับลดลงได้



นอกจากแก๊สที่เกิดจากการสลายตัวของยิปซัม ยังอาจเกิดปฏิกิริยาระหว่างของ CaSO_4 กับอนุภาค silica ส่งผลให้เกิด Ca_2SiO_4 (calcium silicates) ดังในสมการที่ 2.3 [18]



ไม่เพียงแต่ส่วนประกอบภายในผงปูนเท่านั้นแต่ขนาดของอนุภาคของผงปูนยังมีส่วนสำคัญที่ส่งผลต่อคุณภาพของชิ้นงานหล่อ อาทิ การมีขนาดอนุภาคของผงปูนที่เล็กลงทำให้ขนาดของรูพรุนในแบบปูนนั้นเล็กลงส่งผลให้ผิวปูนเรียบทำให้ผิวของชิ้นงานโลหะมีความเรียบและสวยงาม แต่การที่รูพรุนมีขนาดที่เล็กลงทำให้ความสามารถในการซึมผ่าน (permeability) ของอากาศภายในปูนออกสู่ภายนอกน้อยลงด้วย [14] ส่งผลให้เกิดแก๊สตกค้างภายในชิ้นงานเกิดเป็นตำหนิรูพรุนภายในชิ้นงานโลหะเป็นต้น ดังนั้นปูนที่ดีจึงมีขนาดอนุภาคของปูนที่เหมาะสมด้วย

2.4 โลหะไทเทเนียม (Titanium)

ไทเทเนียม เป็นโลหะที่ถูกค้นพบในประเทศอังกฤษ โดย Gregor ในปี ค.ศ. 1790 จนในช่วงสงครามโลก ไทเทเนียมเป็นที่นิยมใช้เป็นวัสดุทางการทหารของประเทศฝั่งตะวันตก ต่อมาในช่วงต้น ค.ศ.1930s ได้มีการนำโลหะไทเทเนียมมาใช้เป็นวัสดุทดแทนอวัยวะในร่างกายมนุษย์ ดังตัวอย่างในภาพที่ 2.7 แสดงตัวอย่างกระดูกเทียมไทเทเนียมที่ใช้ทดแทนกระดูกมนุษย์ ในปัจจุบัน

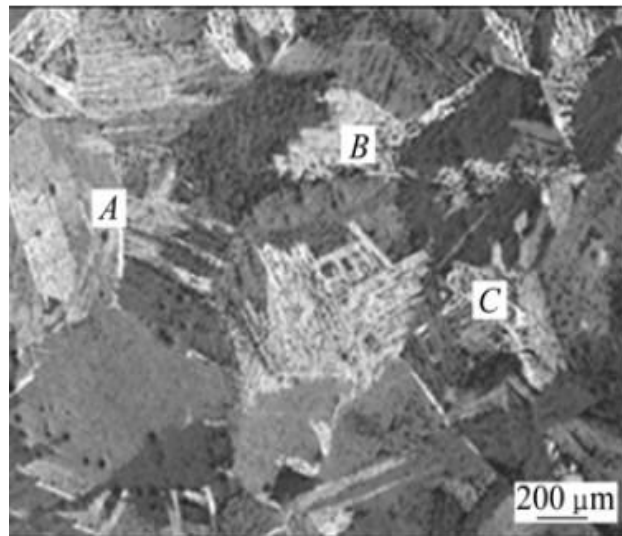
โลหะไทเทเนียมเริ่มมีความนิยมมากขึ้นในอุตสาหกรรมเครื่องประดับ เนื่องจากมีสีเงินที่สวยงาม หลากหลายเป็นที่นิยมอีกทั้งมีน้ำหนักที่เบา มีความหนาแน่นอยู่ที่ประมาณ 4.4 กรัมต่อลูกบาศก์ เซนติเมตร มีจุดหลอมเหลวที่สูงถึง 1670 องศาเซลเซียส เป็นโลหะที่มีความแข็งแรงต่อน้ำหนักที่สูง มีความไวต่อการทำปฏิกิริยากับออกซิเจนที่อุณหภูมิสูง[5]



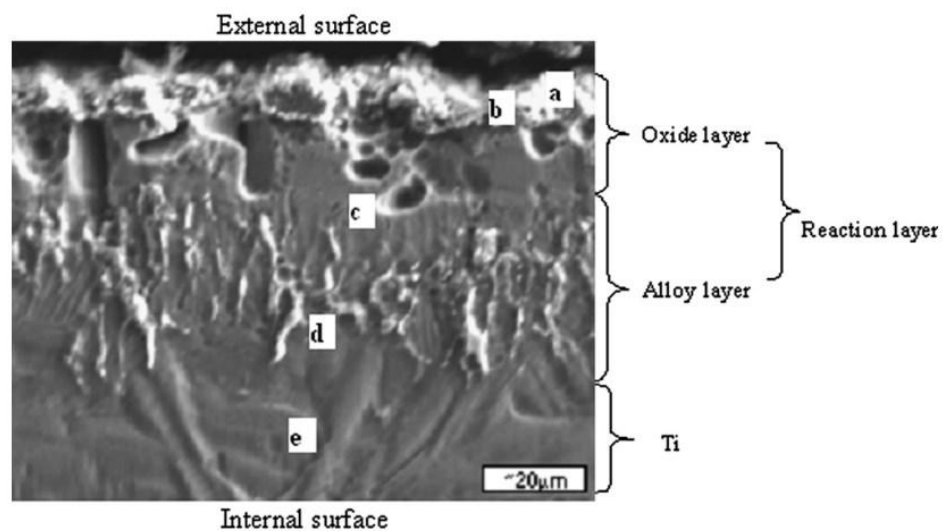
ภาพที่ 2.7 แสดงกระดูกไทเทเนียมที่ทดแทนกระดูกในร่างกายมนุษย์

โครงสร้างจุลภาคของโลหะไทเทเนียมมีลักษณะตามการเปลี่ยนแปลงเฟสและการแข็งตัว (Solidification) โดยอุณหภูมิของไทเทเนียมบริสุทธิ์ที่เริ่มมีการแข็งตัวอยู่ที่ 1670 องศาเซลเซียส และเมื่ออุณหภูมิลดลงมาถึง 882 องศาเซลเซียส เบต้าเฟส (β -phase) ที่มีโครงสร้างผลึกเป็น BCC (body-centered cubic) จะเปลี่ยนเฟสกลายเป็น แอลฟาเฟส (α -phase) ที่มีโครงสร้างผลึกเป็น HCP (hexagonal close packed) โดยโครงสร้างจุลภาคจะมีลักษณะเป็นเกรนของ β -phase ที่เกิดขึ้นมาก่อนแล้วจะมี α -phase ที่มีหลากหลายสัณฐานวิทยาอยู่ด้านในเกรนซึ่งจากภาพที่ 2.8 จะประกอบด้วย α -phase ที่ขอบเกรน บริเวณ A, α -phase ที่มีลักษณะเป็นเข็มละเอียด บริเวณ B และ α -phase ที่มีลักษณะเป็น Widmanstaetten บริเวณ C [19]

สำหรับปัญหาในการหล่อไทเทเนียมนั้นเนื่องจากไทเทเนียมมีอุณหภูมิหลอมเหลวที่สูงและสามารถเกิดปฏิกิริยากับออกซิเจนได้ง่ายที่อุณหภูมิสูง ยิ่งไปกว่านั้นในบรรยากาศปกติที่อุณหภูมิห้องก็ยังสามารถเกิดฟิล์มออกไซด์ของไทเทเนียมอยู่ที่ผิวโดยจะมีฟิล์มออกไซด์อยู่สามระดับโดยชั้นในสุดที่ติดกับเนื้อโลหะจะเป็น TiO ชั้นต่อมาเป็น Ti_2O_3 และชั้นที่ติดกับบรรยากาศเป็น TiO_2 ตามลำดับ[20, 21] ดังนั้นการหล่อไทเทเนียมจึงต้องทำในบรรยากาศที่มีแก๊สเฉื่อยปกคลุม แต่อย่างไรก็ตามเมื่อนำโลหะไทเทเนียมเข้าสู่แบบพูนจะเกิดปฏิกิริยากับออกซิเจนเกิดเป็นชั้นออกไซด์อยู่ที่ผิวโลหะไทเทเนียมที่เรียกกันว่า “alpha-case (α -case) layer” ดังแสดงในภาพที่ 2.9



ภาพที่ 2.8 แสดงโครงสร้างจุลภาคของไทเทเนียมบริสุทธิ [19]



ภาพที่ 2.9 แสดง alpha-case layer [22]

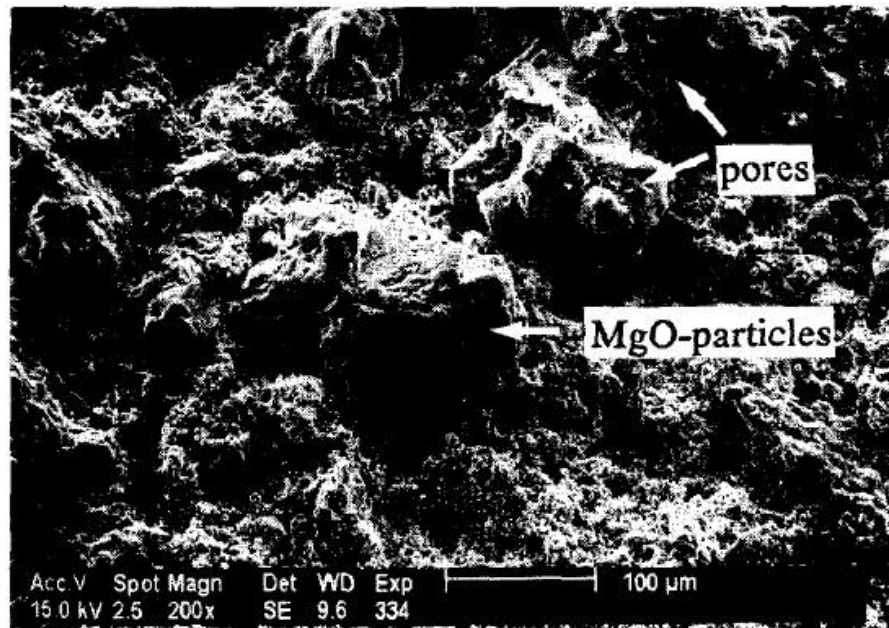
โดยการศึกษานี้ของ Guitin *et al.* [22] พบว่า alpha-case layer จะประกอบไปด้วยสามชั้น คือ oxide layer, alloy layer และ hardening layer โดยส่วนที่เป็น oxide layer และ alloy layer รวมกันเรียกว่า ชั้นเกิดปฏิกิริยา (reaction layer) alpha-case layer จะมีลักษณะแข็งแต่เปราะโดยความแข็งสูงสุดที่ผิวจะมีค่าประมาณ 800-1200Hv ซึ่งสูงมากเมื่อเทียบกับความแข็งของเนื้อโลหะไทเทเนียมที่มีความแข็งอยู่ที่ประมาณ 200Hv[23] ดังนั้นชั้นปฏิกิริยาดังกล่าวจึงไม่เป็นที่ต้องการเพราะทำให้คุณสมบัติทางกลนั้นไม่สม่ำเสมอแต่กระบวนการหล่อไม่สามารถควบคุมชั้นการเกิดปฏิกิริยาได้ ซึ่งความแข็งจะขึ้นกับความหนาของ reaction layer โดยความหนานี้ขึ้นกับการเลือก

ส่วนผสมของปูนที่ใช้ในการหล่อ โดยความหนาของชั้นปฏิกิริยาจะลดลงจากการเลือกใช้ปูน SiO₂-base, Al₂O₃-base และ MgO-base ตามลำดับ ดังนั้นการเลือกปูนกลุ่ม MgO-base จึงเป็นทางเลือกที่เหมาะสมสำหรับการหล่อไทเทเนียม

2.5 ปูนในกลุ่มสปิเนล (Spinel-based investment)

เนื่องจากไทเทเนียมมีจุดหลอมเหลวที่สูงและสามารถเกิดปฏิกิริยาที่พื้นผิวได้ง่ายที่อุณหภูมิสูง โดยผลของปฏิกิริยาทำให้เกิด alpha-case layer ที่เป็นชั้นที่แข็งแต่เปราะโดยเฉพาะอย่างยิ่งจากการเลือกใช้ปูนที่มี SiO₂ ดังนั้นจึงไม่ควรเลือกใช้ปูนที่มีส่วนผสมของ SiO₂ ในงานหล่อไทเทเนียม ซึ่งตลาดปูนในปัจจุบันมีปูนสำหรับหล่อไทเทเนียมที่หลากหลาย ปูนที่เป็นที่นิยมและสามารถหล่อได้คุณภาพชิ้นงานที่ดีคือแก่ปูนอะลูมินา-แมกนีเซีย (alumina-magnesia (non-silica) investment) หลังจากผสมผงปูนกับตัวประสาน จากนั้นทิ้งให้แข็งตัวแล้วนำไปอบจะเกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสเป็นสปิเนล กล่าวคือ MgO (magnesia) และ Al₂O₃ (alumina) จะรวมตัวกันกลายเป็นสปิเนล (MgAl₂O₄) ซึ่งมีการเปลี่ยนแปลงขนาดน้อยมากทำให้ชิ้นงานที่ได้จากการหล่อไทเทเนียมด้วยปูนชนิดนี้มีความแม่นยำที่สูงมาก [24]

นอกจากความแม่นยำในการหล่อ ความสามารถในการซึมผ่านของปูนยังเป็นปัจจัยสำคัญที่อาจทำให้เกิดความเสียหายภายในชิ้นงาน กล่าวคือแก๊สที่ไม่สามารถซึมผ่านออกจากเบ้าปูนได้จะทำให้ชิ้นงานโลหะที่ได้จากการหล้อมีลักษณะที่เป็นโพรงด้านในชิ้นงาน ซึ่งความสามารถในการซึมผ่านที่ดีนั้นเป็นผลมาจากขนาดรูพรุนที่เหมาะสม ซึ่งมาจากการมีขนาดอนุภาคผงปูนที่เหมาะสม โดยขนาดที่เหมาะสมที่ทำให้มีความสามารถในการซึมผ่านที่ดีและสามารถหล่อชิ้นงานที่มีคุณภาพได้นั้นต้องมีขนาดอยู่ในช่วง 60-280 ไมครอน [25] แสดงในภาพที่ 2.10



ภาพที่ 2.10 แสดงขนาดอนุภาคของผงปูนที่ให้อะไรในการหล่อไทเทเนียม [25]

ดังนั้นการเลือกใช้ปูนในกลุ่มสปิเนลจึงเป็นทางเลือกที่เหมาะสมในการหล่อไทเทเนียมด้วยกระบวนการหล่อแบบซีพิงหาย

บทที่ 3

ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

3.1 วัสดุที่ใช้ในงานวิจัยใช้ในงานวิจัย

ในงานวิจัยนี้มีวัสดุที่ใช้ในการทดสอบอยู่ 3 ประเภท ได้แก่ โลหะ, ปูนเซรามิก และ ดันแบบพอลิเมอร์ โดยมีรายละเอียดดังต่อไปนี้

3.1.1 โลหะที่ใช้ในการหล่อแบบซีดีหยาบ

1. โลหะทอง 18K เป็นเกรดที่นิยมใช้ในอุตสาหกรรมเครื่องประดับเนื่องจากมีความแข็งแรงที่มากกว่าทองบริสุทธิ์
2. โลหะไทเทเนียมบริสุทธิ์เกรด 2 เป็นเกรดที่มีความนิยมใช้สำหรับผลิตชิ้นงานที่เป็นเครื่องประดับเนื่องจากมีความเหนียวและสามารถขึ้นรูปได้ง่าย

3.1.2 ปูนเซรามิก

1. ปูนในกลุ่มยิปซัม (gypsum-bonded investment) 3 แบบ สำหรับหล่อโลหะทอง 18K
2. ปูนในกลุ่มสปิเนล (spinel-based investment) 1 แบบ สำหรับหล่อโลหะไทเทเนียมบริสุทธิ์เกรด 2

3.1.3 ดันแบบพอลิเมอร์

3.2 ตรวจสอบส่วนผสมทางเคมี

3.2.1 ตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของโลหะ

การทดสอบเพื่อหาค่าส่วนผสมทางเคมีของโลหะทองและโลหะไทเทเนียม โดยใช้เทคนิค X-ray fluorescence (XRF) ซึ่งอาศัยหลักการคือ เมื่อชิ้นงานได้รับรังสีเอ็กซ์ ที่มีค่าพลังงานที่สูงพอที่จะทำให้อิเล็กตรอนชั้นในหลุดออกจากชั้นพลังงานและเกิดความไม่เสถียร อิเล็กตรอนชั้นนอกจึงเปลี่ยนชั้นพลังงานเพื่อให้เกิดความเสถียร และปลดปล่อยโฟตอนออกมาซึ่งจะมีความเป็นเอกลักษณ์เฉพาะของแต่ละธาตุทำให้เราสามารถทราบถึงธาตุต่างๆ ที่อยู่ในวัสดุที่ศึกษาได้

3.2.2 ตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของผงปูนเซรามิก

การทดสอบเพื่อหาค่าส่วนผสมทางเคมีของผงปูนโดยใช้เทคนิค X-ray fluorescence (XRF) เช่นเดียวกันโลหะ

3.3 การเตรียมชิ้นงานเพื่อตรวจสอบปูนเซรามิก

มีขั้นตอนการเตรียมชิ้นงานดังต่อไปนี้

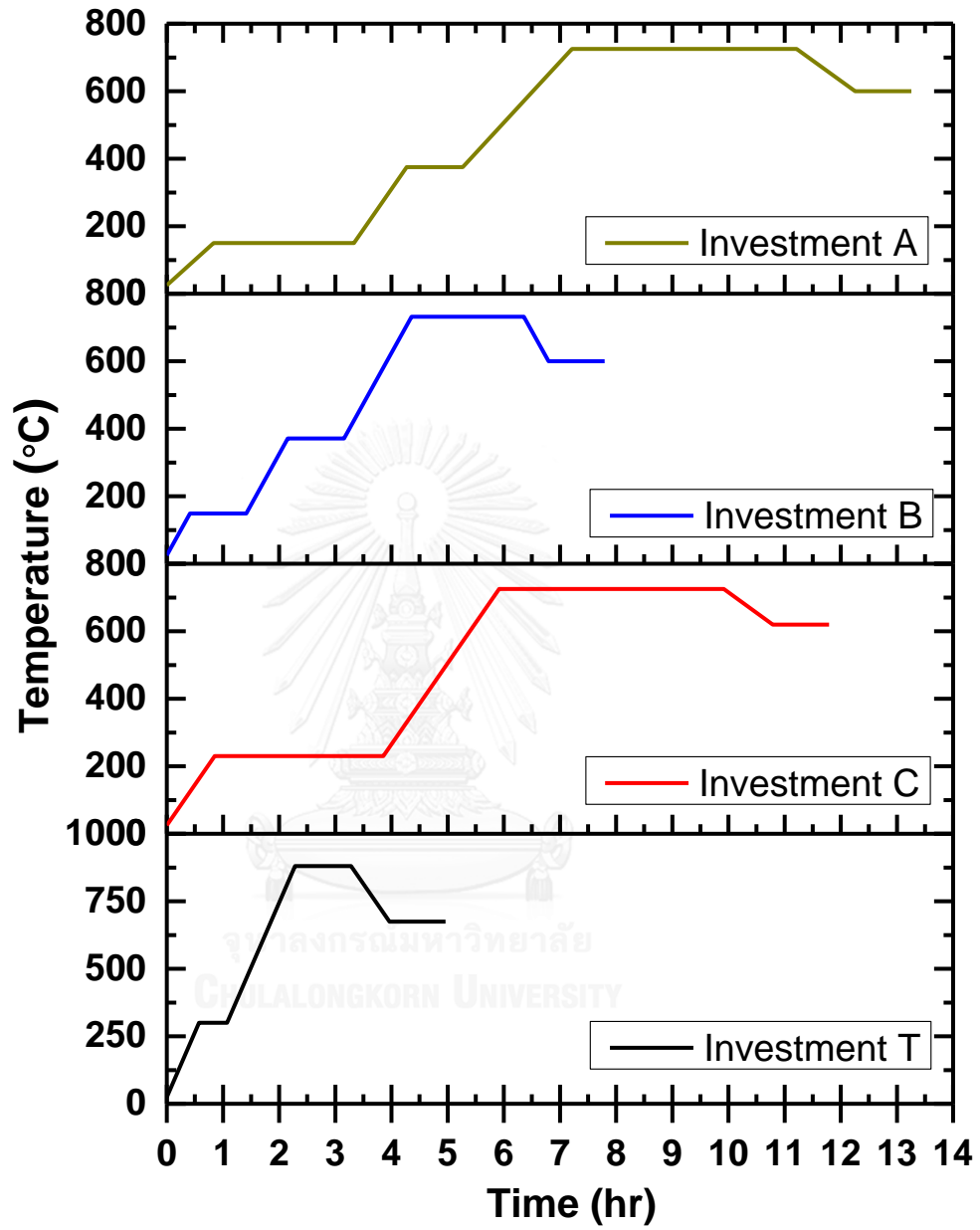
1. เตรียมผงปูนเซรามิก (Investment powder) ทั้งสี่แบบ ได้แก่ แบบ A (Investment A), แบบ B (Investment B), แบบ C (Investment C) สำหรับหล่อวัสดุโลหะทอง และ แบบ T (Investment T) สำหรับหล่อโลหะไทเทเนียม
2. ผสมผงปูนเซรามิกทั้งสี่แบบกับตัวประสานและปล่อยให้แข็งตัวเป็น Green part โดยตัวประสานในปูนกลุ่มยิปซัมคือ น้ำ ส่วนตัวประสานในปูนกลุ่มสปิเนลคือ น้ำสปิเนล (spinel liquid)
3. นำ Green part มาผ่านการอบ (Burned out flask) โดยใช้ระยะเวลาในการอบ 3 รูปแบบ (Condition) ซึ่งแสดงชิ้นงานหลังการอบใน ตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 แสดงชิ้นงานที่ทำการอบไล่ต้นแบบพอลิเมอร์ในรูปแบบต่างๆ

รูปแบบการอบ	Gypsum-bonded investment			Spinel-based investment
	A	B	C	T
Condition 1	A1	B1	C1	T1
Condition 2	A2	B2	C2	-
Condition 3	A3	B3	C3	T3

โดยการปรับอุณหภูมิและอัตราการให้ความร้อนมีรูปแบบการอบดังต่อไปนี้

1. อบตามคู่มือของปูนแต่ละชนิด (Condition 1) ซึ่งแสดงในภาพที่ 3.1
2. อบแบบเร่งระยะเวลาการอบ (Condition 2) แสดงในภาพที่ 3.2
3. อบแบบหน่วงระยะเวลาการอบ (Condition 3) ได้แก่ รูปแบบการอบแบบที่ 3 ของปูนกลุ่มยิปซัม และ กลุ่มสปิเนล โดยแสดงในภาพที่ 3.3 และ ภาพที่ 3.4 ตามลำดับ



ภาพที่ 3.1 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 1

โดยรายละเอียดของรูปแบบการอบที่ 1 ของปูนแต่ละแบบเป็นต่อไปดังนี้

Investment A

- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 2.5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 150 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 2 ชั่วโมง 30 นาที
- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 4 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 375 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง
- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 3 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 725 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 4 ชั่วโมง
- ลดอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 2 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 600 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

Investment B

- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 149 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง
- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 371 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง
- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 732 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 2 ชั่วโมง
- ลดอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 600 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

Investment C

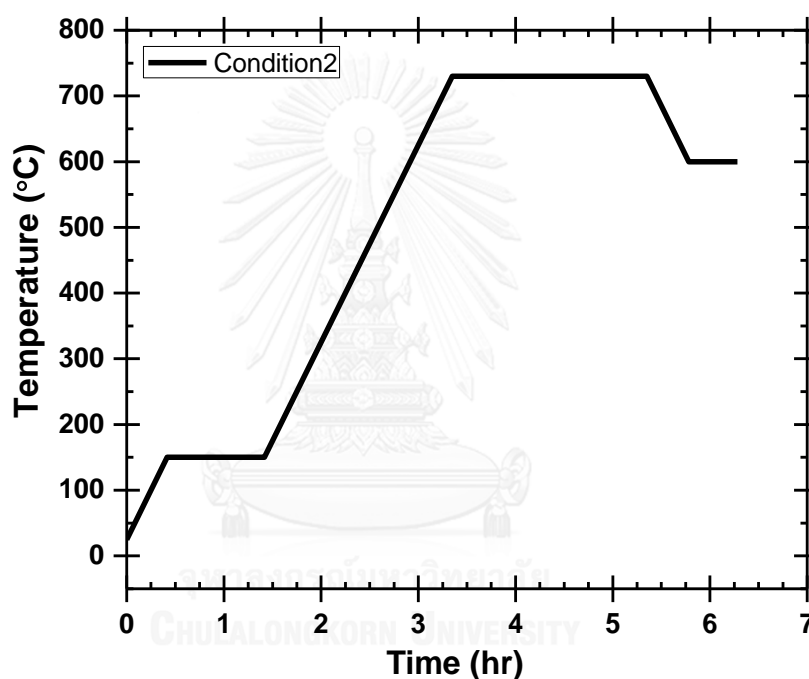
- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 4 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 230 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 3 ชั่วโมง
- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 4 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 725 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 4 ชั่วโมง
- ลดอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 2 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 600 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

Investment T

-เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 8 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 300 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้
ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 30 นาที

-เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 8 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 880 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้
ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

-ลดอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 675 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้
อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง



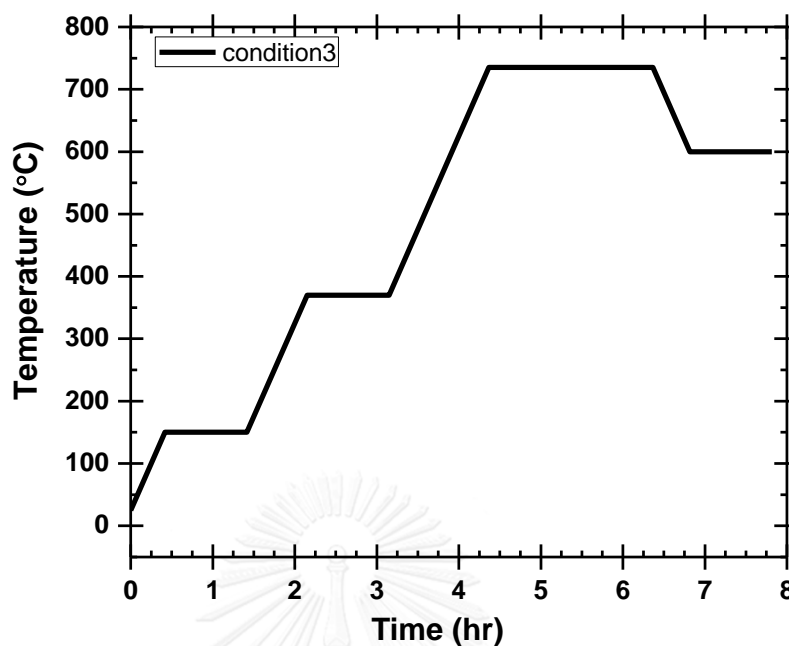
ภาพที่ 3.2 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 2 ของปูนกลุ่มยิปซัม

โดยรูปแบบการอบปูนที่ 2 ของปูนกลุ่มยิปซัมนีมีรายละเอียดดังต่อไปนี้

-เพิ่มอุณหภูมิ ด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 150 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้
ไว้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

-เพิ่มอุณหภูมิ ด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 730 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้
ไว้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 2 ชั่วโมง

-ลดอุณหภูมิ ด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 600 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้
ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 30 นาที



ภาพที่ 3.3 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 3 ของปูนกลุ่มยิปซัม

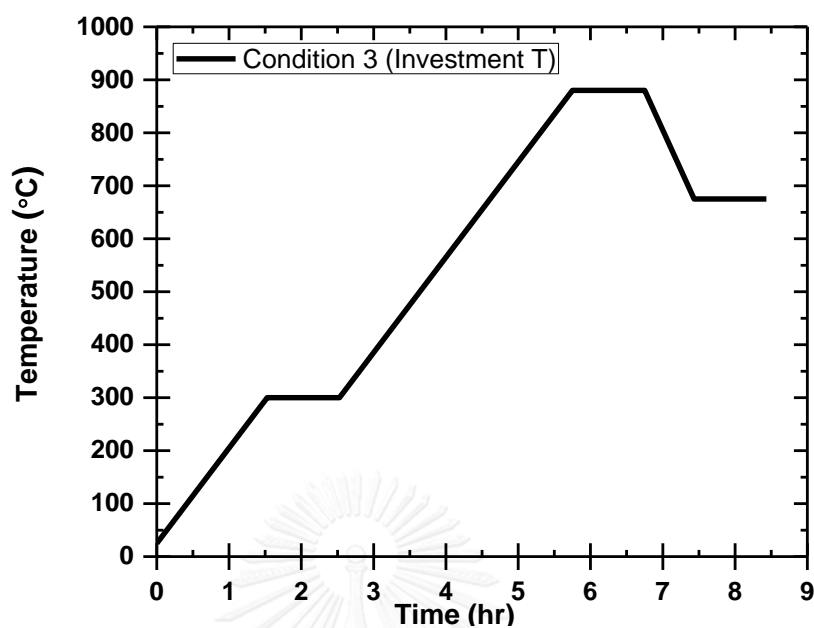
โดยรูปแบบการอบปูนที่ 3 ของปูนกลุ่มยิปซัมมีรายละเอียดดังต่อไปนี้

-เพิ่มอุณหภูมิ ด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 150 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

-เพิ่มอุณหภูมิ ด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 370 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

-เพิ่มอุณหภูมิ ด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 730 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 2 ชั่วโมง

-ลดอุณหภูมิ ด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 600 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ที่อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง



ภาพที่ 3.4 แสดงการอบปูนรูปแบบที่ 3 ของปูนกลุ่มสปิเนล

โดยรูปแบบการอบปูนที่ 3 ของ Investment T แสดงรายละเอียดดังต่อไปนี้

- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 3 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 300 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง
- เพิ่มอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 3 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 880 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง
- ลดอุณหภูมิด้วยอัตราเร็ว 5 องศาเซลเซียสต่อนาที จนอุณหภูมิถึง 675 องศาเซลเซียส แล้วปล่อยให้ อุณหภูมินี้เป็นเวลา 1 ชั่วโมง

3.4 การศึกษาสมบัติทางความร้อนของปูนเซรามิกและต้นแบบพอลิเมอร์

ทำการศึกษาสมบัติทางความร้อนของปูนเซรามิกที่เป็น Green parts และต้นแบบที่เป็นซีเมนต์ โดยใช้เครื่อง Differential Scanning Calorimeter (DSC) / Thermogravimetric (TG) รุ่น Netzsch-F30 ดังภาพที่ 3.5 ทำการวัดค่าอุณหภูมิต่างๆ ที่มีปฏิกิริยาเกิดขึ้น ซึ่งใช้หลักการวัดค่า พลังงานและน้ำหนักที่เปลี่ยนแปลงไป ซึ่งพลังงานที่เปลี่ยนแปลงไปนั้นอาจเป็นเกิดปฏิกิริยา คายพลังงาน(Exothermic) หรือ ดูดพลังงาน (endothermic) เมื่อพิจารณาพร้อมกับข้อมูลการ เปลี่ยนแปลงน้ำหนักจึงทำให้ทราบว่าปฏิกิริยาใดเกิดขึ้นที่อุณหภูมินั้นๆ



ภาพที่ 3.5 แสดงเครื่อง DSC/TG

3.5 การวิเคราะห์โครงสร้างจุลภาคและการทดสอบสมบัติทางกลของปูนเชรามิก

เครื่องมือที่ใช้ในการทดสอบ ได้แก่

1. กล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราด (Field Emission Scanning Electron Microscope, FESEM) รุ่น JSM-7001F ที่ใช้ Schottky type field-emission เป็นแหล่งกำเนิดอิเล็กตรอนทำให้กล้องมีความคมชัด (resolution) สูงถึง 1.2 นาโนเมตร ในการตรวจสอบโครงสร้างจุลภาคของผงปูน A, B, C, T และ ปูนหลังอบตามคู่มือของปูนแต่ละชนิดได้แก่ A1, B1, C1, T1 รวม 8 ตัวอย่าง โดยทำการตรวจสอบด้วย Secondary Electron Detector

2. Energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS) รุ่น INCA PentalFETx3 เพื่อตรวจสอบธาตุองค์ประกอบในเฟสของผงปูน A, B, C, T และ ปูนหลังอบตามคู่มือของปูนแต่ละชนิดได้แก่ A1, B1, C1, T1 รวม 8 ตัวอย่าง โดยทำการวิเคราะห์ธาตุแบบแผนที่ (Mapping)

3. X-ray diffractometer (XRD) รุ่น PANalytical-EMPYREAN เพื่อตรวจสอบเฟสของผงปูน A, B, C, T และ เฟสของปูนที่เปลี่ยนแปลงไปหลังอบตามคู่มือของปูนแต่ละชนิดได้แก่ A1, B1, C1, T1 รวมถึง Green parts ทั้ง 4 ชนิด รวม 12 ตัวอย่าง โดยทำการตรวจสอบเก็บข้อมูลทุกๆ 0.1 องศา ตั้งแต่มุม 15-90 องศา ซึ่งใช้ Cu-K α เป็นแหล่งกำเนิดพลังงาน (X-ray source)

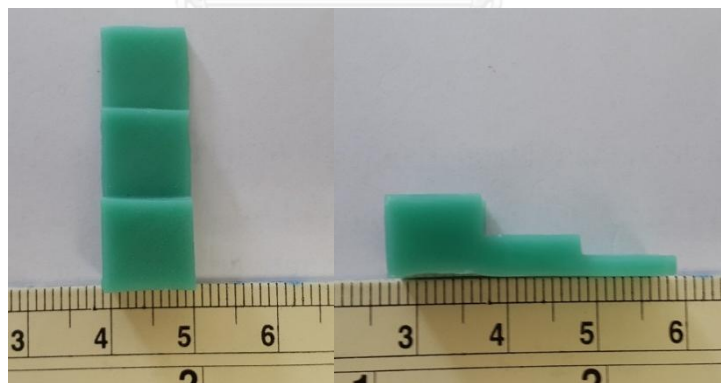
4. In-situ X-ray diffractometer (In-situ XRD) เพื่อตรวจสอบการเปลี่ยนแปลงเฟสขณะได้รับความร้อนของ Green part ของปูนกลุ่มยิปซัม โดยเลือกทำการทดสอบใน Investment A อุนทุมิที่ใช้ในการตรวจสอบ ได้แก่ อุนทุมิห้อง, 70 องศาเซลเซียส, 150 องศาเซลเซียส, 250 องศาเซลเซียส, 375 องศาเซลเซียส, 580 องศาเซลเซียส, 725 องศาเซลเซียส, และลดอุณหภูมิจนถึง 600 องศาเซลเซียส ตามลำดับ

5. Particle Analyzer รุ่น Mastersizer-2000 เพื่อตรวจสอบขนาดของอนุภาคผงปูน A, B, C และ T ซึ่งทำการวัดโดยใช้อากาศเป็นตัวกลางและใช้เทคนิคการวิเคราะห์แบบ Laser diffraction Technique

6. วัดความแข็งแรงด้วยการทดสอบแรงกด (Compression test) โดยใช้เครื่อง Universal Testing Machine เพื่อทดสอบความแข็งแรงของปูนหลังการอบโดยมีชิ้นงานปูน A1-3, B1-3, C1-3, T1 และ T3 รวม 11 ตัวอย่าง โดยใช้ความเร็วในการกดที่ 1 มิลลิเมตรต่อนาที

3.6 การออกแบบชิ้นงานโลหะ

ออกแบบชิ้นงานเป็นชิ้นบันไดที่มีความสูงแตกต่างกันสามความสูง ได้แก่ 2 มิลลิเมตร 4 มิลลิเมตร และ 8 มิลลิเมตร ซึ่งมีความกว้าง 10 มิลลิเมตร ยาว 30 มิลลิเมตร เป็นไปตาม DIN 13906 [14] ซึ่งแสดงในภาพที่ 3.6



ภาพที่ 3.6 แสดงขนาดต้นแบบพอลิเมอร์

3.7 การหล่อชิ้นงานโลหะ

หล่อโลหะผสมทองและไทเทเนียมด้วยกระบวนการหล่อแบบซีพิงท้าย โดยมีขั้นตอนดังต่อไปนี้

1. เริ่มจากการติดตั้งเทียนหรือแบบพอลิเมอร์
2. ผสมผงปูนกันสารละลายให้เข้ากันจากนั้นเทปูนที่ผสมให้ท่วมแบบที่เตรียมไว้
3. ดูดอากาศออกเพื่อทำให้อากาศในแบบปูนน้อยลง
4. ทิ้งให้ปูนแข็งตัวประมาณ 1-2 ชั่วโมง
5. นำเข้าปูนที่แข็งแล้วเข้าเตาอบแล้วทำการอบตามรูปแบบที่กำหนดไว้
6. นำเข้าที่อบแล้วเข้าเครื่องหล่อโลหะจากนั้นโลหะจะถูกหลอมเหลวแล้วเทเข้าสู่เข้าปูน
7. รอจนน้ำโลหะเย็นตัวแล้วทำการกำจัดแบบปูนทิ้ง จะได้ชิ้นงานโลหะตามแบบที่ต้องการ

ทั้งนี้ชิ้นงานทองนั้นได้ผ่านการหล่อจากกระบวนการหล่อจริงในภาคอุตสาหกรรม ส่วนการหล่อไทเทเนียมนั้นปฏิบัติตามขั้นตอนที่กล่าวไปแล้วข้างต้น ณ ห้องปฏิบัติการคณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

3.8 การวิเคราะห์ลักษณะพื้นผิวและความแข็งของชิ้นงานโลหะ

เครื่องมือที่ใช้ในการทดสอบได้แก่

1. เครื่องวัดความเรียบผิว (Profilometer) รุ่น TALYSCAN150 เพื่อตรวจสอบความเรียบผิวของชิ้นงาน โดยใช้ความเร็วในการกวาดตรวจ (scan) 1500 ไมครอนต่อวินาที ทำการกวาดตรวจเก็บข้อมูล 1 ตารางมิลลิเมตร

2. เครื่องทดสอบความแข็งแบบวิกเกอร์ (Vickers Hardness) เพื่อตรวจสอบความแข็งผิวของชิ้นงานโลหะทองผสมและโลหะไทเทเนียมบริสุทธิ์ที่ได้จากการหล่อ โดยใช้แรงกดที่ 200 gf [26, 27]

3. กล้องจุลทรรศน์แบบแสง (Optical Microscope) เพื่อตรวจสอบลักษณะโครงสร้างจุลภาคใต้ผิวของชิ้นงานโลหะทองผสมและโลหะไทเทเนียมบริสุทธิ์ หลังจากการหล่อที่รูปแบบการหล่อต่างๆ และตัดชิ้นงานตามขวาง (cross section) ด้วยเครื่องตัดละเอียดแล้ว ชัดกระดาชทราบ เบอร์ 1200 2000 และ 2500 จากนั้นขัดละเอียดด้วย ผงเพชรขนาด 3 ไมครอน และ 1 ไมครอน ตามลำดับ

3.9 วิเคราะห์และรายงานผลการทดลอง

บทที่ 4

ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง

4.1 ส่วนผสมทางเคมีของวัสดุที่ใช้ในการทดลอง

4.1.1 ผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของโลหะทองผสมและโลหะไทเทเนียมบริสุทธิ์

โดยใช้เครื่อง XRF ที่สถาบันวิจัยและพัฒนาอัญมณีและเครื่องประดับแห่งชาติ (สอว) ในการตรวจสอบปริมาณส่วนผสมทางเคมีซึ่งปริมาณธาตุที่ได้จากการวิเคราะห์แสดงในตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 แสดงผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของโลหะ

ชนิดของโลหะ	ปริมาณธาตุ (wt%)			
	Au (Gold)	Ag (Silver)	Cu (Copper)	Ti (Titanium)
โลหะทองผสม	75.06	12.31	12.61	-
โลหะไทเทเนียม	-	-	-	99.99

จากผลการวิเคราะห์ธาตุในโลหะทองผสมพบว่าปริมาณทองคำบริสุทธิ์อยู่ที่ 75.06% ซึ่งจัดว่าอยู่ในทองคำเกรด 18K (18 karat) ที่มีโลหะเงินและทองแดงผสมอยู่ 12.31% และ 12.61% ตามลำดับ ส่วนโลหะไทเทเนียมมีความบริสุทธิ์อยู่ที่ 99.99%Ti

4.1.2 ผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของผงปูนทั้ง 4 แบบ

การตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของปูนทั้ง 4 แบบ ด้วยเครื่อง XRF ได้ผลการวิเคราะห์แสดงในตารางที่ 4.2 โดยที่ผงปูน Investment A-C นั้นเป็นปูนในกลุ่มยิปซัม มีธาตุที่เป็นส่วนประกอบหลัก ได้แก่ Si, S และ Ca ซึ่งเป็นธาตุที่มาจากสารประกอบ SiO_2 และ CaSO_4 ตามลำดับ[6] นอกจากนั้นยังมีสารเติมแต่ง (additive) ได้แก่ Al และ Mg ที่อาจส่งผลกระทบต่อการทำงานของปูนหลังจากการผสมผงปูนกับน้ำ โดยใน Investment B นั้นมีสารเติมแต่งในปริมาณที่น้อย จึงไม่ทำมาพิจารณาเมื่อเทียบกับปริมาณของสารเติมแต่งของปูนแบบอื่น

ผงปูนในกลุ่มสปิเนล หรือ Investment T มีธาตุที่เป็นส่วนประกอบหลัก ได้แก่ Al, Mg และ Zr ซึ่งมาจากสารประกอบ Al_2O_3 , MgO และ ZrO_2 ตามลำดับ นอกจากนี้ยังพบธาตุอื่นๆ ได้แก่ Si, Ca และ Hf ซึ่งอาจส่งผลกระทบต่อสมบัติบางประการของปูนและกระบวนการหล่อได้

ตารางที่ 4.2 แสดงผลการตรวจสอบส่วนผสมทางเคมีของผงปูน

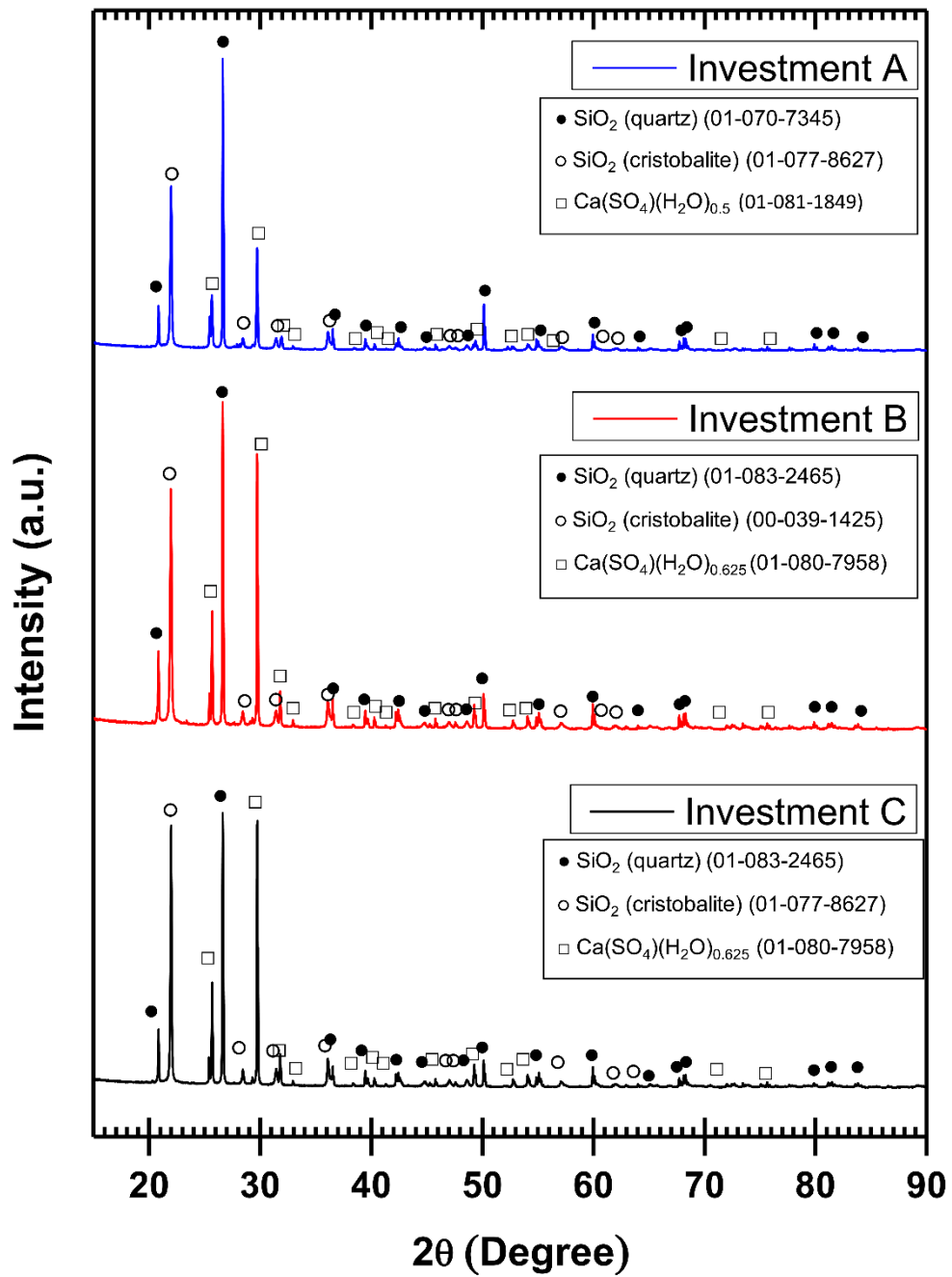
Investment powder	Chemical Element (wt%)						
	Si	S	Ca	Al	Mg	Zr	Hf
A	68.28	16.10	15.33	0.29	-	-	-
B	68.64	15.71	15.65	-	-	-	-
C	69.43	14.93	14.93	0.45	0.26	-	-
T	1.12	-	0.73	39.34	46.69	10.55	1.58

4.2 การศึกษาส่วนประกอบและขนาดของอนุภาคปูน

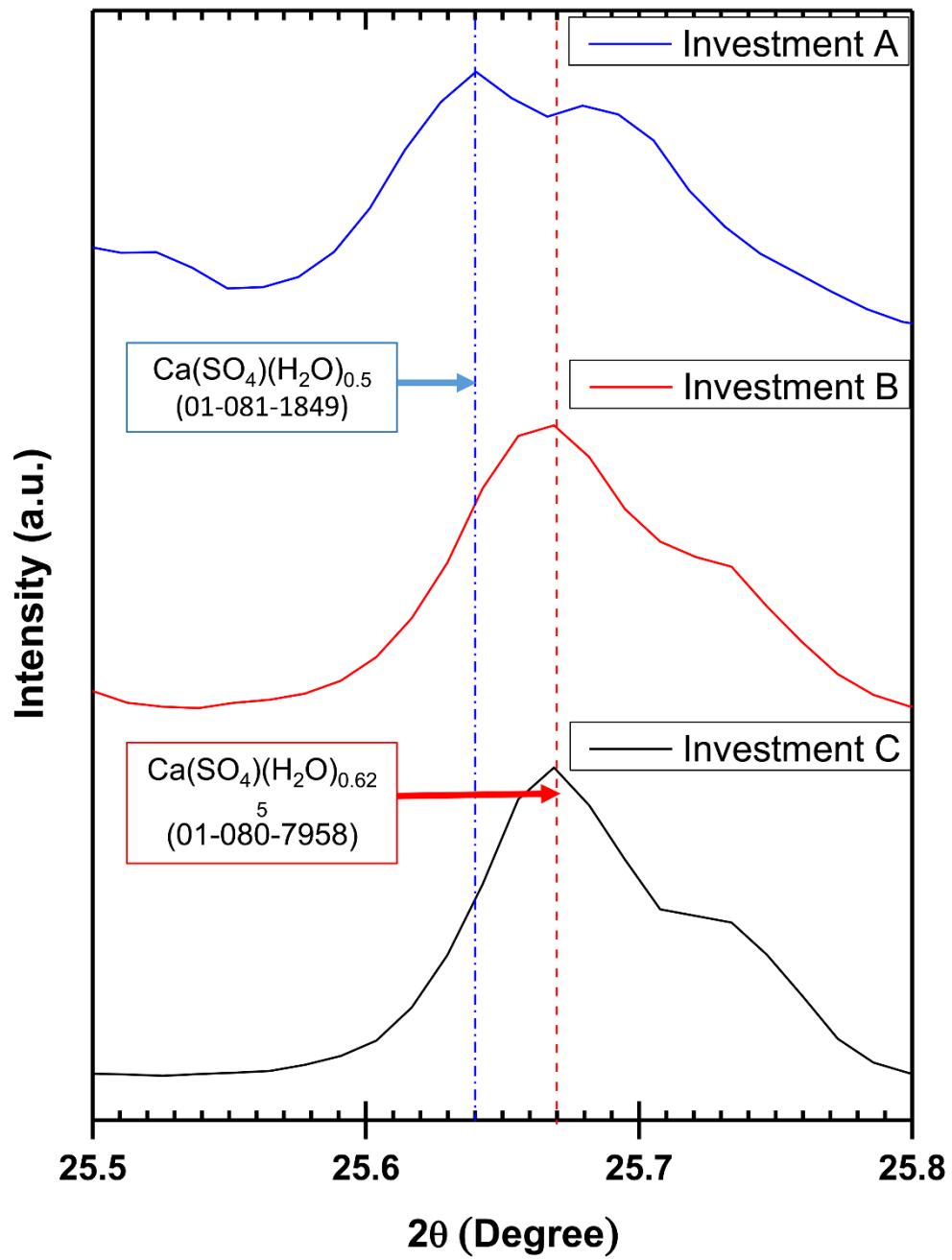
4.2.1 ผลการศึกษาส่วนประกอบของปูนกลุ่มยิปซัม

จากการศึกษาส่วนประกอบของผงปูนกลุ่มยิปซัมด้วยเทคนิค XRD ได้แสดงผลการทดสอบในภาพที่ 4.1 พบว่าผงปูนทั้งสามแบบประกอบด้วย SiO_2 ที่มีเฟสเป็น α -quartz มีโครงสร้างผลึกเป็น hexagonal และ α -cristobalite มีโครงสร้างผลึกเป็น tetragonal ซึ่งอัตราส่วนของสองเฟสนี้มีผลต่อความแข็งแรงของเบ้าปูน นอกจากนี้ซิลิกาแล้วผงปูนกลุ่มยิปซัวยังประกอบด้วยตัวประสานที่เป็น $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ (calcium sulfate hemihydrate) ใน Investment A ส่วนใน Investment B และ Investment C นั้นพบตัวประสานที่เป็น $\text{CaSO}_4 \cdot 0.625(\text{H}_2\text{O})$ (calcium sulfate subhydrate) แสดงในภาพที่ 4.2 การที่ตัวประสานมีโมเลกุลของน้ำอยู่ในผลึกมากกว่าตัวประสานของผงปูนแบบอื่นเนื่องมาจากกระบวนการผลิตปูนที่มีอุณหภูมิ, ความชื้น และความดันไอน้ำที่ต่างกันทำให้มีน้ำในผลึกที่แตกต่างกัน [28]

นอกจากการวิเคราะห์ชนิดของสารประกอบแล้วข้อมูลจาก XRD ยังสามารถวิเคราะห์ปริมาณของสารประกอบแต่ละเฟสได้ด้วยเทคนิค Rietveld refinement ซึ่งคำนวณโดยใช้โปรแกรม HighScore Plus โดยปริมาณสารประกอบของปูนกลุ่มยิปซัมแสดงในตารางที่ 4.3 ซึ่งค่า GoF (Goodness Of Fit) แสดงความแม่นยำในการคำนวณปริมาณสารประกอบ กล่าวคือ ความแม่นยำจะมากที่สุดเมื่อค่า GoF เท่ากับ 1 ซึ่งค่าที่ได้จากการคำนวณที่แสดงในตารางนั้นมีค่าใกล้เคียงหนึ่งทำให้ยืนยันได้ว่าข้อมูลที่ได้จากการคำนวณปริมาณสารประกอบในปูนมีความถูกต้องแม่นยำและเชื่อถือได้



ภาพที่ 4.1 แสดงส่วนประกอบของผงปูนกลุ่มยิปซัมจากเทคนิค XRD



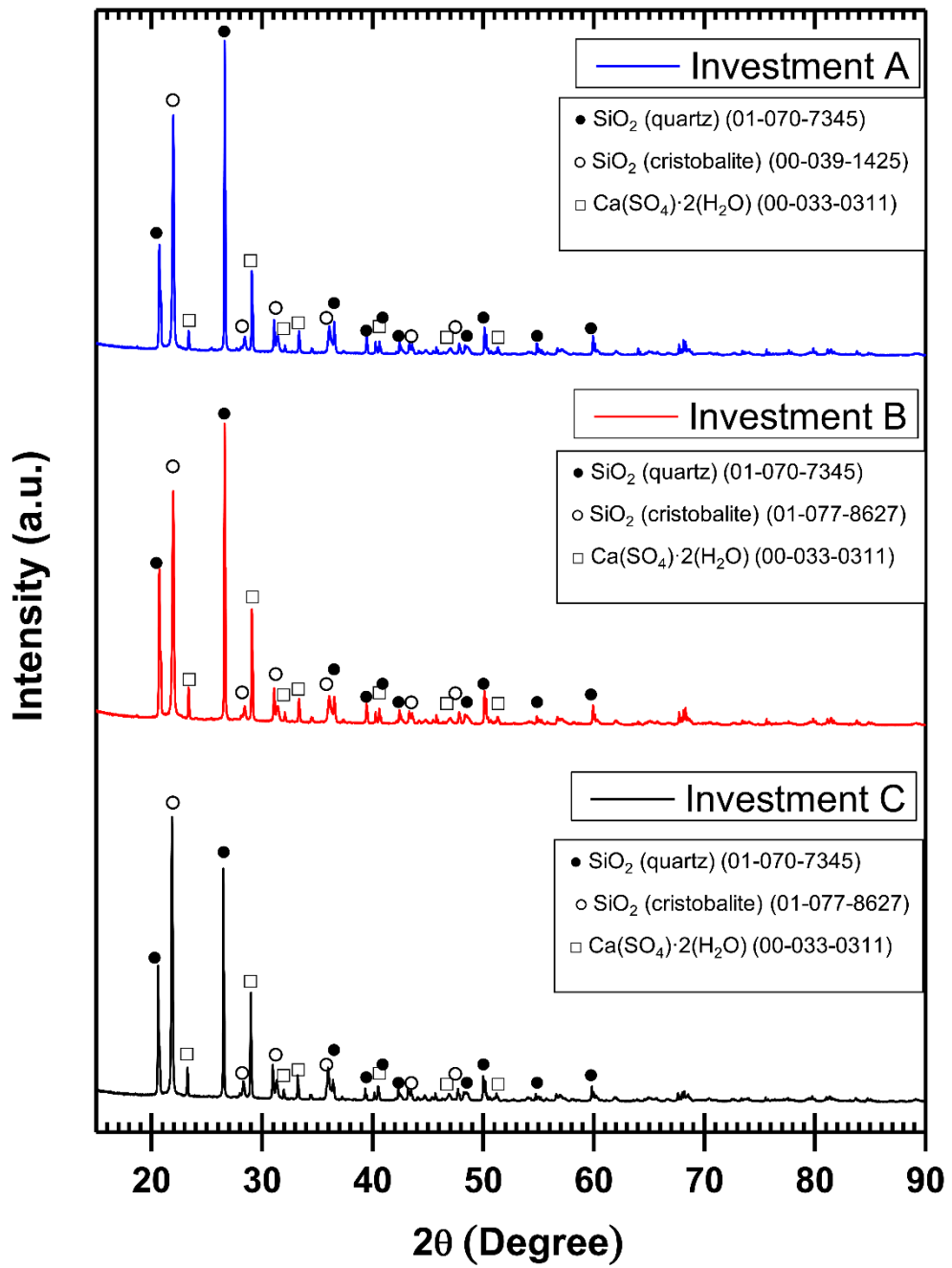
ภาพที่ 4.2 แสดงความแตกต่างระหว่าง $\text{CaSO}_4(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$ กับ $\text{CaSO}_4(\text{H}_2\text{O})_{0.625}$

ตารางที่ 4.3 แสดงปริมาณสารประกอบในผงปูนกลุ่มยิปซัม

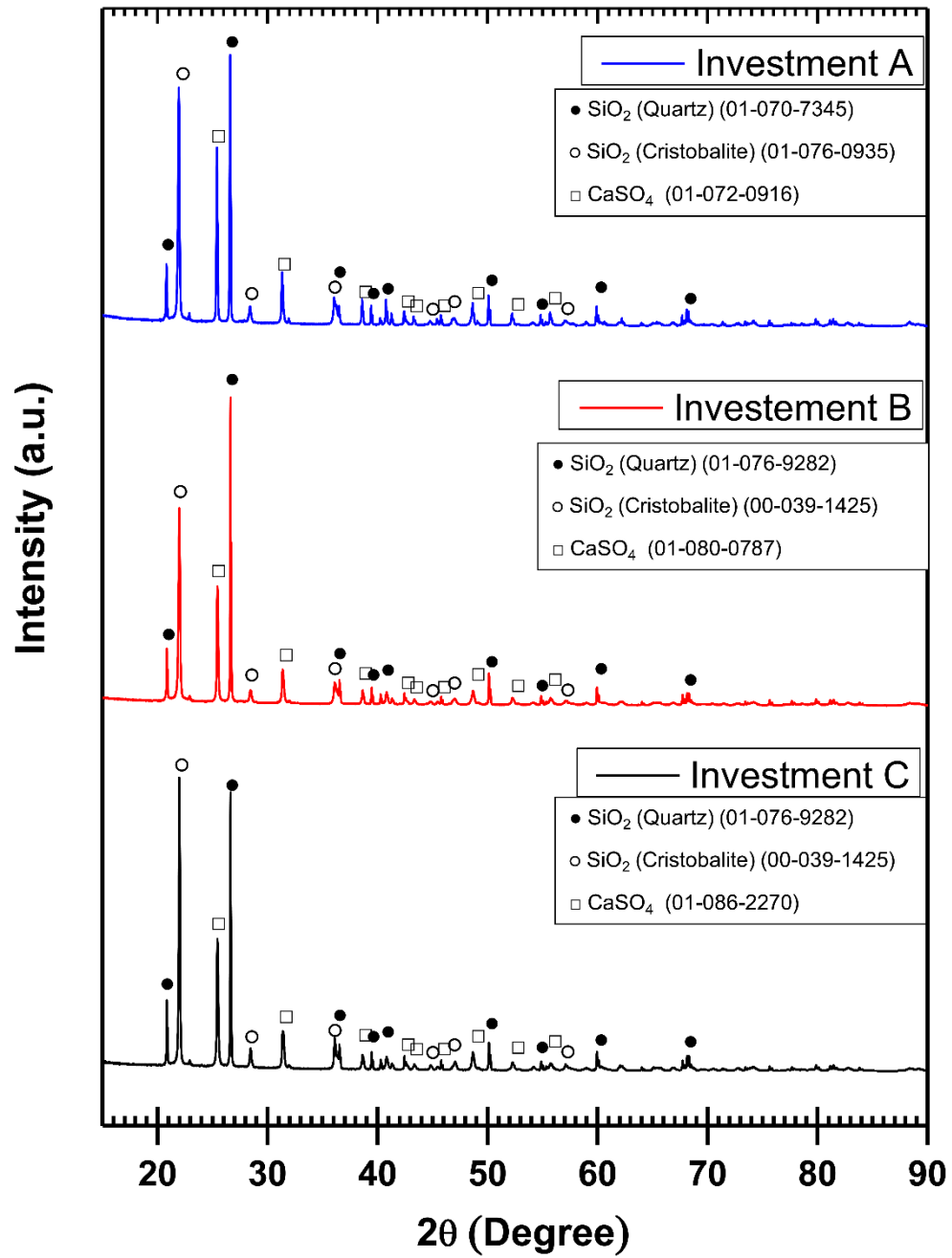
Sample powder	%SiO ₂ (Quartz)	%SiO ₂ (Cristobalite)	%Calcium Sulfate Hydrate	GoF (Goodness of Fit)
Investment A	34.3	33.8	31.9	1.6
Investment B	27.1	37.3	35.5	1.7
Investment C	28.6	35.0	36.4	1.8

การศึกษา Green part หรือผงปูนที่ผสมกับน้ำในอัตราส่วน 100 ต่อ 38 โดยน้ำหนักแล้วทิ้งให้แข็งตัวในบรรยากาศปกติ พบว่า เฟสของตัวประสาน CaSO₄•0.5(H₂O) ใน Investment A รวมถึง CaSO₄•0.625(H₂O) ใน Investment B และ C นั้นเกิดการเปลี่ยนแปลงเป็น CaSO₄•2(H₂O) (calcium sulfate dihydrate) จากผลการทดสอบ XRD ของ Green part ปูนทั้งสามแบบซึ่งแสดงในภาพที่ 4.3 โดยน้ำที่ผสมเข้าไปทำให้เกิดปฏิกิริยา hydration ของแคลเซียมซัลเฟต

จากนั้นเมื่อทำการอบเข้าปูนที่เป็น Green part ตามรูปแบบการอบของคู่มือของปูนแต่ละแบบแล้วพบเฟสของ CaSO₄ (calcium sulfate anhydrate) แสดงผล XRD ของปูนที่ผ่านการอบในภาพที่ 4.4 ซึ่งเฟสที่เกิดขึ้นนั้นมาจากการเกิดปฏิกิริยา dehydration ที่น้ำในผลึกของ CaSO₄•2(H₂O) นั้นออกจากผลึกกลายเป็น CaSO₄ [6] แต่อย่างไรก็ตาม เฟสของซิลิกา ทั้ง quartz และ cristobalite นั้นไม่พบการเปลี่ยนแปลงเฟสอาจเนื่องมาจากเกิดการเปลี่ยนแปลงย้อนกลับขณะเย็นตัว เนื่องจากการศึกษาก่อนหน้า[6] พบการเปลี่ยนเฟสของ α -cristobalite เป็น β -cristobalite ที่อุณหภูมิประมาณ 250 องศาเซลเซียส และการเปลี่ยนเฟสของ α -quartz เป็น β -quartz ที่อุณหภูมิประมาณ 572 องศาเซลเซียส จึงได้มีการศึกษาพฤติกรรมทางความร้อนของปูนกลุ่มยิปซัมขณะทำการอบเพิ่มเติม ซึ่งแสดงผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลองในหัวข้อการศึกษาพฤติกรรมของปูนระหว่างกระบวนการเตรียมเข้าปูน

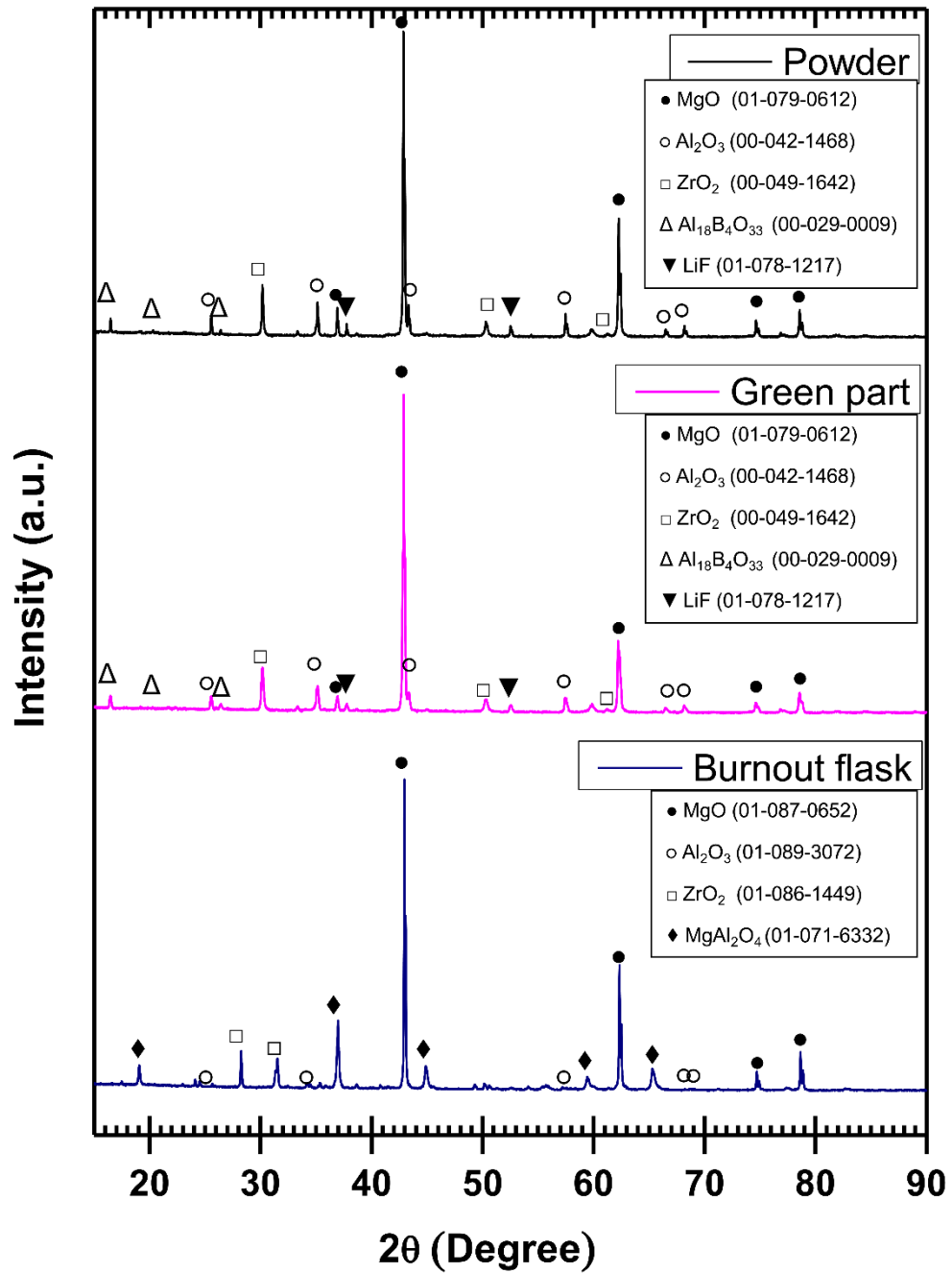


ภาพที่ 4.3 แสดงส่วนประกอบของ Green part ของปูนกลุ่มยิปซัมจากเทคนิค XRD



ภาพที่ 4.4 แสดงส่วนประกอบของปูนที่ผ่านการอบจากเทคนิค XRD

4.2.2 ผลการศึกษาส่วนประกอบของปูนกลุ่มสปีเนล



ภาพที่ 4.5 แสดงส่วนประกอบของผงปูน, Green part และปูนหลังการอบ ของกลุ่มสปีเนลจากเทคนิค XRD

จากผลการศึกษาส่วนประกอบของผงปูน Investment T ซึ่งเป็นปูนในกลุ่มสปิเนล แสดงในภาพที่ 4.5 พบว่ามีส่วนประกอบหลักได้แก่ MgO, Al₂O₃, และ ZrO₂ นอกจากนั้นยังมีสารเติมแต่งคือ Al₁₈B₄O₃₃(9Al₂O₃•2B₂O₃) และ LiF ซึ่งสารเติมแต่งเหล่านี้สามารถลดอุณหภูมิการเกิดสปิเนล MgAl₂O₄ และเพิ่มอัตราการเกิดปฏิกิริยาในสถานะของแข็งได้[29-31] โดยปริมาณของแต่ละสารประกอบในผงปูน Investment T นั้นแสดงในตารางที่ 4.4 ซึ่งสารเติมแต่งที่ตรวจสอบพบนั้นมีปริมาณที่น้อยมากเมื่อเทียบกับข้อจำกัดของเทคนิคการตรวจสอบด้วย XRD ที่สามารถตรวจสอบสารประกอบที่มีปริมาณมากกว่าร้อยละ 5 แต่อย่างไรก็ตามค่าความแม่นยำในการคำนวณปริมาณสารประกอบก็ยังคงมีค่าอยู่ในช่วงที่เชื่อถือได้

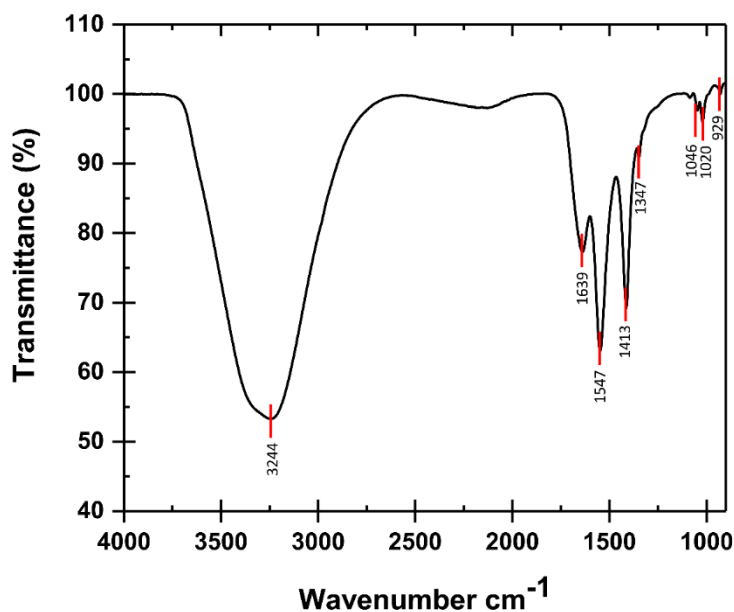
ตารางที่ 4.4 แสดงปริมาณสารประกอบในผงปูนกลุ่มสปิเนล

Sample powder	%MgO	%Al ₂ O ₃	%ZrO ₂	%Al ₁₈ B ₄ O ₃₃	%LiF	GOF
Investment T	70.1	19.3	5.8	3.3	1.5	1.4

จากนั้นเตรียม Green part โดยผสมผงปูน Investment T กับ spinel liquid ปล่อยให้แข็งตัวเป็น Green part แล้วนำไปทดสอบ XRD เพื่อตรวจสอบการเปลี่ยนแปลงของเฟสที่เกิดขึ้นพบว่าหลังจากการผสม spinel liquid แล้วไม่พบเฟสเพิ่มเติมหรือแตกต่างจากผงปูน อาจเนื่องมาจากส่วนผสมใน spinel liquid ไม่มีความเป็นผลึก จึงได้มีการศึกษา spinel liquid เพิ่มเติมโดยใช้เครื่อง Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) ซึ่งเป็นเครื่องมือที่ใช้ทดสอบเพื่อหาโมเลกุลของสาร โดยอาศัยหลักการเกี่ยวกับการสั่นของโมเลกุลและการดูดกลืนแสงอินฟราเรด แสดงผลการทดสอบในภาพที่ 4.6 พบ Mg(CH₃COO)₂ (Magnesium Acetate) จากช่วงการดูดกลืน (absorption band) ที่ wavenumber 1547, 1412, 1347, 1046, 1020 และ 929 cm⁻¹ ซึ่งค่าเหล่านี้แสดงถึง C-O asymmetry stretching, C-O symmetry stretching, CH₃ symmetry stretching, out of plane CH₃ rocking, in-plane CH₃ rocking และ C-C stretching ตามลำดับ [32] ส่วนช่วงการดูดกลืน 3244 cm⁻¹ และ 1639 cm⁻¹ แสดงถึง O-H bending และ O-H stretching ตามลำดับ ซึ่งเกิดจากโมเลกุลของน้ำ (H₂O) [33] จากผลดังกล่าวทำให้คาดได้ว่า spinel liquid อาจจะเป็นสารละลาย Mg(CH₃COO)₂ ที่มีน้ำอยู่ในผลึก (Mg(CH₃COO)₂•X(H₂O))

ต่อมาเมื่อทำการอบ Green part ตามรูปแบบการอบตามคู่มือ วิเคราะห์ด้วย XRD พบ MgO, Al₂O₃ และเฟส MgAl₂O₄ จากการทำปฏิกิริยาของ MgO และ Al₂O₃ บางส่วนอีกทั้งยังพบ ZrO₂ ที่เกิดการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกจากโครงสร้าง cubic เป็น monoclinic แต่อย่างไรก็ตามผลหลังการอบปูนไม่พบสารเติมแต่ง Al₁₈B₄O₃₃ และ LiF ซึ่งคาดว่าเกิดการสลายตัวระหว่างการอบและเพื่อที่จะทราบ

อุณหภูมิต่างๆในการเกิดปฏิกิริยาได้นั้นจึงได้มีการศึกษาสมบัติทางความร้อนของปูนในหัวข้อผลการศึกษาสมบัติทางความร้อนของปูนเซรามิกต่อไป



ภาพที่ 4.6 แสดงสเปกตรัมของ spinel liquid จากการทดสอบ FTIR

4.2.3 ผลการศึกษานาโนอนุภาคของผงปูน

นอกจากส่วนประกอบของปูนแล้วขนาดของอนุภาคผงปูนก็ยังเป็นสำคัญที่ส่งผลต่อความเรียบผิวและคุณภาพชิ้นงานหลังจากการหล่อ[3] ดังนั้นจึงได้ทำการศึกษานาโนของอนุภาคผงปูนที่ใช้ในการทดลองด้วยเครื่อง Particle Analyzer เพื่อนำผลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูนไปอธิบายความเรียบผิวของชิ้นงานทองผสมและไทเทเนียมบริสุทธิ์ หลังการหล่อด้วยรูปแบบการหล่อที่กำหนด ซึ่งผลการวิเคราะห์ขนาดอนุภาคผงปูนนั้นแสดงในตารางที่ 4.5

ตารางที่ 4.5 แสดงขนาดอนุภาคผงปูน

Sample powder	Particle size (μm)
Investment A	28.44 ± 0.17
Investment B	23.38 ± 0.06
Investment C	19.42 ± 0.21
Investment T	105.43 ± 1.14

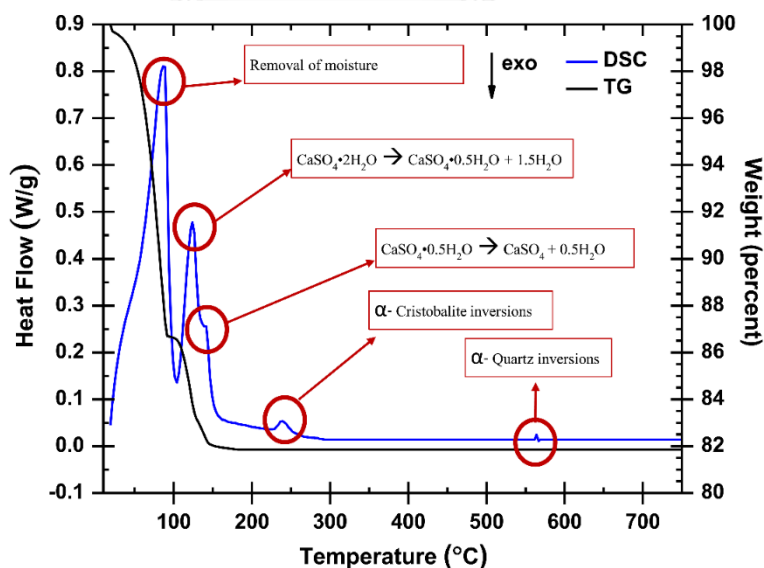
ผลการทดสอบแสดงให้เห็นว่าปูนกลุ่มสปิเนล หรือ Investment T มีขนาดอนุภาคที่ใหญ่กว่าปูนกลุ่มยิปซัม และในปูนกลุ่มยิปซัม ขนาดของปูน Investment A มีขนาดใหญ่กว่า Investment B และ C ตามลำดับ

4.3 การศึกษาพฤติกรรมของปูนระหว่างกระบวนการเตรียมเบ้าปูน

4.3.1 ผลการศึกษาพฤติกรรมทางความร้อนระหว่างกระบวนการอบปูนเซรามิก

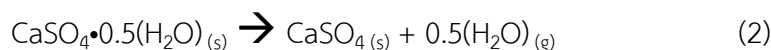
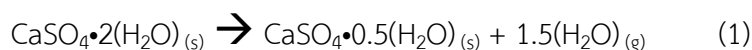
4.3.1.1 พฤติกรรมทางความร้อนของปูนกลุ่มยิปซัม

สมบัติทางความร้อนของ Investment A ที่แสดงถึงพฤติกรรมขณะทำการอบปูนกลุ่มยิปซัม แสดงในภาพที่ 4.7



ภาพที่ 4.7 แสดงสมบัติทางความร้อนของ Investment A ด้วยเทคนิค DSC/TG

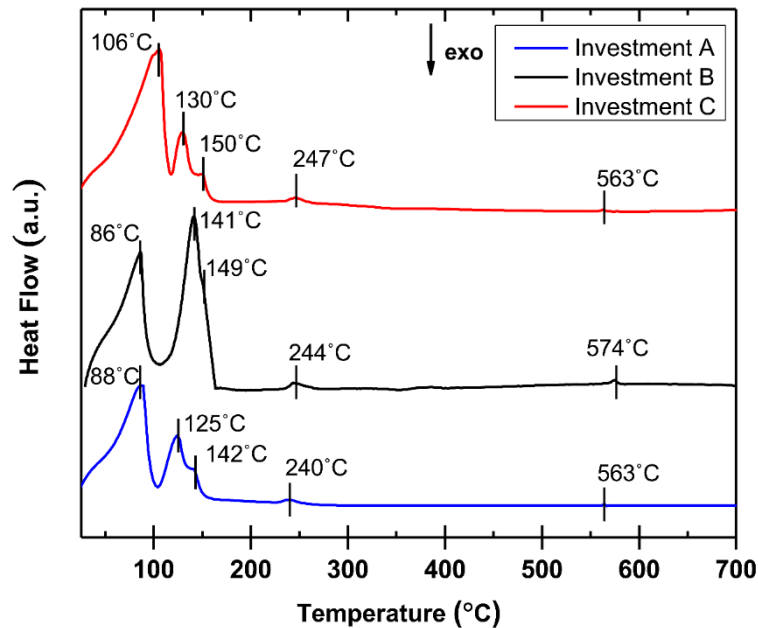
จากกราฟการวิเคราะห์ DSC พบการดูดความร้อนที่อุณหภูมิ 88 องศาเซลเซียส แสดงถึงการระเหยของความชื้นซึ่งมีการดูดความร้อน 434.2 J/g เมื่อพิจารณาควบคู่กับกราฟการเปลี่ยนแปลงมวลที่อุณหภูมิ 25-91 องศาเซลเซียส พบการสูญเสียน้ำหนักจากความชื้นใน Green part ประมาณ 13.2% หลังจากนั้นเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นเกิดปฏิกิริยา dehydration ของ $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ กลายเป็น CaSO_4 ดังสมการการเกิดปฏิกิริยาเคมีต่อไปนี้ [34]



โดยสมการการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่ (1) ซึ่งเป็นปฏิกิริยาการดูดความร้อนที่เกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 103-135 องศาเซลเซียส โดยการเกิดปฏิกิริยา dehydration ของ $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ กลายเป็น $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ และ $1.5(\text{H}_2\text{O})$ ซึ่งการสลายตัวของน้ำสูญเสียน้ำหนักไป 4.2% สังเกตได้จากกราฟ TG ที่อุณหภูมิ 110-128 องศาเซลเซียส ต่อมาที่อุณหภูมิประมาณ 142 องศาเซลเซียส เกิดปฏิกิริยาเคมีที่ (2) ขึ้น กล่าวคือ 0.5 โมลของน้ำที่เหลือในผลึก ($0.5(\text{H}_2\text{O})$) สลายตัวออกจากผลึกทำให้ $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ กลายเป็น CaSO_4 โดยน้ำที่สูญเสียไปนั้นแสดงในกราฟ TG ที่อุณหภูมิ 128-159 องศาเซลเซียส และมีน้ำหนักที่สูญเสียไปประมาณ 1.4% ต่อมาเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นพบปฏิกิริยาการดูดความร้อนที่อุณหภูมิประมาณ 240 องศาเซลเซียส ซึ่งเป็นการดูดความร้อนจากการเปลี่ยนเฟสของ α -cristobalite กลายเป็น β -cristobalite ต่อมาที่อุณหภูมิ 563 องศาเซลเซียส เกิดปฏิกิริยาการดูดความร้อนเพื่อเปลี่ยนเฟสของ α -quartz กลายเป็น β -quartz โดยปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่างการให้ความร้อนทั้งหมดนั้นสามารถพบได้ในปูนกลุ่มยิปซัมซึ่งรวมถึง Investment B และ Investment C ด้วยเช่นกัน โดยแสดงคุณสมบัติทางความร้อนเปรียบเทียบกราฟ DSC ของปูนกลุ่มยิปซัมในภาพที่ 4.8

จากภาพเปรียบเทียบสมบัติทางความร้อนของปูนกลุ่มยิปซัม พบว่าการระเหยของความชื้นในปูนอยู่ในช่วงอุณหภูมิ 88-106 องศาเซลเซียส และการสลายตัวของน้ำในผลึกของ calcium sulfate dihydrate กลายเป็น calcium sulfate anhydrate ที่ช่วงอุณหภูมิ 125-150 องศาเซลเซียส การเกิดปฏิกิริยา dehydration ส่งผลให้เบ้าปูนเกิดการหดตัว ทำให้มีรูพรุนในเบ้าปูนเพิ่มขึ้น ซึ่งเพิ่มโอกาสที่แก๊สจะสามารถออกจากชิ้นงานหล่อในขณะที่ทำการหล่อชิ้นงานได้ดี จึงทำให้สามารถลดการเกิดตำหนิที่เกิดการแก๊สในชิ้นงานหล่อ แต่อย่างไรก็ตามความแข็งแรงของเบ้าปูนก็จะลดลงเช่นกัน [14, 35] ต่อมาที่ช่วงอุณหภูมิ 240-247 องศาเซลเซียส เกิดการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite

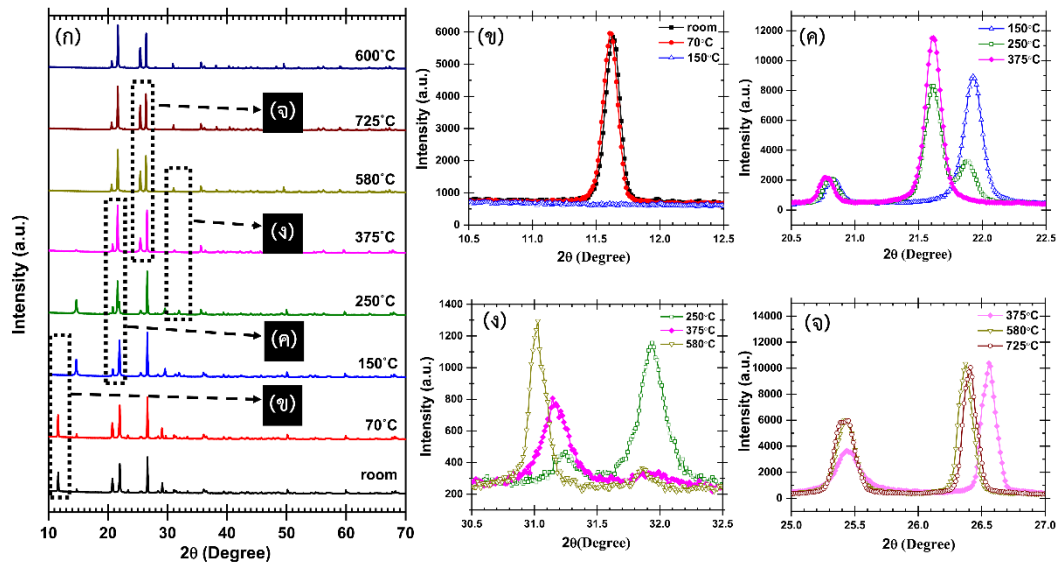
จาก α -cristobalite กลายเป็น β -cristobalite และเกิดการขยายตัวเพื่อชดเชยการหดตัวเนื่องจากเสียน้ำไปในช่วงอุณหภูมิก่อนหน้าส่งผลให้เบ้าปูนมีความแข็งแรงเพิ่มขึ้น รวมถึงการเปลี่ยนเฟส α -quartz กลายเป็น β -quartz ที่ช่วงอุณหภูมิ 563-574 องศาเซลเซียส ยังส่งผลต่อความแข็งแรงของเบ้าปูนที่ทำการอบเช่นกัน [15]



ภาพที่ 4.8 แสดงสมบัติทางความร้อนของปูนกลุ่มยิปซัม

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

นอกจากนั้นเทคนิค In-situ XRD ได้ถูกนำมาใช้ในการยืนยันพฤติกรรมทางความร้อนของปูนกลุ่มยิปซัม (Investment A) รวมถึงการเปลี่ยนเฟสของ SiO_2 (cristobalite inversion และ quartz inversion) ที่ไม่พบในผลที่ได้ทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค XRD ภายหลังจากการอบปูน ซึ่งผลของพฤติกรรมทางความร้อนด้วยเทคนิค In-situ XRD แสดงในภาพที่ 4.9 โดยอุณหภูมิในการทดสอบนั้นพิจารณาจากผลของ DSC และอุณหภูมิของการอบจริง



ภาพที่ 4.9 แสดงพฤติกรรมทางความร้อนจากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค In-situ XRD (ก) การเปลี่ยนแปลง XRD patterns ที่อุณหภูมิต่าง; (ข) การสูญเสียน้ำในผลึกยิปซัม; (ค) การเปลี่ยนเฟสของ cristobalite; (ง) การเปลี่ยนเฟสของแคลเซียมซัลเฟต; (จ) การเปลี่ยนเฟสของ quartz

จากภาพที่ 4.9(ก) แสดงการเปลี่ยนแปลงของปูนกลุ่มยิปซัมระหว่างการอบ จากผลของการวิเคราะห์ XRD ในภาพที่ 4.9(ข) พบพีคของ $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ ที่อุณหภูมิห้องจนกระทั่งอุณหภูมิถึง 150 องศาเซลเซียส พีคของ $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ หายไปแสดงถึงการเกิดปฏิกิริยา dehydration ของ $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ กลายเป็น CaSO_4 ที่มีโครงสร้างผลึกเป็น hexagonal หลังจากอุณหภูมิสูงขึ้นเกิดการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite ที่ชัดเจนจากภาพที่ 4.9(ค) โดยที่อุณหภูมิ 150 องศาเซลเซียส พบ α -cristobalite ที่มีโครงสร้างผลึกเป็น tetragonal หลังจากนั้นที่อุณหภูมิ 250 องศาเซลเซียส พบ α -cristobalite และ β -cristobalite ที่มีโครงสร้างผลึกเป็น cubic จนกระทั่งที่อุณหภูมิประมาณ 375 องศาเซลเซียส พบเพียงเฟสของ β -cristobalite ซึ่งแสดงถึงการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite ที่สมบูรณ์ นอกจากนั้นที่อุณหภูมินี้ยังเกิดการเปลี่ยนเฟสของ CaSO_4 ดังแสดงในภาพที่ 4.9(ง) จากโครงสร้าง hexagonal (All phase) เป็น orthorhombic (All phase) ซึ่งเรียกรูปการเปลี่ยนแปลงนี้ว่า III-II CaSO_4 transition [36, 37] ต่อมาเมื่ออุณหภูมิประมาณ 580 องศาเซลเซียส เกิดการเปลี่ยนเฟสของ quartz ซึ่งแสดงในภาพที่ 4.9(จ) จากเฟส α -quartz ที่มีโครงสร้างเป็น hexagonal กลายเป็น β -quartz ที่มีโครงสร้าง hexagonal เช่นเดียวกันแต่มีความสมมาตรมากขึ้นและมีความหนาแน่นที่น้อยกว่าโครงสร้างผลึกของ α -quartz [38, 39]

นอกจากการเปลี่ยนแปลงเฟสขณะอบแล้วสิ่งที่ต้องคำนึงถึงอีกคือ การขยายและการหดตัวทางความร้อนเนื่องจากอาจส่งผลต่อความแข็งแรงของปูนแบบได้ การเกิดปฏิกิริยา dehydration

ของอนุภาคยิปซัมนั้นทำให้เกิดการหดตัวมากกว่า 2% โดยปริมาตร[17] และการหดตัวที่มากที่สุดนั้นเกิดในช่วงอุณหภูมิ 300-450 องศาเซลเซียส ซึ่งเกิดการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกของ CaSO_4 จากสัณฐานวิทยาที่มีลักษณะคล้ายเข็มที่มีโครงสร้างแบบ hexagonal กลายเป็นลักษณะเข็มที่มีขนาดสั้นกว่าและมีโครงสร้างแบบ orthorhombic [37] หลังจากนั้นเมื่อเกิดการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite จะเกิดการขยายตัวเพื่อชดเชยการหดตัว ซึ่งการขยายตัวดังกล่าวนี้มีการเปลี่ยนแปลงปริมาตรประมาณ 5.5% จากการคำนวณโดยใช้ความถ่วงจำเพาะของ แอลฟาและบีตา cristobalite และ 5.7% โดยปริมาตรจากการคำนวณผลของการวิเคราะห์ In-situ XRD นอกจากนี้ยังมีการขยายตัวเนื่องจากการเปลี่ยนเฟสของ quartz ที่มีการขยายตัวประมาณ 4.7% โดยปริมาตร จากการคำนวณด้วยความถ่วงจำเพาะของแอลฟาและบีตา cristobalite และ 4.3% โดยปริมาตร จากการคำนวณด้วยผลของการวิเคราะห์ In-situ XRD[40]

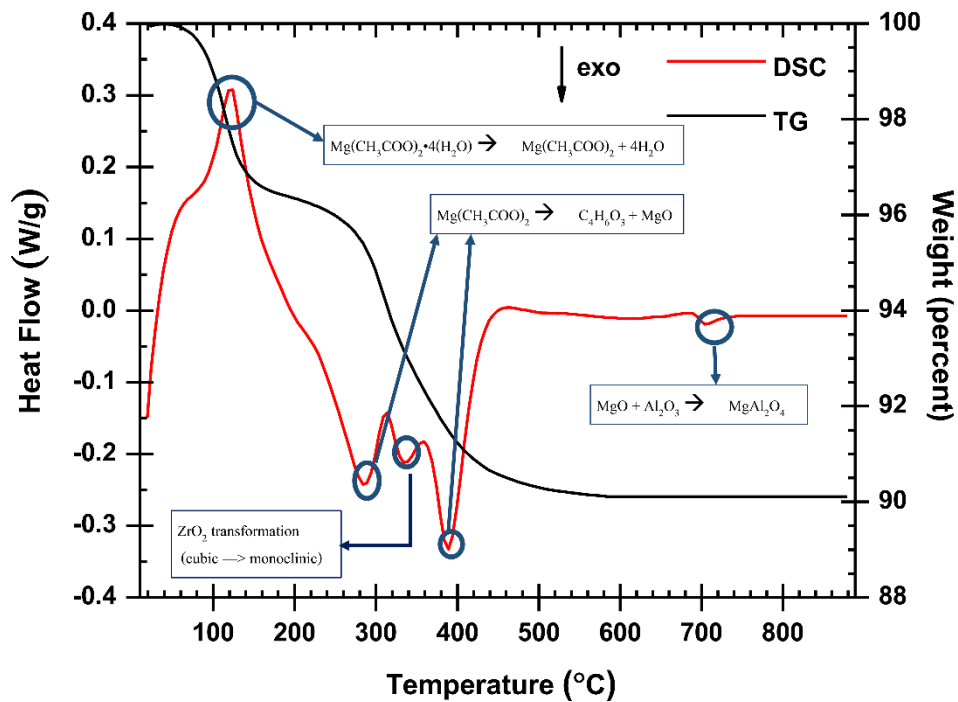
ดังนั้นการเลือกอุณหภูมิในการอบปูนรวมถึงอัตราเร็วในการเพิ่มความร้อน จึงต้องคำนึงถึงอุณหภูมิและพฤติกรรมของปูนกลุ่มยิปซัมระหว่างทำการอบด้วย

4.3.1.2 พฤติกรรมทางความร้อนของปูนกลุ่มสปีเนล

จากผลการทดสอบสมบัติทางความร้อนของปูนกลุ่มสปีเนลที่แสดงในภาพที่ 4.10 พบการดูดความร้อนจากกราฟ DSC ที่อุณหภูมิ 122 องศาเซลเซียส แสดงถึงการสูญเสียน้ำในโมเลกุลของ Magnesium Acetate Tetrahydrate ($\text{Mg}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4(\text{H}_2\text{O})$) ทำให้เกิด $\text{Mg}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ เมื่อพิจารณาควบคู่กับผล TG ที่ช่วงอุณหภูมิ 94-137 องศาเซลเซียส พบการสูญเสียไป 3.5% โดยน้ำหนัก จากนั้นเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 287-379 องศาเซลเซียส พบการหายไปของมวลประมาณ 5.4% โดยน้ำหนัก ควบคู่กับกราฟการคายความร้อนที่อุณหภูมิ 285 องศาเซลเซียส และ 388 องศาเซลเซียส แสดงถึงการเกิดปฏิกิริยาของ Magnesium Acetate ทำให้เกิด MgO [41] นอกจากนี้ยังพบการคายความร้อนที่อุณหภูมิ 336 องศาเซลเซียส ซึ่งคาดว่าเป็นการเปลี่ยนเฟสของ ZrO_2 จากโครงสร้างผลึกที่เป็น cubic เปลี่ยนเป็นโครงสร้างผลึกที่เป็น monoclinic จนกระทั่งอุณหภูมิ 706 องศาเซลเซียส พบการคายความร้อนซึ่งเป็นการเกิดปฏิกิริยาระหว่าง MgO และ Al_2O_3 ทำให้เกิดสปีเนล MgAl_2O_4 [31]

ในส่วนของการเติมแต่งซึ่งได้แก่ $\text{Al}_{18}\text{B}_4\text{O}_{33}$ และ LiF อาจเกิดการสลายตัวในช่วงการเกิด MgAl_2O_4 เนื่องจากรายงานก่อนหน้า [31] พบการแตกตัวของไอออน F^- เข้าไปแทนที่ O^{2-} ซึ่งทำให้เกิดการเพิ่มขึ้นของช่องว่างไอออนบวก (the cation vacancy) ส่งผลให้ ไอออนบวกของ Mg^{2+} และ Al^{3+} มีความสามารถในการแพร่เข้าไปในผลึกของอลูมินาเพื่อทำให้เกิด MgAl_2O_4 ได้ง่ายขึ้น ส่วนการเติมแต่ง $\text{Al}_{18}\text{B}_4\text{O}_{33}$ มีผู้เสนอผลของ B_2O_3 ต่อการเพิ่มความสามารถในการเกิด MgAl_2O_4 [29] กล่าวคือที่

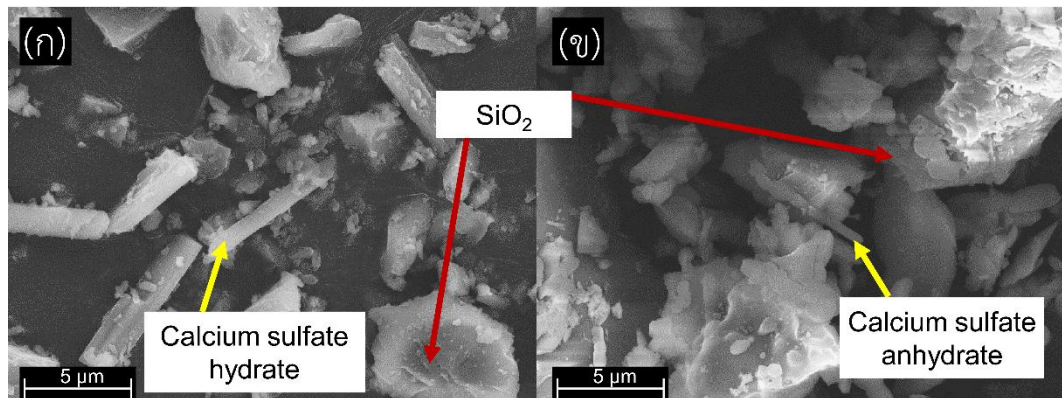
อุณหภูมิสูง B_2O_3 จะเกิดการละลายกับแมกนีเซียมและสัมผัสกับอลูมินาทำให้เพิ่มพื้นที่ผิวสัมผัสและทำให้ Mg^{2+} เกิดการแพร่ได้ง่ายขึ้นทำให้เพิ่มโอกาสในการเกิด $MgAl_2O_4$ แต่อย่างไรก็ตามข้อเสนอดังกล่าวยังไม่สามารถพิสูจน์ได้อย่างแน่ชัด



ภาพที่ 4.10 แสดงสมบัติทางความร้อนของปูน Investment T ด้วยเทคนิค DSC/TG

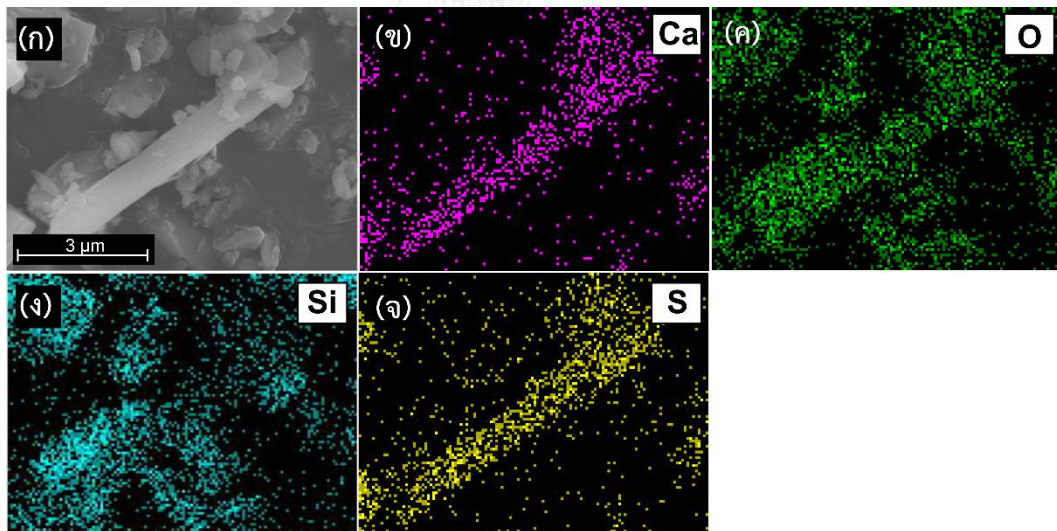
4.3.2 ผลของการอบปูนต่อสัณฐานวิทยาของอนุภาคปูน

จากการศึกษาสัณฐานวิทยาของอนุภาคผงปูนกลุ่มยิปซัม (Investment A) ที่แสดงในภาพที่ 4.11(ก) พบลักษณะของปูนสองลักษณะได้แก่ อนุภาคที่มีลักษณะเป็นก้อน (blocky shapes) และอนุภาคที่มีลักษณะเป็นแท่งทรงกระบอก (rod shapes) ซึ่งแสดงถึงอนุภาคของ SiO_2 และ ตัวประสาน (calcium sulfate hydrate) ตามลำดับ โดยยืนยันจากผลการทดสอบ EDS Mapping ซึ่งแสดงในภาพที่ 4.12

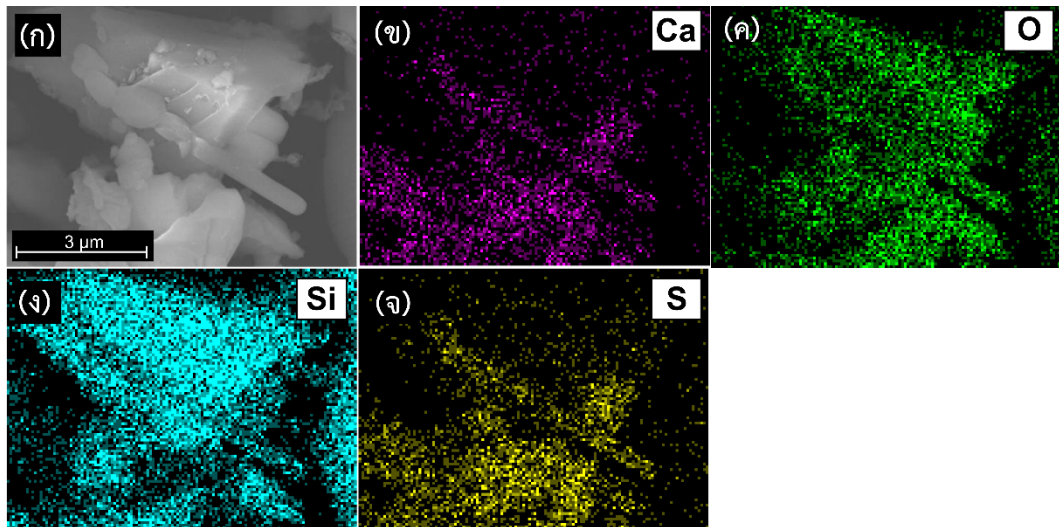


ภาพที่ 4.11 แสดงสัณฐานวิทยาของปูนกลุ่มยิปซัม (ก) ผงปูน (ข) ปูนหลังทำการอบ

หลังจากทำการอบ อนุภาคของตัวประสานที่เป็นแท่งทรงกระบอกนั้นมีขนาดที่เล็กลงจนมีสัณฐานวิทยาเป็นลักษณะคล้ายเข็มโดยแสดงในภาพที่ 4.11(ข) และผลการวิเคราะห์ธาตุของปูนหลังการเผาในภาพที่ 4.13 ผลที่เกิดขึ้นนั้นเนื่องมาจากการที่น้ำในผลึกของตัวประสานออกจากผลึกกลายเป็น CaSO_4 ในช่วงอุณหภูมิ 125-150 องศาเซลเซียส และ III-II CaSO_4 transition อุณหภูมิประมาณ 375 องศาเซลเซียส ซึ่งเป็นการยืนยันผลจากการวิเคราะห์สารประกอบของปูนที่กล่าวมาแล้วข้างต้น

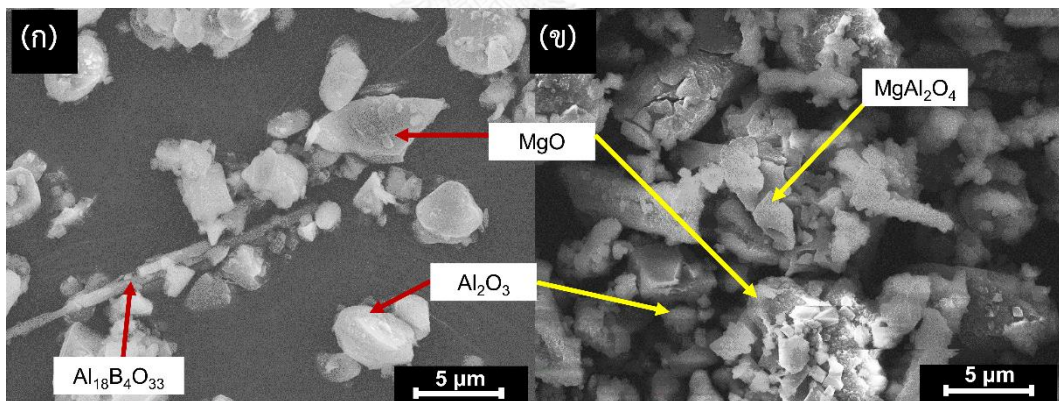


ภาพที่ 4.12 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคผงปูน Investment A



ภาพที่ 4.13 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคปูน Investment A หลังการอบ

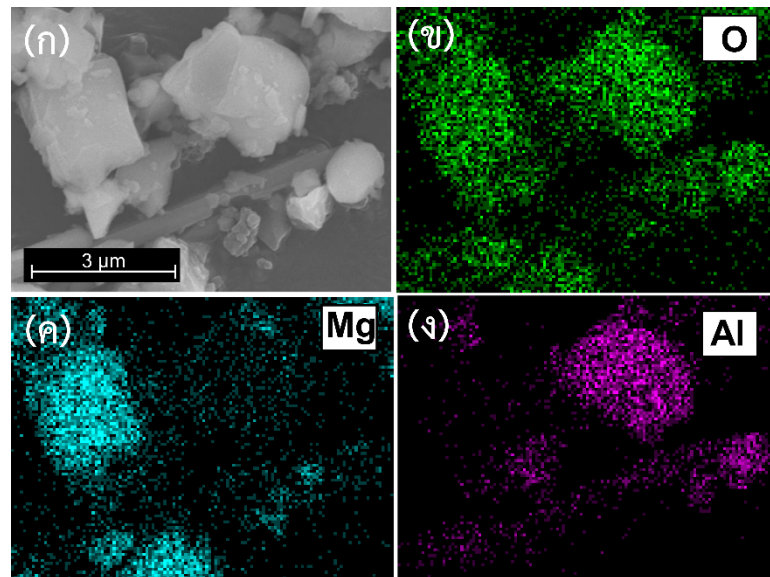
ในส่วนการเปลี่ยนสัณฐานวิทยาของผงปูนในกลุ่มสปิเนลแสดงในภาพที่ 4.14(ก) ซึ่งในผงปูนกลุ่มสปิเนล (Investment T) นั้นพบอนุภาคที่มีรูปร่าง เป็นก้อนที่มีเหลี่ยมมุม, ก้อนกลม และ เป็นลักษณะคล้ายเข็มซึ่งแสดงถึง MgO , Al_2O_3 และ $Al_{18}B_4O_{33}$ ตามลำดับ โดยจากการยืนยันเฟสด้วยการวิเคราะห์ธาตุของผงปูน Investment T ด้วยเทคนิค EDS mapping แสดงในภาพที่ 4.15



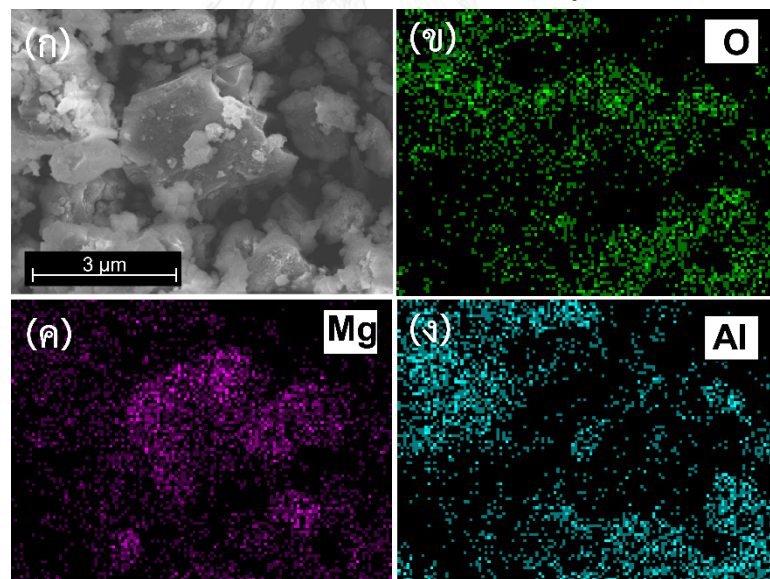
ภาพที่ 4.14 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment T (ก) ผงปูน; (ข) ปูนหลังทำการอบ

หลังจากการอบปูนในกลุ่มสปิเนลพบการเปลี่ยนแปลงสัณฐานวิทยาแสดงในภาพ 4.14(ข) ซึ่งอนุภาคของปูนมีการรวมกลุ่มกันกล่าวคือมีอนุภาคคล้ายแผ่นเล็กๆ อยู่บนอนุภาคที่เป็นก้อนใหญ่กว่า เมื่อตรวจสอบด้วยการวิเคราะห์ธาตุของปูนกลุ่มสปิเนลหลังทำการอบที่แสดงในภาพที่ 4.16 พบว่าเฟสที่มีลักษณะเป็นก้อนใหญ่คือ MgO และอนุภาคที่เป็นก้อนเล็กกว่าคือ Al_2O_3 ส่วนอนุภาคที่มีลักษณะคล้ายแผ่นเป็นอนุภาคที่ประกอบด้วยธาตุ Mg, Al และ O จึงสามารถสรุปได้ว่าเป็นเฟสของ สปิเนล

หรือ $MgAl_2O_4$ ซึ่งจากตำแหน่งการเกิดแล้วคาดว่า สปิเนลที่เกิดขึ้นทำหน้าที่เป็นตัวประสานเพื่อเพิ่มความแข็งแรงของเบ้าปูนกลุ่มสปิเนล



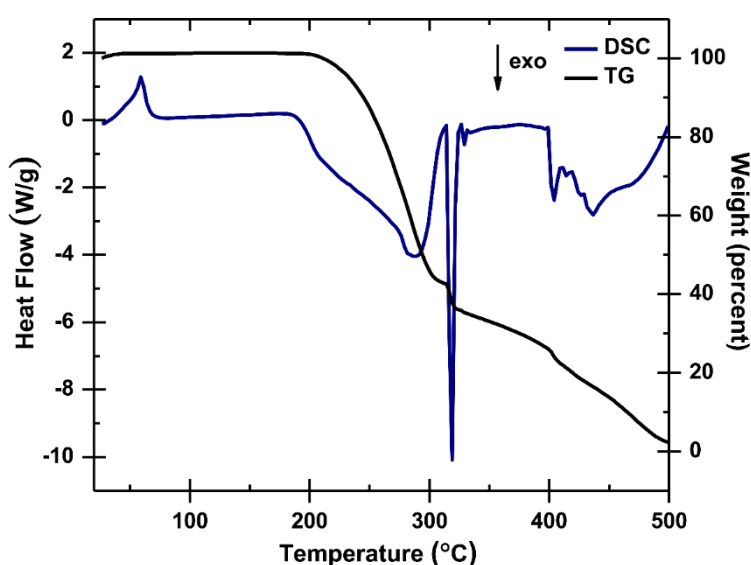
ภาพที่ 4.15 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคผงปูน Investment T



ภาพที่ 4.16 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคปูน Investment T หลังการอบ

4.3.3 ผลการศึกษาสมบัติทางความร้อนของต้นแบบพอลิเมอร์

ต้นแบบพอลิเมอร์เป็นอีกหนึ่งตัวแปรที่ต้องนำมาพิจารณาการสลายตัวของต้นแบบพอลิเมอร์ หรือที่เรียกกันว่า “แบบเทียน” หรือ “ต้นเทียน” เนื่องจากการอบปูนนั้นนอกจากจะต้องเพิ่มความแข็งแรงของปูนแล้วยังต้องการกำจัดต้นแบบพอลิเมอร์ด้วย โดยต้นแบบพอลิเมอร์ที่ใช้ในงานหล่อเครื่องประดับด้วยวิธีการหล่อแบบ lost wax นั้นนิยมใช้ต้นแบบที่มีส่วนประกอบของพาราฟิน (paraffin wax) เป็นส่วนประกอบหลักและผสมขี้ผึ้ง (bees wax), Carnuba, Candelilla ฯลฯ ขึ้นกับคุณสมบัติที่ต้องการนำไปใช้งาน [42]



ภาพที่ 4.17 แสดงสมบัติทางความร้อนของต้นแบบพอลิเมอร์

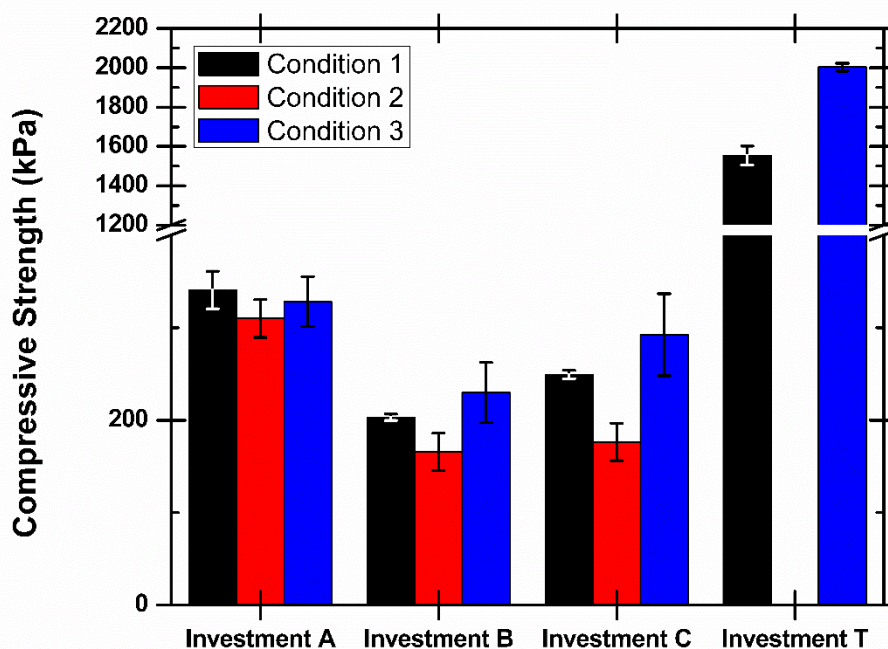
จากผลการวิเคราะห์สมบัติทางความร้อนของต้นแบบพอลิเมอร์ที่ใช้ในการหล่อแสดงในภาพที่ 4.17 พบการหลอมละลายจากการดูดความร้อนที่อุณหภูมิประมาณ 60 องศาเซลเซียส แต่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงมวลซึ่งอาจเป็นการละลายของพาราฟินและ bees wax [43] จากนั้นเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นพบการคายพลังงานในช่วงอุณหภูมิ 192-313 องศาเซลเซียส ควบคู่กับการเปลี่ยนแปลงมวลในช่วงอุณหภูมิ 240-300 องศาเซลเซียส แสดงถึงการสลายตัวและระเหยไปของ bees wax จากนั้นที่อุณหภูมิ ประมาณ 319 องศาเซลเซียส เกิดการสลายตัวไปของ Carnuba จนกระทั่งอุณหภูมิมากกว่า 400 องศาเซลเซียส จึงเกิดการสลายตัวไปของพาราฟิน [44] ดังนั้นต้นแบบพอลิเมอร์ที่ใช้ในการทดลองอาจประกอบไปด้วย พาราฟิน, bees wax ที่มีคุณสมบัติที่ดีต่อผิวชิ้นงานหลอมหล่อ และส่วนประกอบที่เป็นสารเติมแต่งคือ Carnuba ที่ให้คุณสมบัติที่ดีด้านความแม่นยำของสัดส่วนชิ้นงานในกระบวนการหล่อแบบขี้ผึ้งหาย

เนื่องจากต้นแบบพอลิเมอร์มีจุดหลอมเหลวที่ต่ำ ดังนั้นขณะอบปูน การเพิ่มอุณหภูมิในช่วงที่ต้นแบบพอลิเมอร์หลอมละลายนั้นจึงต้องมีความระมัดระวัง ในการใช้อัตราการให้ความร้อนที่ไม่สูงเกินไป เนื่องจากการละลายหรือเปลี่ยนสถานะจากของแข็งเป็นของเหลวของต้นแบบพอลิเมอร์มีการขยายตัว และการขยายตัวที่เร็วเกินไปอาจส่งผลต่อความแข็งแรงและตำหนิที่อาจเกิดขึ้นกับเบ้าปูนที่ทำการอบได้

4.4 ผลของรูปแบบการอบต่อความแข็งแรงของเบ้าปูน

ผลการทดสอบความแข็งแรงของปูนด้วยการกดปูนหลังจากทำการอบ ด้วยรูปแบบการอบที่ต่างกันของปูนในกลุ่มยิปซัมและปูนในกลุ่มสปีเนล ซึ่งแสดงในภาพที่ 4.18 โดยการอบปูนรูปแบบที่ 1 (condition 1) นั้นเป็นการอบปูนตามคู่มือของปูนแต่ละแบบ ซึ่งการทดสอบปูนในกลุ่มยิปซัมพบว่า Investment A มีค่าความแข็งแรงมากกว่า ปูน Investment C และ Investment B ตามลำดับ เนื่องจากปูน Investment A มีปริมาณ quartz ที่ส่งผลต่อความแข็งแรงของปูนหลังการอบมากกว่า ปูน Investment C และ Investment B ตามลำดับ จากนั้นได้ทำการเร่งการอบปูนเป็นรูปแบบการอบที่ 2 (condition 2) โดยการลดลำดับการคงอุณหภูมิไป มีเพียงการคงอุณหภูมิที่ 150 องศาเซลเซียส และ 730 องศาเซลเซียส เท่านั้นทำให้ลดเวลาการอบเหลือเพียง 6 ชั่วโมง พบว่าผลการทดสอบความแข็งแรงของปูนลดลง เนื่องมาจากการลดลำดับการคงอุณหภูมิดังกล่าวข้ามช่วงอุณหภูมิการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite และ CaSO_4 ทำให้เกิดการเปลี่ยนเฟสที่ไม่สมบูรณ์ของ cristobalite และ CaSO_4 รวมถึงอาจเกิดการหดตัวที่รุนแรงเนื่องจากการเปลี่ยนเฟส จึงทำให้ค่าความแข็งแรงของปูนในกลุ่มยิปซัมลดลง ดังนั้นในรูปแบบการอบที่ 3 (condition 3) จึงเพิ่มการคงอุณหภูมิที่ 370 องศาเซลเซียส ใช้เวลาในการอบประมาณ 8 ชั่วโมง พบว่าความแข็งแรงของปูน Investment A และ B ในรูปแบบการอบที่ 3 ใกล้เคียงกับความแข็งแรงในรูปแบบการอบที่ 1 แต่ใน Investment C พบความแข็งแรงที่เพิ่มขึ้นอย่างชัดเจน เนื่องจาก ในรูปแบบการอบที่ 1 ของปูน Investment C ได้ข้ามช่วงการคงอุณหภูมิประมาณ 150 องศาเซลเซียส ซึ่งเป็นช่วงที่น้ำออกจากผลึกของยิปซัม ซึ่งอาจทำให้เกิดการหดตัวที่รุนแรง ดังนั้นในรูปแบบการอบที่ 3 ของ Investment C ที่มีการคงอุณหภูมิในช่วงการหายไปของน้ำจึงทำให้ลดความรุนแรงจากหดตัวและส่งผลให้มีความแข็งแรงของปูนเพิ่มขึ้นจากรูปแบบการอบตามคู่มือ

เนื่องจากค่าความแข็งแรงในรูปแบบการอบที่ 3 มีความความแข็งแรงที่ใกล้เคียงหรือมากกว่ารูปแบบการอบที่ 1 ในปูนกลุ่มยิปซัม ดังนั้นในการหล่อชิ้นงานเพื่อเปรียบเทียบคุณภาพชิ้นงานหลังงานหล่อจากการเปลี่ยนรูปแบบการอบจึงได้เลือกรูปแบบการอบที่ 1 และ 3 เป็นรูปแบบในการอบเพื่อเปรียบเทียบคุณภาพชิ้นงานทองผสมต่อไป



ภาพที่ 4.18 แสดงความแข็งแรงของปูนหลังทำการอบด้วยรูปแบบการอบที่ต่างกัน

สำหรับรูปแบบการอบปูนในกลุ่มสปิเนลในรูปแบบการอบที่ 1 ที่มีระยะเวลาในการอบประมาณ 5 ชั่วโมงซึ่งมีอัตราการให้ความร้อน 8 องศาเซลเซียสต่ออนาที ซึ่งใช้ระยะเวลาในการอบที่ใช้เวลาไม่นานจึงไม่ทำการเร่งเวลาในการอบปูนกลุ่มสปิเนลเป็นรูปแบบการอบปูนที่ 2 อีกทั้งการเพิ่มอัตราการให้ความร้อนที่มากเกินไปอาจทำให้เข้าปูนเกิดตำหนิจากการหดตัว หรือ ขยายตัว จากการได้รับความร้อนที่เร็วเกินไป จึงลดอัตราการให้ความร้อนเป็น 5 องศาเซลเซียสต่ออนาที เป็นรูปแบบการอบที่ 3 เพื่อให้การเกิดปฏิกิริยาระหว่างการอบเกิดขึ้นได้อย่างสมบูรณ์มากขึ้นซึ่งการลดอัตราการให้ความร้อนดังกล่าว ส่งผลให้ค่าความแข็งแรงเพิ่มขึ้นอย่างเห็นได้ชัดโดยมีระยะเวลาในการอบปูนในกลุ่มสปิเนลอยู่ที่ประมาณ 8 ชั่วโมง

4.5 ผลของรูปแบบการอบต่อคุณภาพชิ้นงานทอง

4.5.1 การศึกษาความเรียบผิวของชิ้นงานโลหะหลังการหล่อ

จากการศึกษาความขรุขระของชิ้นงานหลังการหล่อด้วยโลหะทองผสมและไทเทเนียมบริสุทธิ์ แสดงในตารางที่ 4.6 เมื่อเปรียบเทียบชิ้นงานที่ได้จากการหล่อจากปูนกลุ่มยิปซัมและกลุ่มสปิเนลพบว่าชิ้นงานที่ได้จากการหล่อด้วยปูนกลุ่มยิปซมนั้นให้ความเรียบผิวที่ดีกว่าปูนกลุ่มสปิเนล เนื่องจากปูนในกลุ่มสปิเนลนั้นมีขนาดอนุภาคที่ใหญ่กว่าปูนในกลุ่มยิปซัม และเมื่อพิจารณาปูนในกลุ่มยิปซัมจาก

การหล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1 พบว่าความขรุขระของผิวชิ้นงานขึ้นกับขนาดของอนุภาคและรูปแบบการอบ กล่าวคือ ชิ้นงานทองผสมที่ได้จากการหล่อด้วยปูน Investment B มีความขรุขระน้อยกว่า ปูน Investment A เล็กน้อย เนื่องจากมีขนาดอนุภาคปูนที่เล็กกว่า ส่งผลให้มีความเรียบผิวที่ดีกว่า อย่างไรก็ตามปูน Investment C ที่มีขนาดอนุภาคเล็กที่สุดและควรทำความเรียบผิวได้ดีที่สุด แต่มีค่าความขรุขระมากที่สุด เนื่องจากการอบปูนในรูปแบบที่ 1 ของ Investment C นั้น มีการข้ามช่วงการคงอุณหภูมิในช่วงการเกิดปฏิกิริยา dehydration ของอีพ็อกซี จึงทำให้เกิดการหดตัวที่รุนแรง ส่งผลต่อผิวงานหลังการหล่อมีคุณภาพที่ไม่ดี

เมื่อพิจารณารูปแบบการอบที่ 3 ต่อความขรุขระผิวของชิ้นงานที่หล่อด้วยปูนกลุ่มอีพ็อกซีแต่ละแบบพบว่า ชิ้นงานที่หล่อด้วยปูน Investment A และ Investment B นั้นให้ค่าความขรุขระที่ใกล้เคียงกันแต่มากกว่า Investment C เล็กน้อยเนื่องจากปูน Investment C นั้นมีขนาดอนุภาคที่เล็กกว่าจึงมีความเรียบผิวที่ดีกว่า

เมื่อเปรียบเทียบรูปแบบการอบต่อความขรุขระของปูนแต่ละแบบพบว่า ความขรุขระของชิ้นงานจากการหล่อด้วยปูน Investment A และ Investment B ด้วยรูปแบบการอบที่ 1 และ 3 นั้นมีค่าความขรุขระที่ใกล้เคียงกัน ส่วนในปูน Investment C พบว่ารูปแบบการอบที่ 3 นั้นให้ค่าความขรุขระผิวลดลงและมีความแข็งแรงของปูนแบบเพิ่มขึ้น เนื่องมาจากการปรับรูปแบบการอบปูนให้มีความสมบูรณ์มากขึ้นรวมถึงใช้เวลาในการอบปูนลดลงจากรูปแบบการอบที่ 1 ของ Investment C

ตารางที่ 4.6 แสดงค่าความขรุขระของผิวชิ้นงานหลังการหล่อ

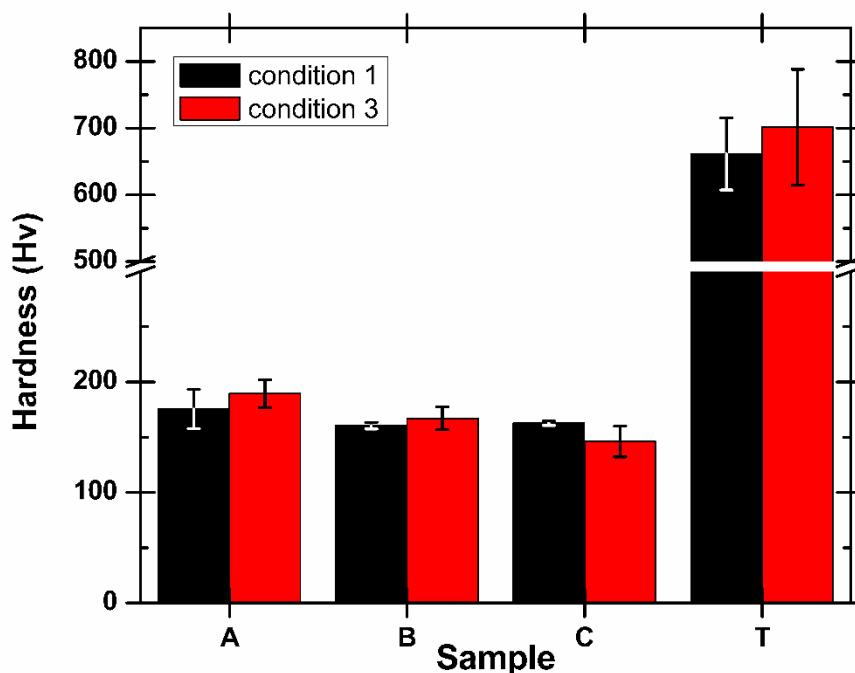
Sample	Surface roughness (μm)	
	Condition 1	Condition 3
Gold alloy (Investment A)	0.14	0.14
Gold alloy (Investment B)	0.12	0.14
Gold alloy (Investment C)	0.18	0.12
Pure Titanium (Investment T)	0.23	0.23

ส่วนผลในการเปลี่ยนรูปแบบการอบปูน Investment T นั้นได้ค่าความขรุขระใกล้เคียงกัน ดังนั้นการเปลี่ยนรูปแบบการอบปูนกลุ่มสปีเนลนั้นไม่ส่งผลต่อความเรียบของผิวชิ้นงาน แต่ส่งผลต่อความแข็งแรงที่ดีขึ้นของปูนแบบหลังทำการอบ

4.5.2 การศึกษาความแข็งผิวของชิ้นงานหลังงานหล่อ

จากการทดสอบความแข็งที่ผิวของชิ้นงานโลหะทองผสมและไทเทเนียมบริสุทธิ์ หลังจากการหล่อด้วยรูปแบบการอบปูนที่ 1 และ 3 แสดงความสัมพันธ์ในภาพที่ 4.19 โดยเมื่อพิจารณาความแข็งผิวของชิ้นงานทองในรูปแบบการอบที่ 1 พบว่าชิ้นงานที่หล่อด้วยปูน Investment A มีความแข็งสูงที่สุดเมื่อเทียบกับชิ้นงานทองที่หล่อด้วยปูน Investment B ที่มีความแข็งใกล้เคียงกับชิ้นงานทองที่หล่อด้วยปูน Investment C เนื่องจาก Investment B และ C มีปริมาณยิปซัมที่มาก อาจทำให้เกิดแก๊ส SO_2 ที่เกิดขึ้นจากการสลายตัวของยิปซัมยังอาจทำให้เกิดรูพรุนที่ผิวของชิ้นงาน[2] ส่งผลความแข็งผิวที่ต่ำกว่า Investment A ที่มีปริมาณยิปซำน้อยกว่า

ส่วนความแข็งของชิ้นงานทองที่หล่อด้วยรูปแบบการอบปูนแบบที่ 3 พบว่าความแข็งของชิ้นงานทองที่หล่อด้วยปูน Investment A และ B ให้ความแข็งผิวอยู่ในช่วงที่ใกล้เคียงกับความแข็งผิวของทองที่หล่อโดยใช้การอบปูนแบบที่ 1 ส่วนชิ้นงานที่หล่อด้วยปูน Investment C นั้นมีค่าความแข็งผิวที่ลดลง เนื่องมาจากการที่มีปริมาณยิปซัมที่มากและมีขนาดอนุภาคที่เล็กเมื่อเปลี่ยนรูปแบบการอบเพื่อให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสในแบบปูนที่สมบูรณ์ ซึ่งอาจทำให้รูพรุนหรือความสามารถในการซึมผ่าน (Permeability) ลดลง[14] จึงอาจทำให้แก๊สที่เกิดขึ้นจากการสลายตัวของยิปซัมไม่สามารถซึมผ่านออกจากโลหะทองได้จึงทำให้เกิดตำหนิในชิ้นงานซึ่งส่งผลต่อความแข็งผิวที่ลดลง

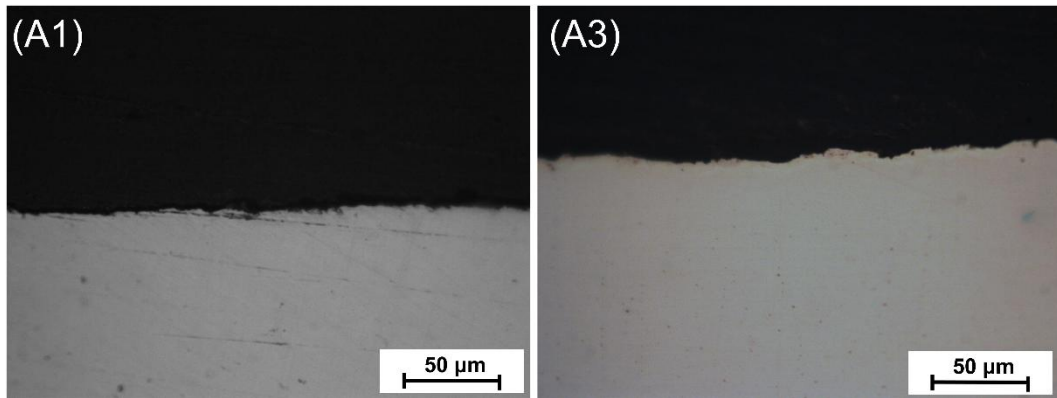


ภาพที่ 4.19 แสดงค่าความแข็งผิวชิ้นงานจากรูปแบบการอบที่ 1 และ 3

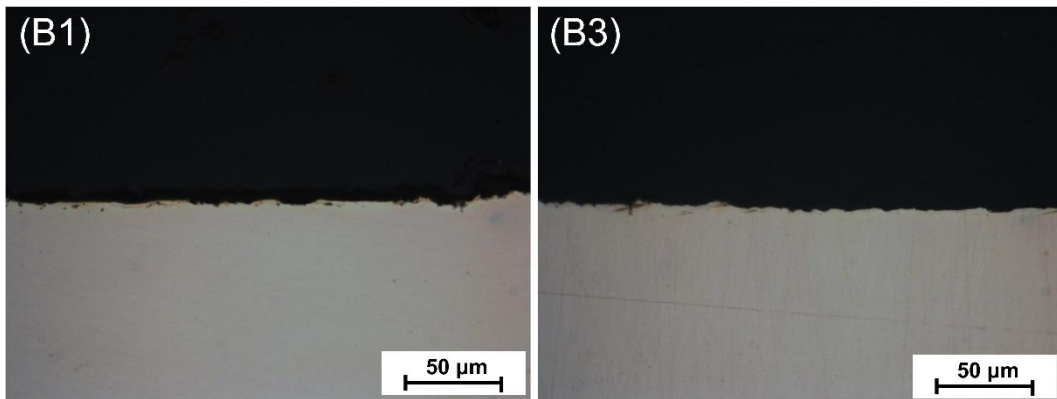
ในส่วนของความแข็งผิวไทเทเนียมบริสุทธิ์ที่ผ่านการหล่อด้วยการอบแบบที่ 1 มีค่าความแข็งน้อยกว่ารูปแบบการอบที่ 3 เล็กน้อย และค่าที่สูงมากเมื่อเทียบกับความแข็งของเนื้อโลหะไทเทเนียมที่มีความแข็งอยู่ที่ประมาณ 200HV[23] เนื่องมาจากที่ผิวชิ้นงานเกิดเฟสของ alpha-case (α -case) layer [22]

4.5.3 การศึกษาโครงสร้างจุลภาคและตำหนิผิวของชิ้นงานหลังงานหล่อ

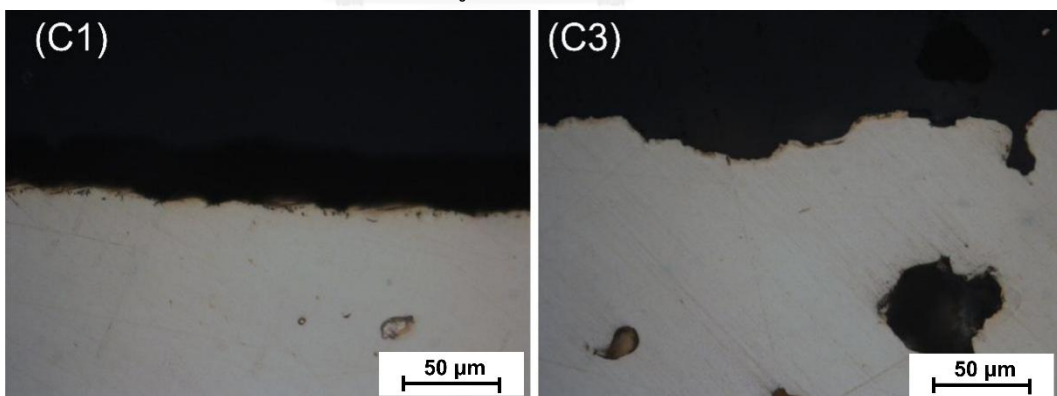
จากการศึกษาบริเวณใต้ผิวชิ้นงาน A1 ที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1 ของปูน Investment A ไม่พบตำหนิผิวเช่นเดียวกับบริเวณใต้ผิวชิ้นงาน A3 ที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 3 ของปูน Investment A ซึ่งแสดงในภาพที่ 4.20 ส่วนในชิ้นงาน B1 และ B3 ที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment B ตามลำดับ จากภาพที่ 4.21 ไม่พบตำหนิผิวชิ้นงาน แต่ในการหล่อด้วยปูน Investment C ด้วยรูปแบบการอบที่ 1 และ 3 พบตำหนิผิวชิ้นงาน โดยชิ้นงาน C1 พบตำหนิผิวเพียงเล็กน้อยแต่ในชิ้นงาน C3 พบตำหนิผิวที่ชัดเจนและมีปริมาณมากกว่าชิ้นงาน C1 ซึ่งแสดงภาพที่ 4.22 เพื่อเปรียบเทียบตำแหน่งและปริมาณตำหนิหลังการหล่อด้วยปูน Investment C ได้ทำการกัดกรด Aqua regia ที่เป็นการผสมของ nitric acid และ hydrochloric acid ด้วยอัตราส่วน 1 ต่อ 3 ตามลำดับ ทำให้เห็นโครงสร้างและตำแหน่งของตำหนิอย่างชัดเจนซึ่งแสดงในภาพที่ 4.23 ตำหนิของการหล่อด้วยรูปแบบการหล่อที่ 3 ของปูน Investment C มีปริมาณตำหนิมากกว่า ตำหนิจากการอบด้วยรูปแบบที่ 1 โดยบริเวณที่พบนั้น อยู่บริเวณระหว่างแขนของเดนไดรต์ (interdendritic regions) ซึ่งเป็นตำหนิที่เกิดจากแก๊สที่เกิดขึ้นระหว่างการหล่อและไม่สามารถออกจากเบ้าปูนได้ โดยแสดงตำหนิในภาพที่ 4.24 ซึ่งมีลักษณะตำหนิเป็นทรงกลมและมีพื้นผิวของตำหนิที่เรียบ สาเหตุที่พบตำหนิดังกล่าว เนื่องจากแก๊สที่เกิดจากการสลายตัวของยิปซัมขณะที่ทำการหล่อ ซึ่งในปูน Investment C นั้นมีความสามารถในการซึมผ่านที่ไม่ดีเพราะ Investment C มีขนาดอนุภาคที่เล็กกว่าปูนแบบอื่นๆ และผลของตำหนิที่มากขึ้นของการหล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 3 ทำให้ค่าความแข็งผิวลดลงเมื่อเปรียบเทียบกับชิ้นงานที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1



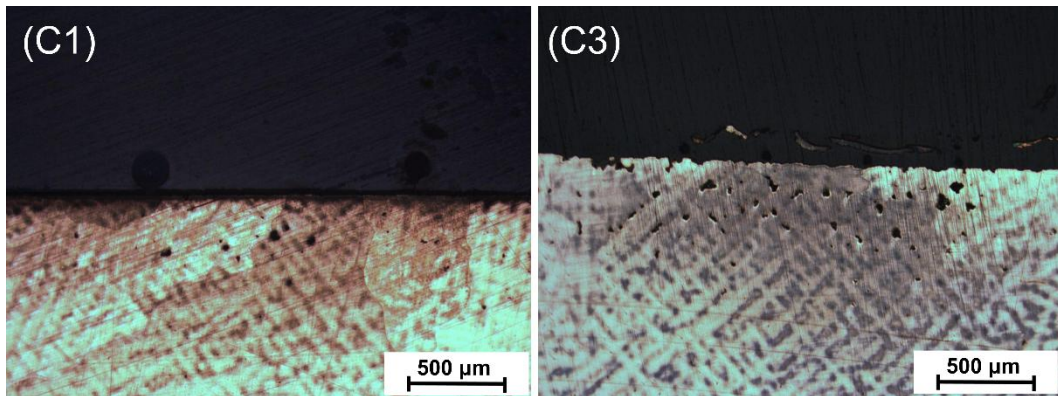
ภาพที่ 4.20 แสดงภาพตัดขวางบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment A



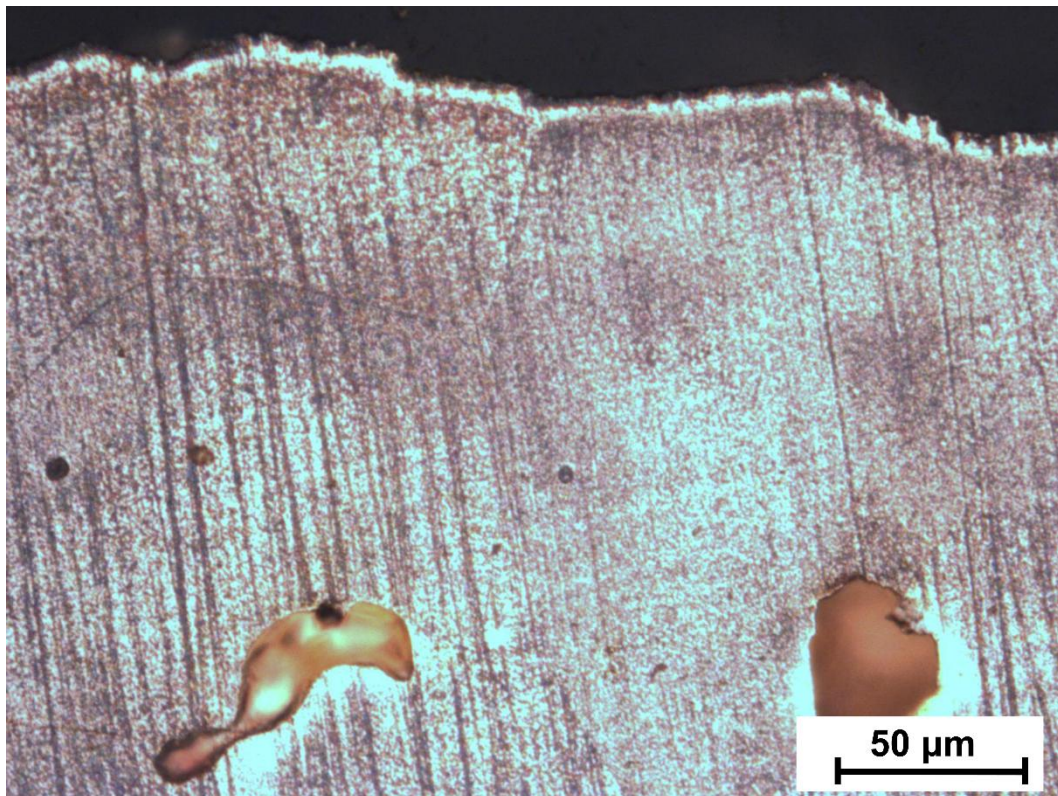
ภาพที่ 4.21 แสดงภาพตัดขวางบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment B



ภาพที่ 4.22 แสดงภาพตัดขวางบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment C

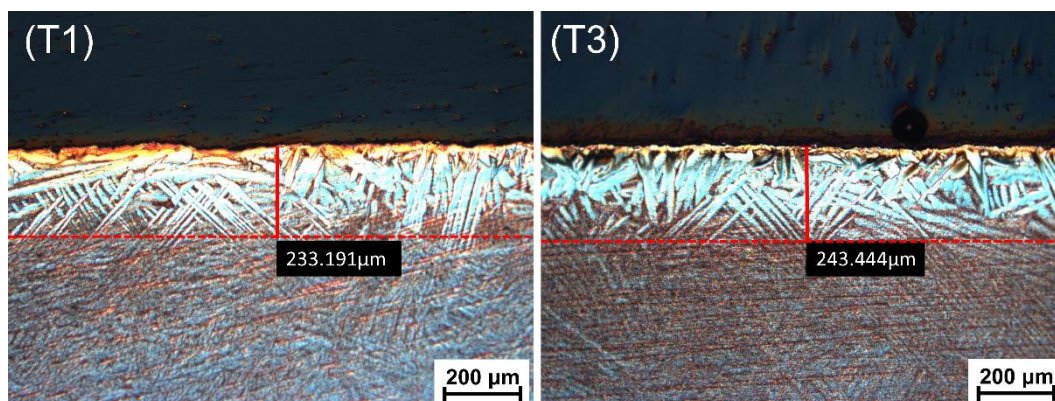


ภาพที่ 4.23 แสดงภาพโครงสร้างจุลภาคบริเวณใต้ผิวของชิ้นงานทองผสมที่ใช้รูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment C



ภาพที่ 4.24 แสดงตำหนิจากแก๊สบริเวณใต้ผิวชิ้นงานที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 3 ของปูน Investment C

ในส่วนของไทเทเนียมบริสุทธิ์หลังงานหล่อพบเฟสของ alpha-case (α -case) layer ที่บริเวณใต้ผิวของชิ้นงานซึ่งแสดงในภาพที่ 4.25 พบ alpha-case layer ที่มีความหนา $233.19 \mu\text{m}$ ในชิ้นงานที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1 และพบความหนาเพิ่มขึ้นเป็น $243.44 \mu\text{m}$ เมื่อหล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 3 ซึ่งจากการเพิ่มขึ้นของความหนาของ alpha-case layer ทำให้ค่าความแข็งที่ตรวจสอบได้ที่ผิวมีค่าสูงขึ้นเล็กน้อยจากการเปลี่ยนรูปแบบการอบที่ 1 เป็นรูปแบบการอบที่ 3



ภาพที่ 4.25 แสดงโครงสร้างจุลภาคใต้ผิวชิ้นงานไทเทเนียมบริสุทธิ์ ที่หล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1 และ 3 ของปูน Investment T

ความหนาที่เพิ่มขึ้นของชั้น alpha-case layer เมื่อเปลี่ยนรูปแบบการอบอาจเป็นผลมาจากระยะเวลาการอบที่เพิ่มขึ้นทำให้เข้าปูนมีอุณหภูมิที่สูงสม่ำเสมอในรูปแบบที่มีระยะเวลาในการอบสั้นกว่า จึงทำให้ออกซิเจนจากปูนทำปฏิกิริยากับน้ำไทเทเนียมหลอมเหลวระหว่างการหล่อ จากนั้นออกซิเจนจะแพร่ผ่านเข้าไปในน้ำไทเทเนียมหลอมเหลว และเมื่อเย็นตัวจะเกิดขึ้นปฏิกิริยาเป็น alpha-case layer [45] ดังนั้นเข้าปูนที่มีอุณหภูมิสูงสม่ำเสมอในรูปแบบการอบที่ 3 อาจเพิ่มโอกาสในการแพร่ของออกซิเจนได้มากกว่าทำให้เกิดชั้นของ alpha-case layer ที่มีความหนามากกว่าในการอบปูนแบบที่ 1

บทที่ 5

สรุปผลการทดลอง

5.1 สรุปผลการทดลองปูนในกลุ่มยิปซัม

ปูนในกลุ่มยิปซัมประกอบด้วย SiO_2 ที่มีเฟสเป็น α -quartz และ α -cristobalite โดยมีโครงสร้างผลึกเป็น hexagonal และ tetragonal ตามลำดับ และมีตัวประสานที่เป็น $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ หรือ $\text{CaSO}_4 \cdot 0.625(\text{H}_2\text{O})$ ซึ่งขึ้นอยู่กับกระบวนการผลิตปูน เมื่อผสมผงปูนกับน้ำ $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ หรือ $\text{CaSO}_4 \cdot 0.625(\text{H}_2\text{O})$ จะเปลี่ยนเป็น $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ และขณะอบปูน $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ จะเกิดปฏิกิริยา dehydration เป็น $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5(\text{H}_2\text{O})$ ที่ช่วงอุณหภูมิ 110-128 องศาเซลเซียส และน้ำ 0.5 โมลที่เหลือจะ dehydrate กลายเป็น CaSO_4 ที่ช่วงอุณหภูมิ 128-159 องศาเซลเซียส ซึ่งการหายไปของน้ำทำให้เกิดการหดตัวขึ้นและเมื่อทำการเพิ่มอุณหภูมิจนถึงช่วง 240- 250 องศาเซลเซียส เกิดการเปลี่ยนเฟสของ cristobalite จาก α -cristobalite กลายเป็น β -cristobalite ที่มีโครงสร้างผลึกเป็น Cubic มีการขยายตัวเพิ่มชัดเจนการหดตัวเนื่องจากการสูญเสียน้ำ ต่อมาที่อุณหภูมิประมาณ 375 องศาเซลเซียส เกิดการเปลี่ยนเฟสของ CaSO_4 จากโครงสร้าง hexagonal (All phase) เป็น orthorhombic (All phase) ซึ่งเรียกการเปลี่ยนแปลงนี้ว่า III-II CaSO_4 transition ซึ่งการเปลี่ยนเฟสนี้ทำให้เกิดการหดตัวปริมาณมาก หลังจากนั้นเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น ในช่วงอุณหภูมิ 563-574 องศาเซลเซียส จะเกิดการเปลี่ยนเฟส α -quartz กลายเป็น β -quartz ที่มีโครงสร้าง hexagonal เช่นเดียวกันแต่มีความสมมาตรมากขึ้นและมีความหนาแน่นที่ลดลงทำให้เกิดการขยายตัวขึ้น

เมื่อทำการปรับรูปแบบการอบปูนทำให้ลดระยะเวลาในการอบปูนจาก 8-12 ชั่วโมง เหลือเพียง 8 ชั่วโมงในปูนทุกแบบ พบว่าการปรับรูปแบบการอบทำให้ความแข็งแรงของปูนเพิ่มขึ้น และไม่ทำให้เสียคุณภาพชิ้นงานหล่อถ้าปูนมีขนาดอนุภาคที่เหมาะสม กล่าวคือเมื่อปูนมีขนาดอนุภาคที่เล็ก จะได้ความเรียบผิวที่ดีแต่มีความสามารถในการซึมผ่านที่ไม่ดี จึงอาจทำให้เกิดตำหนิในชิ้นงานซึ่งทำให้ความแข็งแรงที่ผิวชิ้นงานลดลง โดยรูปแบบการอบที่เหมาะสมจากการทดลองคือรูปแบบการอบที่ 3 ที่มีอัตราการให้ความร้อนที่ 5 องศาเซลเซียสต่อนาที โดยมีการคงอุณหภูมิที่ 150 องศาเซลเซียส, 370 องศาเซลเซียส และ 730 องศาเซลเซียส โดยมีระยะเวลาการคงอุณหภูมิที่ 1 ชั่วโมง, 1 ชั่วโมง และ 2 ชั่วโมง ตามลำดับ

5.2 สรุปผลการทดลองปูนในกลุ่มสปิเนล

ปูนในกลุ่มสปิเนลประกอบด้วยส่วนประกอบหลักที่เป็น MgO, Al₂O₃, และ ZrO₂ นอกจากนั้นยังมีสารเติมแต่งคือ Al₁₈B₄O₃₃ และ LiF ซึ่งเป็นสารประกอบที่ทำให้การเกิดปฏิกิริยาของ MgO และ Al₂O₃ เป็น MgAl₂O₄ ที่อุณหภูมิต่ำลง เมื่อทำการผสมด้วย spinel liquid ที่เป็น Mg(CH₃COO)₂•4(H₂O) แล้วทิ้งให้แข็งตัวเมื่อทำไปอบที่ช่วงอุณหภูมิ 94-137 องศาเซลเซียส น้ำในโมเลกุล Mg(CH₃COO)₂•4(H₂O) จะหายไปทำให้ได้ Mg(CH₃COO)₂ ต่อเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นในช่วง 287-379 องศาเซลเซียส เกิดการสลายตัวของ Magnesium Acetate ทำให้เกิดเป็น MgO และที่อุณหภูมิ 336 องศาเซลเซียส คาดว่าเป็นการเปลี่ยนเฟสของ ZrO₂ จากโครงสร้างผลึกที่เป็น cubic เปลี่ยนเป็นโครงสร้างผลึกที่เป็น monoclinic จนอุณหภูมิถึง 706 องศาเซลเซียส พบการเกิดขึ้นของ MgAl₂O₄ จากการเกิดปฏิกิริยาของ MgO และ Al₂O₃ ดังนั้นการอบปูนในกลุ่มสปิเนลจึงต้องมีอุณหภูมิสูงสุดในการอบที่มากกว่าอุณหภูมิการเกิดสปิเนล

หลังการเพิ่มระยะเวลาในการอบโดยการลดอัตราการให้ความร้อนทำให้ความแข็งแรงของปูนเพิ่มขึ้นได้แต่อย่างไรก็ตามยังส่งผลให้ชั้นของ alpha-case layer ที่มีความหนาที่เพิ่มขึ้นทำให้ความแข็งแรงที่ผิวของไทเทเนียมมีความแข็งแรงเพิ่มขึ้นด้วย ดังนั้นในกระบวนการหล่อไทเทเนียมนั้นการอบในรูปแบบที่ 3 ทำให้การหล่อมีประสิทธิภาพมากขึ้นเนื่องจากปูนมีความแข็งแรงขึ้น แต่ในส่วนการตกแต่งผิวชิ้นงานหลังการหล่ออาจจะทำได้ยากขึ้นเนื่องจากความแข็งแรงผิวที่เพิ่มขึ้น จากชั้นปฏิกิริยาที่หนาขึ้น

รายการอ้างอิง

- [1] S. Jones and C. Yuan, "Advances in shell moulding for investment casting," *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 135, pp. 258-265, 4/20/ 2003.
- [2] G. M. Ingo., "Thermal and microchemical characterisations of CaSO₄-SiO₂ investment materials for casting jewellery alloys," *Thermochimica Acta*, vol. 321(1-2), pp. 175-183, 1998.
- [3] K. A. a. m. C. Guler, "Surface Quality and Dimensional Accuracy of Gypsum Bonded Investment Flask Casting Moulds," *Materials Teasting*, vol. 53(9), pp. 551-555, 2011.
- [4] D. Ott, "Properties of melt and thermal processes during solidification in jewellery casting," *Gold Bulletin*, vol. 33, pp. 25-32.
- [5] H. Schuster, "Titanium Casting And Working Process," *the Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology*, 2006.
- [6] P. Sbornicchia, G. Montesperelli, G. M. Ingo, and G. Gusmano, "Advances in jewellery microcasting," *Thermochimica Acta*, vol. 419, pp. 195-204, 2004.
- [7] G.t.association.(2-24-2016).
Available: <http://www.goldtraders.or.th/PageView.aspx?page=5>
- [8] C. W. Corti, "Basic metallurgy of the precious metals," in *The Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology*, Albuquerque, N.M., 2007, pp. 77-108.
- [9] M.D. Siro, D. Maggian, D. Frizzo, and S. Bortolamei, "Characterization of 9, 10, 14 and 18 Karat Gold Alloys," *The Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology*, 2010.
- [10] W. S. Rapson, "The metallurgy of the coloured carat gold alloys," *Gold Bulletin*, vol. 23, pp. 125-133, 1990.
- [11] U. E. Klotz, "Blue and Purple Gold," *The Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology 2009*, 2009.
- [12] C. W. Corti, "Basic metallurgy of the precious metals, Part II - development of alloy microstructure through solidification and working," in *The Santa Fe*

- Symposium on Jewelry Manufacturing Technology*, Albuquerque, N.M., 2008, pp. 81-101.
- [13] X. J. Zhang, K. K. Tong, R. Chan, and M. Tan, "Gold jewellery casting: Technology design and defects elimination," *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 48, pp. 603-609, 1/15/ 1995.
- [14] B. Yaman and M. Cigdem, "Effect of particle size variations of gypsum bonded investment powders on metallurgical quality of investment castings," *International Journal of Cast Metals Research*, vol. 23, pp. 60-64, 2010.
- [15] S.-B. K. Yun-Jong Kim, Hyun-Hye Park, Myeong-Deok Seo, Byoung-Cheon Lee, Man-So Han, Taik-Nam Kim, Sung-Baek Cho, "Effect of Cristobalite and Quartz on the Properties of Gypsum Bonded Investment," *J. Mater. Sci. Technol.*, vol. 24, pp. 143-144, 2008-01-28 2008.
- [16] E. M. van der Merwe, C. A. Strydom, and J. H. Potgieter, "Thermogravimetric analysis of the reaction between carbon and $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, gypsum and phosphogypsum in an inert atmosphere," *Thermochimica Acta*, vol. 340-341, pp. 431-437, 12/14/ 1999.
- [17] P. J. Horton, "Investment powder technology - the present and future," in *The Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology*, Albuquerque, N.M., 2001, pp. 213-239.
- [18] C. R. G.M. Ingo, G. Chiozzini & C. Veroli, "Thermochemical and Microstructural Study of CaSO_4 ," *The Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology* 2000.
- [19] K. M. Ibrahim, M. Mhaede, and L. Wagner, "Mechanical characterization of cp-Ti produced by investment casting," *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, vol. 21, pp. 1735-1740, 2011.
- [20] X. Cheng and S. G. Roscoe, "Corrosion behavior of titanium in the presence of calcium phosphate and serum proteins," *Biomaterials*, vol. 26, pp. 7350-6, Dec 2005.
- [21] J. Pouilleau, D. Devilliers, F. Garrido, S. Durand-Vidal, and E. Mahé, "Structure and composition of passive titanium oxide films," *Materials Science and Engineering: B*, vol. 47, pp. 235-243, 1997/06/30 1997.

- [22] Y. Guilin, L. Nan, L. Yousheng, and W. Yining, "The effects of different types of investments on the alpha-case layer of titanium castings," *The Journal of Prosthetic Dentistry*, vol. 97, pp. 157-164, 3// 2007.
- [23] N. Teng-amnuay, C. Tangpatjaroen, E. Nisaratanaporn, and B. Lohwongwatana, "Replication of Trabecular Bone Structure and Reaction Layer Analysis of Titanium Alloys Using Investment Casting Technique," *Procedia Technology*, vol. 12, pp. 316-322, 2014.
- [24] J. Fischer, A. Ebinger, T. Hagi, B. Stawarczyk, A. Wenger, and E. Keller, "Mold filling and dimensional accuracy of titanium castings in a spinel-based investment," *Dent Mater*, vol. 25, pp. 1376-82, Nov 2009.
- [25] H. H. Morten S., "Mold filling of Ti castings using investments with different gas permeability," *Dental materials*, vol. 11, pp. 11-18, 1995.
- [26] C. C. Hung, G. L. Hou, C. C. Tsai, and C. C. Huang, "Pure titanium casting into zirconia-modified magnesia-based investment molds," *Dent Mater*, vol. 20, pp. 846-51, Nov 2004.
- [27] A. Basso and M. Poliero, "14-18KT Yellow Gold Alloys for Investment Casting: A New Approach," in *The Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology*, Albuquerque, N.M., 2002, pp. 38-60.
- [28] C. Bezou, A. Nonat, J. C. Mutin, A. N. Christensen, and M. S. Lehmann, "Investigation of the Crystal Structure of γ -CaSO₄, CaSO₄ · 0.5 H₂O, and CaSO₄ · 0.6 H₂O by Powder Diffraction Methods," *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 117, pp. 165-176, 1995/06/01 1995.
- [29] G. Bhattacharya, S. Zhang, M. E. Smith, D. D. Jayaseelan, and W. E. Lee, "Mineralizing Magnesium Aluminate Spinel Formation With B₂O₃," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 89, pp. 3034-3042, 2006.
- [30] G. Bhattacharya, S. Zhang, D. D. Jayaseelan, and W. E. Lee, "Mineralizing Effect of Li₂B₄O₇ and Na₂B₄O₇ on Magnesium Aluminate Spinel Formation," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 90, pp. 97-106, 2007.
- [31] T. M. Souza, A. P. Luz, and V. C. Pandolfelli, "Magnesium fluoride role on alumina–magnesia cement-bonded castables," *Ceramics International*, vol. 40, pp. 14947-14956, 2014.

- [32] S.-F. Pang, C.-Q. Wu, Q.-N. Zhang, and Y.-H. Zhang, "The structural evolution of magnesium acetate complex in aerosols by FTIR-ATR spectra," *Journal of Molecular Structure*, vol. 1087, pp. 46-50, 2015.
- [33] M. Sasani Ghamsari and A. R. Bahramian, "High transparent sol-gel derived nanostructured TiO₂ thin film," *Materials Letters*, vol. 62, pp. 361-364, 2/15/2008.
- [34] K. Isa and H. Okuno, "Thermal Decomposition of Calcium Sulfate Dihydrate under Self-generated Atmosphere," *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, vol. 55, pp. 3733-3737, 1982/12/01 1982.
- [35] W. K. Luk and B. W. Darvell, "Effect of burnout temperature on strength of gypsum-bonded investments," *Dental Materials*, vol. 19, pp. 552-557, 2003.
- [36] T. Mori, "Study of gypsum bonded casting investments Part 1," *Australian Dental Journal*, vol. 38(3), pp. 220-224, 1993.
- [37] F. Aghajani, Z. Hasratiningsih, and T. Mori, "Gypsum-bonded Investment and Dental Precision Casting (IV) Transformation of III-CaSO₄ to II-CaSO₄," *Dental Materials Journal*, vol. 23, pp. 373-378, 2004.
- [38] D. A. K. M. G. Tucker, AND M. T. Dove, "A detailed structural characterization of quartz," *Mineralogical Magazine*, vol. 65(4), pp. 489-507, 2001.
- [39] H. Yao and I. Hatta, "Phase transitions of quartz studied by a.c. calorimetry," *Thermochimica Acta*, vol. 266, pp. 301-308, 1995/11/15 1995.
- [40] A. I. K. WAKASA, Y. YOSHIDA, M. YAMAKI, "Silica investment prepared for dental purposes effect of cristobalite content on mechanical properties," *Chapman & Hall*, 1993.
- [41] K. ISA and M. Nogawa, "Thermal decomposition of magnesium acetate tetrahydrate under self-generated atmosphere," *Thermochimica Acta*, vol. 75, pp. 197-206, 1984.
- [42] G. Fontani, "Understanding injection waxes," in *The Santa Fe Symposium on Jewelry Manufacturing Technology*, Albuquerque, N.M., 2015, pp. 107-128.
- [43] Z. Ruguo, Z. Hua, Z. Hong, F. Ying, L. Kun, and Z. Wenwen, "Thermal Analysis of Four Insect Waxes Based on Differential Scanning Calorimetry (DSC)," *Procedia Engineering*, vol. 18, pp. 101-106, 2011.

- [44] U. W. and W. W., "Waxes products of thermal degradation of waste plastics obtaining, capabilities, and application," *Archiwum Gospodarki Odpadami i Ochrony Srodowiska*, vol. 6, pp. 71-78, 2007.
- [45] M.-G. Kim, S. Kim, nbsp, K, and Y.-J. Kim, "Effect of Mold Material and Binder on Metal-Mold Interfacial Reaction for Investment Castings of Titanium Alloys," *MATERIALS TRANSACTIONS*, vol. 43, pp. 745-750, 2002.

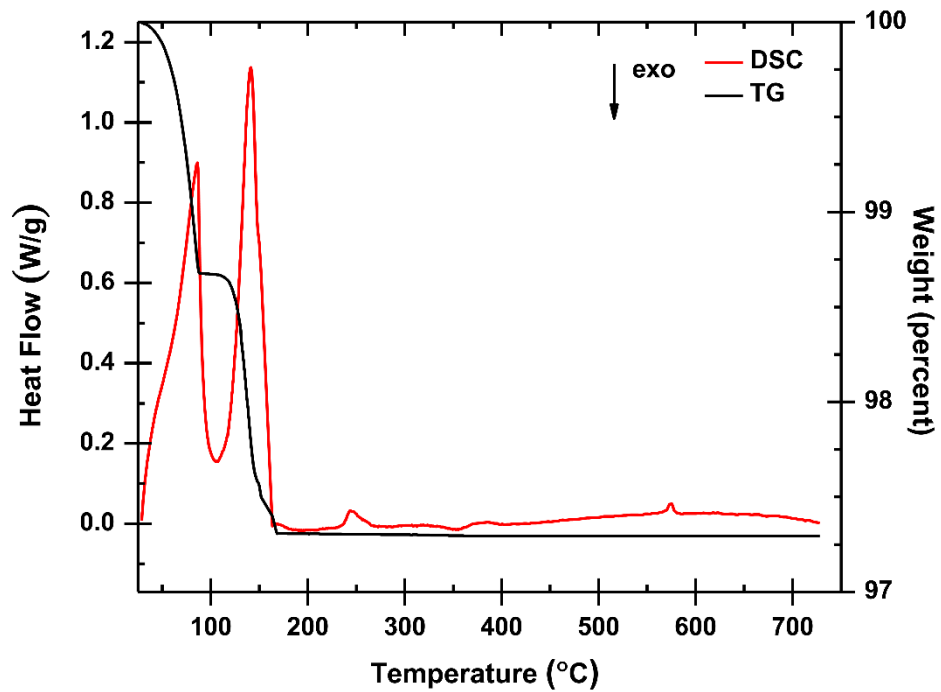




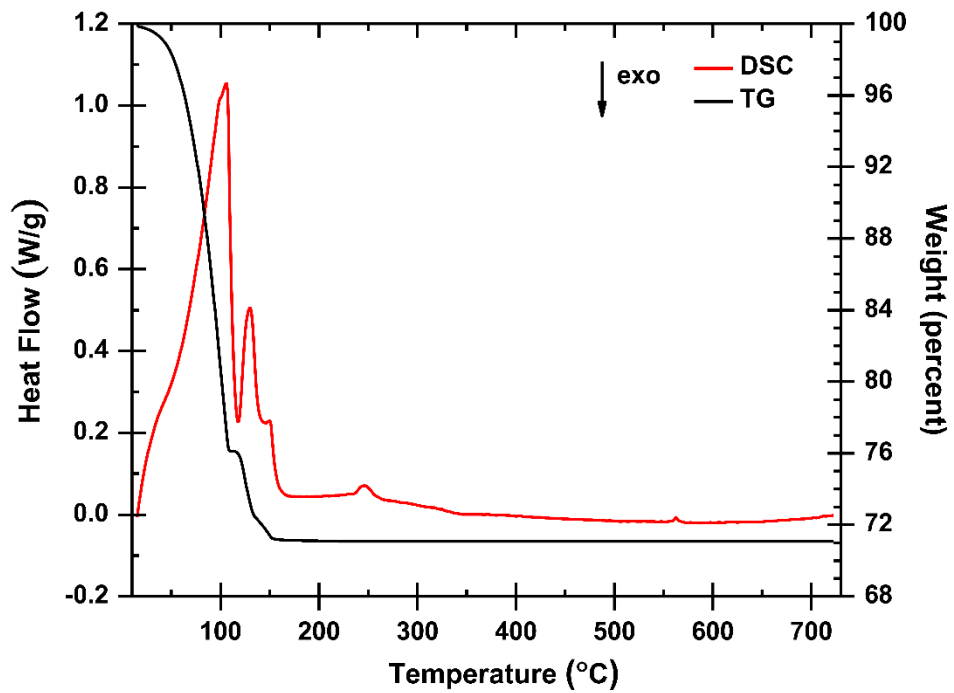
ภาคผนวก

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

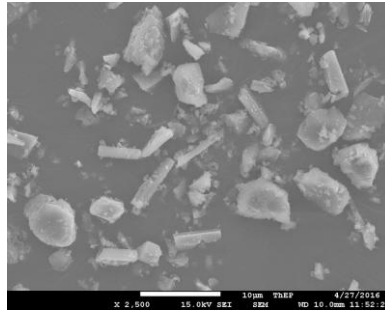
ภาคผนวก ก



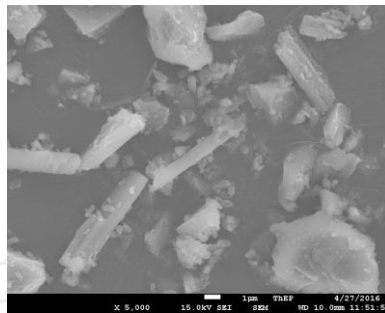
ภาพที่ ก- 1 แสดงสมบัติทางความร้อนของปูน Investment B



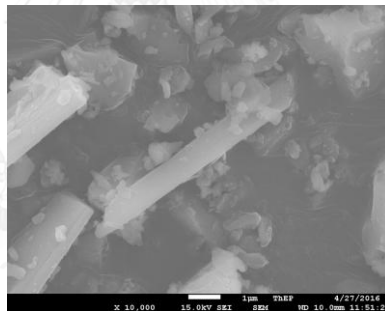
ภาพที่ ก- 2 แสดงสมบัติทางความร้อนของปูน Investment C



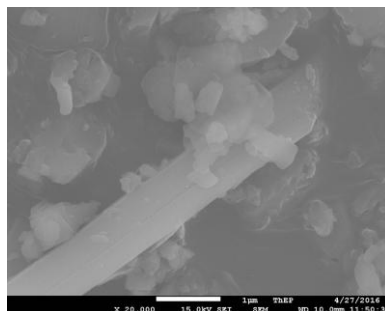
ภาพที่ ก- 3 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment A



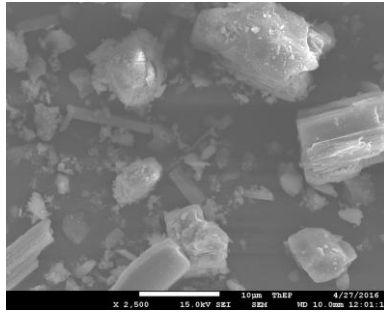
ภาพที่ ก- 4 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment A (ต่อ)



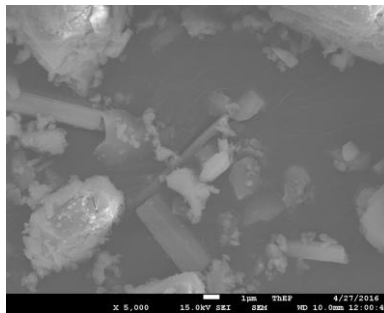
ภาพที่ ก- 5 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment A (ต่อ)



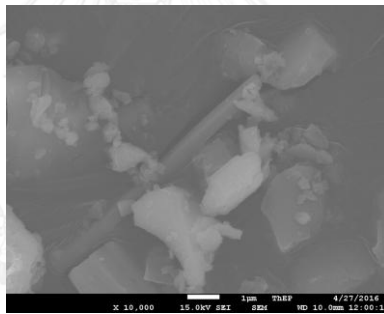
ภาพที่ ก- 6 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment A (ต่อ)



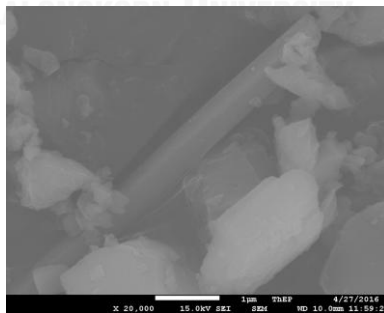
ภาพที่ ก- 7 แสดงลักษณะวิทยาของผงปูน Investment B



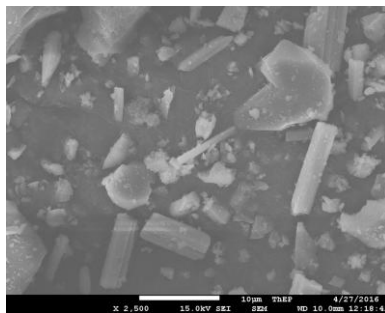
ภาพที่ ก- 8 แสดงลักษณะวิทยาของผงปูน Investment B (ต่อ)



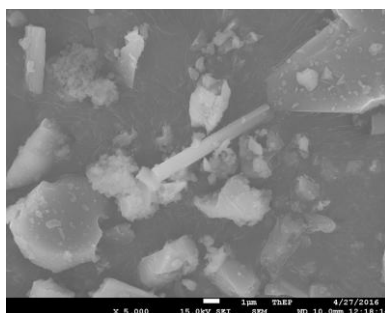
ภาพที่ ก- 9 แสดงลักษณะวิทยาของผงปูน Investment B (ต่อ)



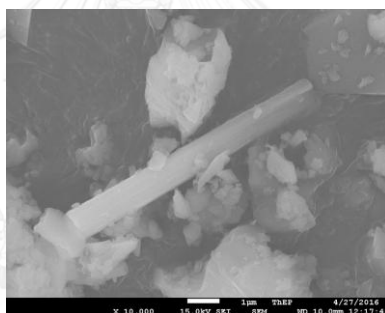
ภาพที่ ก- 10 แสดงลักษณะวิทยาของผงปูน Investment B (ต่อ)



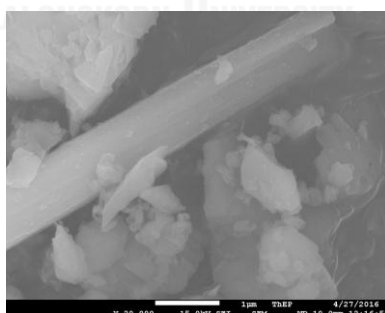
ภาพที่ ก- 11 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment C



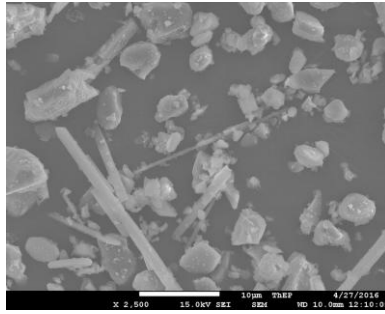
ภาพที่ ก- 12 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment C (ต่อ)



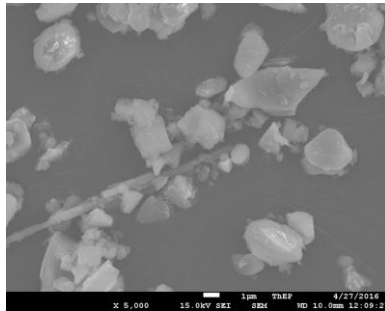
ภาพที่ ก- 13 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment C (ต่อ)



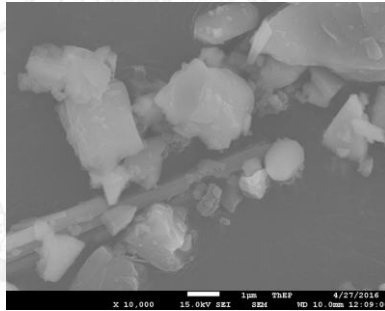
ภาพที่ ก- 14 แสดงสัณฐานวิทยาของผงปูน Investment C (ต่อ)



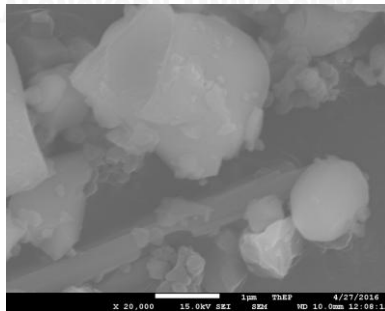
ภาพที่ ก- 15 แสดงลักษณะพื้นฐานวิทยาของผงปูน Investment T



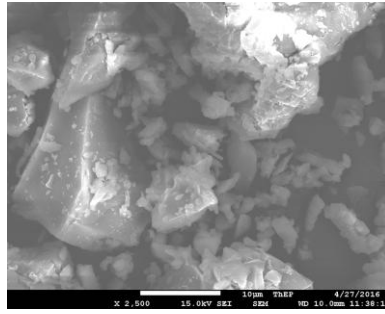
ภาพที่ ก- 16 แสดงลักษณะพื้นฐานวิทยาของผงปูน Investment T (ต่อ)



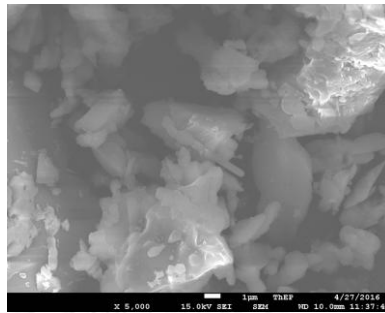
ภาพที่ ก- 17 แสดงลักษณะพื้นฐานวิทยาของผงปูน Investment T (ต่อ)



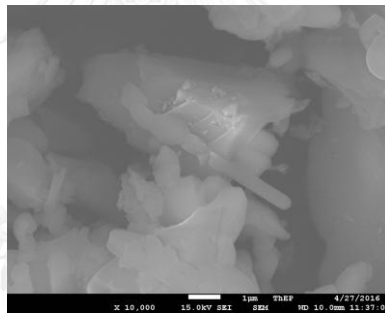
ภาพที่ ก- 18 แสดงลักษณะพื้นฐานวิทยาของผงปูน Investment T (ต่อ)



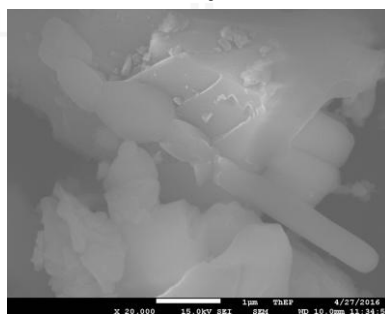
ภาพที่ ก- 19 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment A หลังการอบ



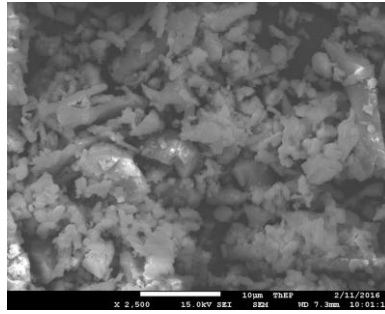
ภาพที่ ก- 20 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment A หลังการอบ (ต่อ)



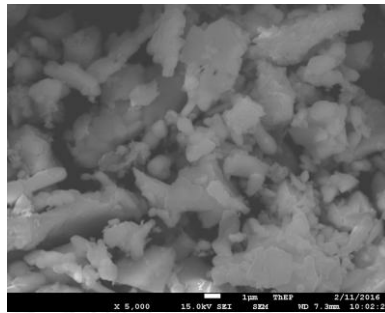
ภาพที่ ก- 21 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment A หลังการอบ (ต่อ)



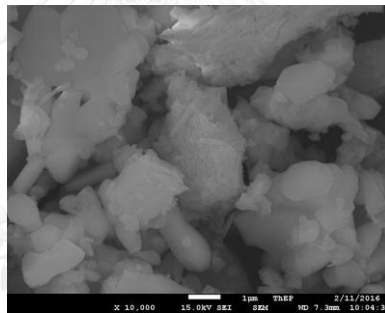
ภาพที่ ก- 22 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment A หลังการอบ (ต่อ)



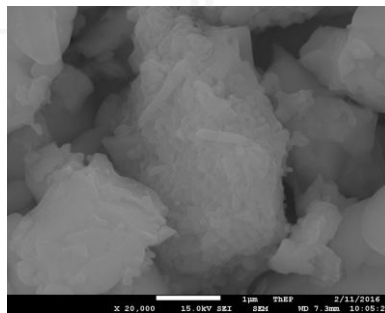
ภาพที่ ก- 23 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment B หลังการอบ



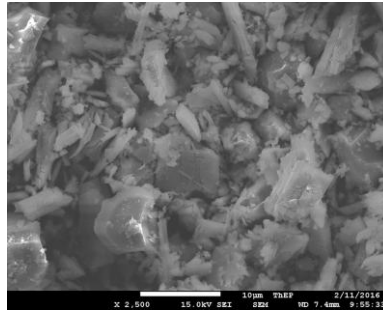
ภาพที่ ก- 24 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment B หลังการอบ (ต่อ)



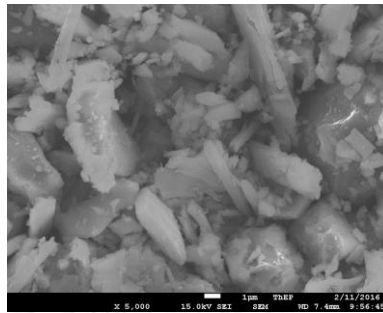
ภาพที่ ก- 25 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment B หลังการอบ (ต่อ)



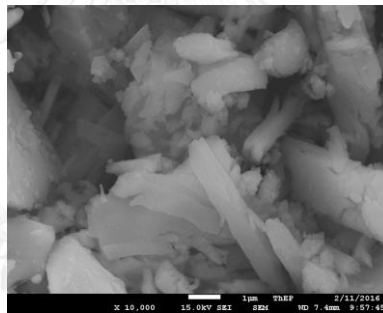
ภาพที่ ก- 26 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment B หลังการอบ (ต่อ)



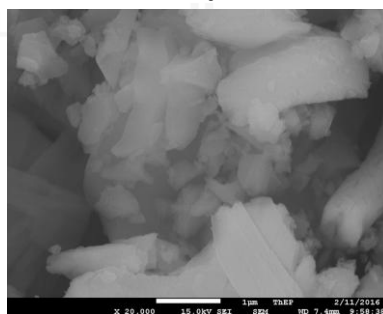
ภาพที่ ก- 27 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment C หลังการอบ



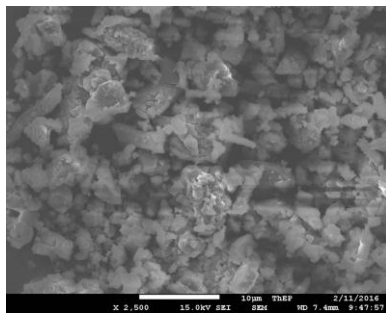
ภาพที่ ก- 28 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment C หลังการอบ (ต่อ)



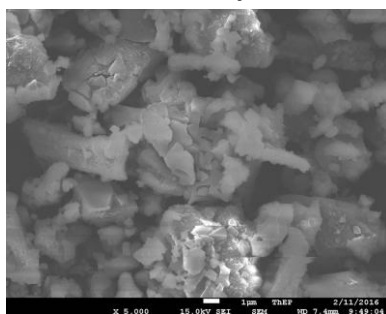
ภาพที่ ก- 29 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment C หลังการอบ (ต่อ)



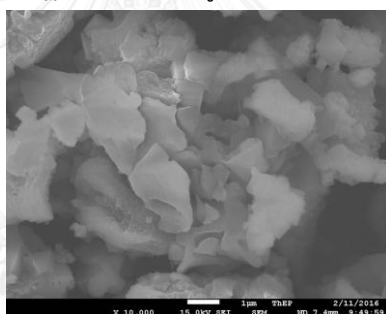
ภาพที่ ก- 30 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment C หลังการอบ (ต่อ)



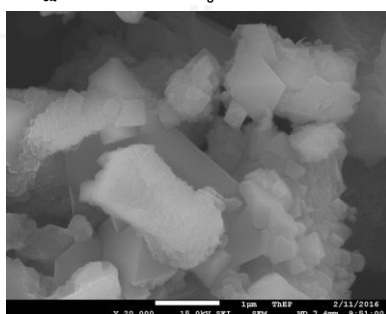
ภาพที่ ก- 31 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment T หลังการอบ



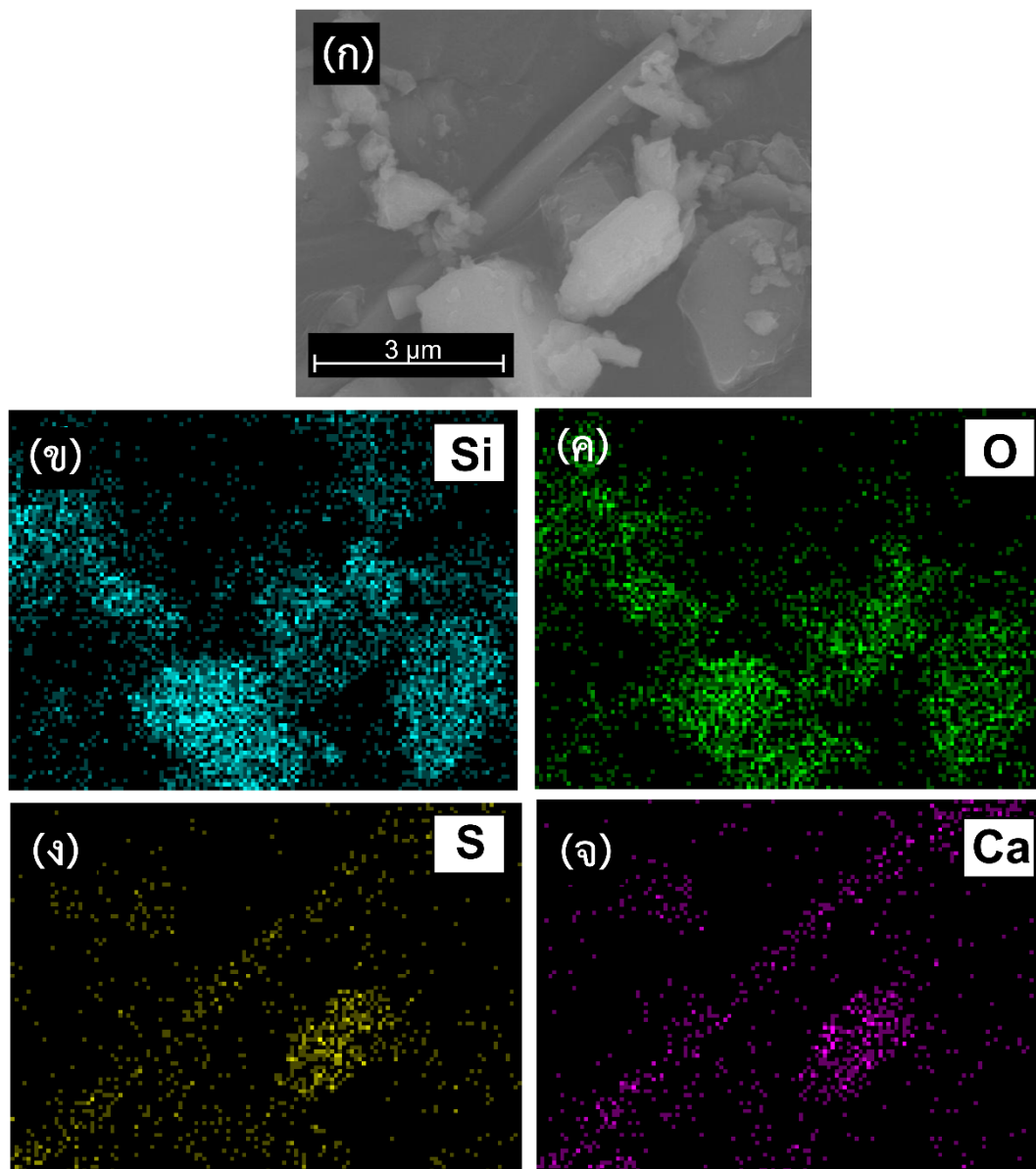
ภาพที่ ก- 32 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment T หลังการอบ (ต่อ)



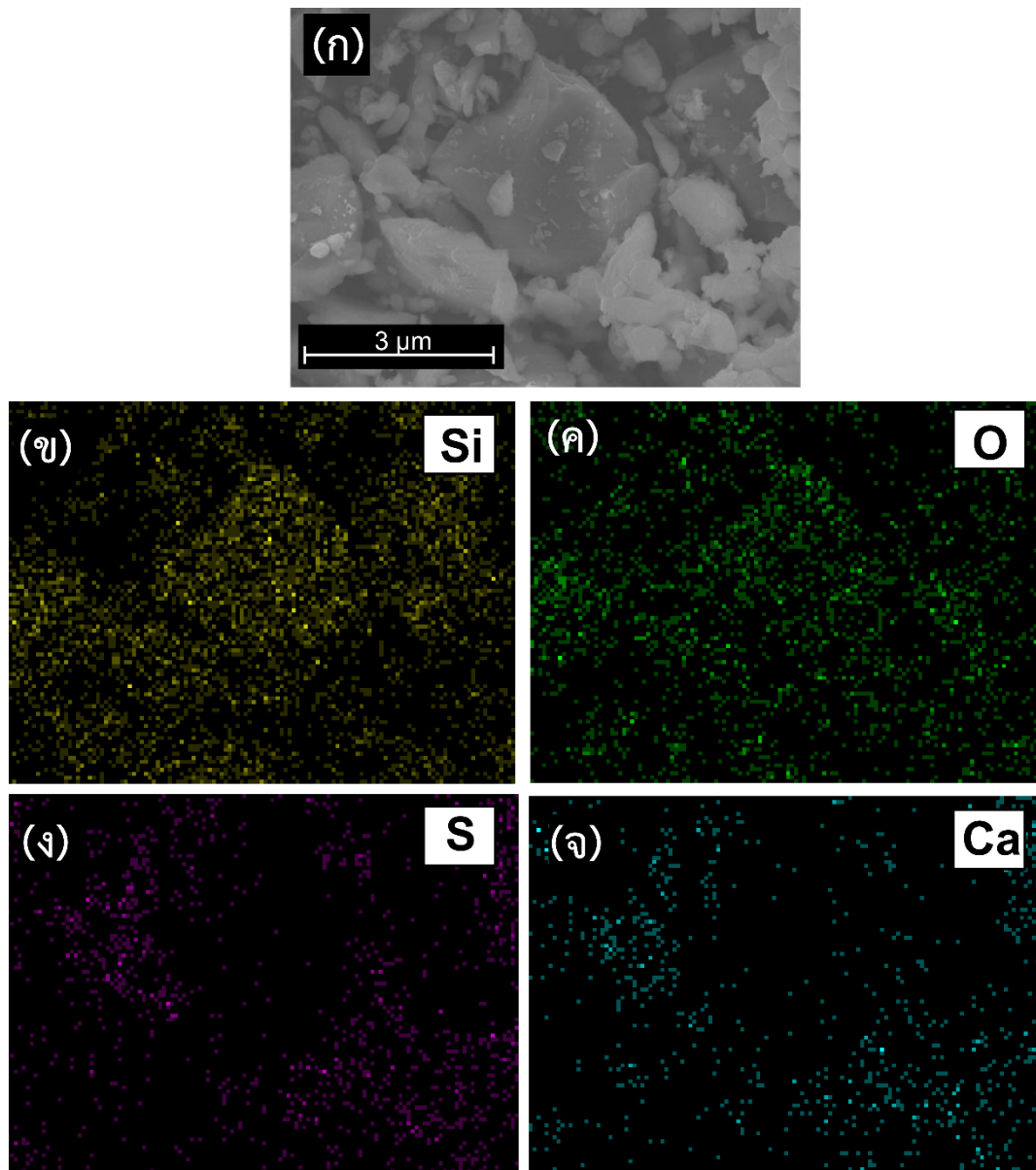
ภาพที่ ก- 33 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment T หลังการอบ (ต่อ)



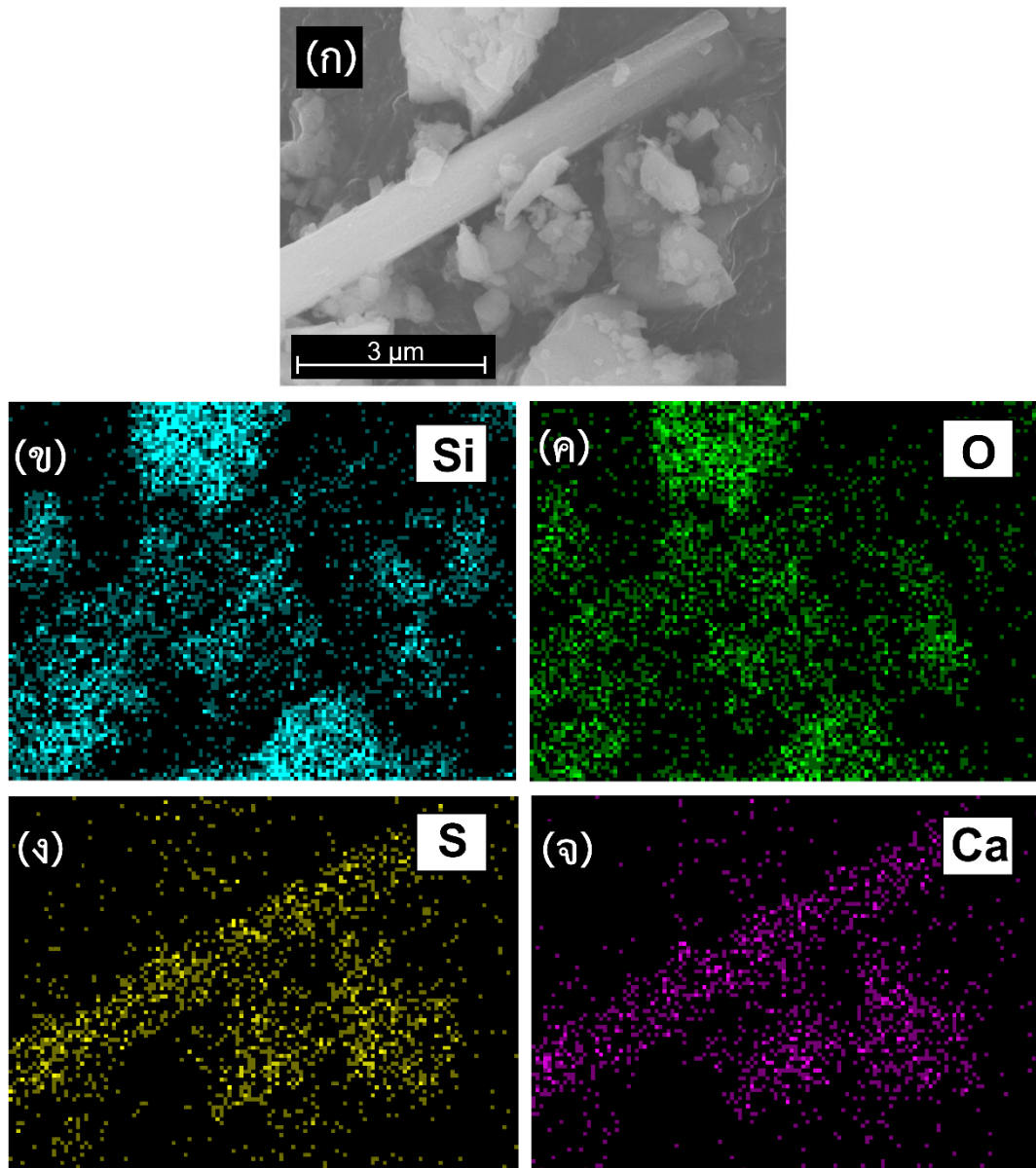
ภาพที่ ก- 34 แสดงสัณฐานวิทยาของปูน Investment T หลังการอบ (ต่อ)



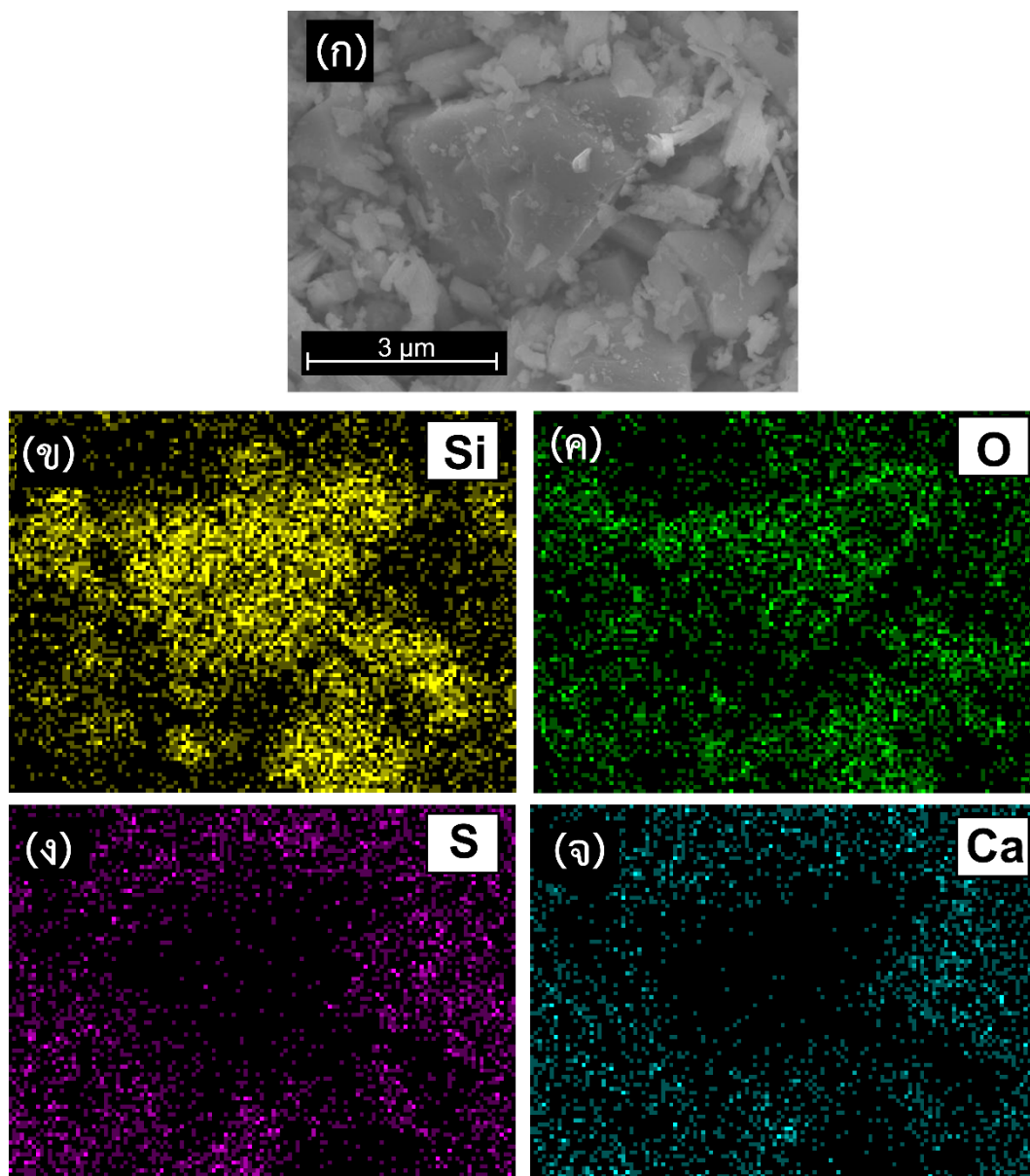
ภาพที่ ก- 35 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคผงปูน Investment B



ภาพที่ ก- 36 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคปูน Investment B หลังการอบ



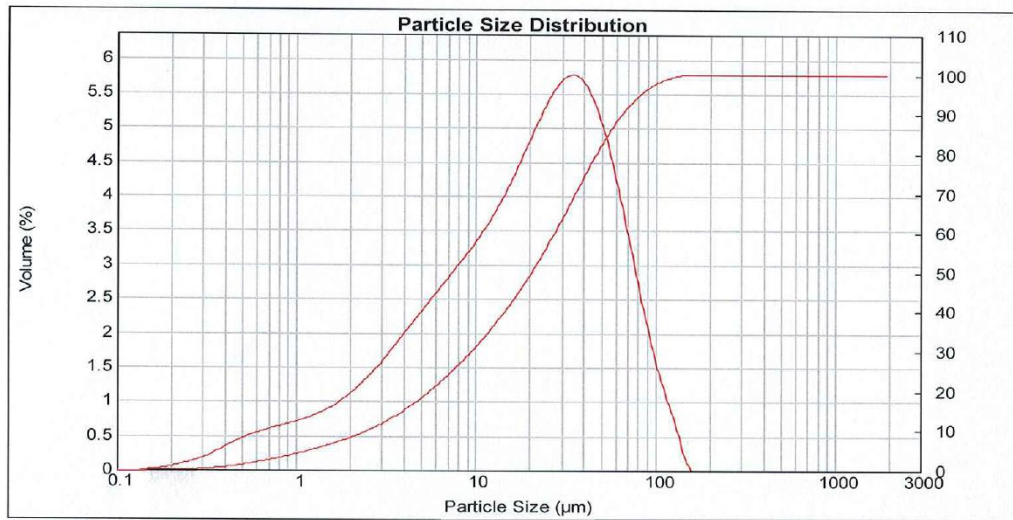
ภาพที่ ก- 37 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคผงปูน Investment C



ภาพที่ ก- 38 แสดงการวิเคราะห์ธาตุของอนุภาคปูน Investment C หลังการอบ

System Details							
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	3.78	Residual (%) :	1.084
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :		Dispersant RI :	1.000
Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0006 %Vol	Specific Surface Area :	1.14 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	2.5 um	D (0.5) :	20.63 um	D (0.9) :	65.84 um
D [4,3] :	28.41 um	D [3,2] :	5.27 um	Span :	3.070	Uniformity :	0.967

Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.02	1.082	0.77	7.962	3.10	58.573	4.11	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.05	1.262	0.84	9.283	3.34	68.291	3.28	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.08	1.471	0.94	10.823	3.60	79.621	2.45	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.13	1.715	1.05	12.619	3.89	92.832	1.69	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.19	2.000	1.19	14.713	4.23	108.234	1.09	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.25	2.332	1.36	17.154	4.61	125.191	0.55	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.34	2.719	1.55	20.000	5.01	147.128	0.03	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.43	3.170	1.76	23.318	5.38	171.539	0.00	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.51	3.696	1.98	27.187	5.66	200.000	0.00	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.57	4.309	2.21	31.698	5.79	233.183	0.00	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.63	5.024	2.44	36.957	5.71	271.871	0.00	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.67	5.857	2.66	43.089	5.39	316.979	0.00		
0.126	0.00	0.928	0.72	6.829	2.88	50.238	4.84	369.570	0.00		
0.147	0.01	1.082	0.72	7.962	2.88	58.573	4.84	430.887	0.00		

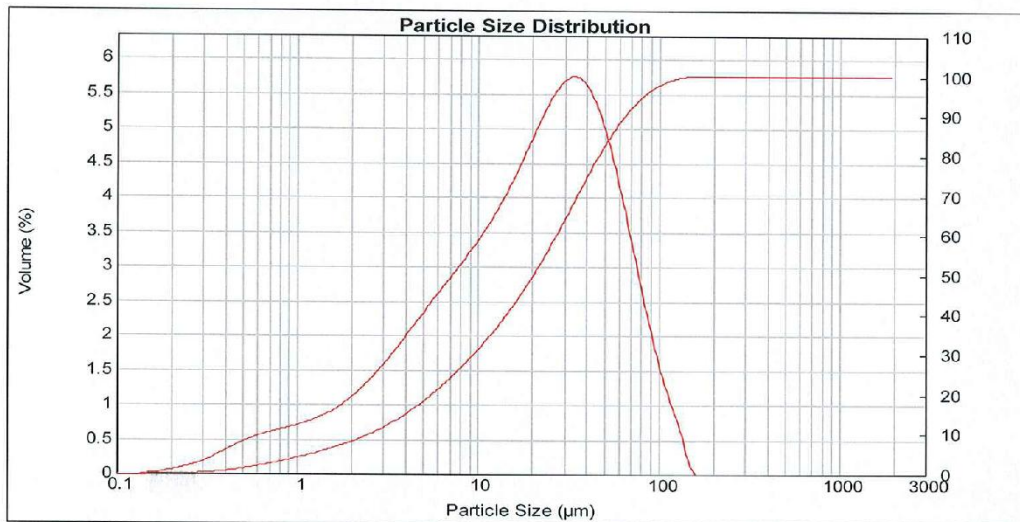


ภาพที่ ก- 39 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment A ครั้งที่ 1

System Details							
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	2.46	Residual (%) :	1.309
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :		Dispersant RI :	1.000

Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0004 %Vol	Specific Surface Area :	1.14 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	2.51 um	D (0.5) :	20.45 um	D (0.9) :	65.64 um
D [4,3] :	28.29 um	D [3,2] :	5.26 um	Span :	3.087	Uniformity :	0.972

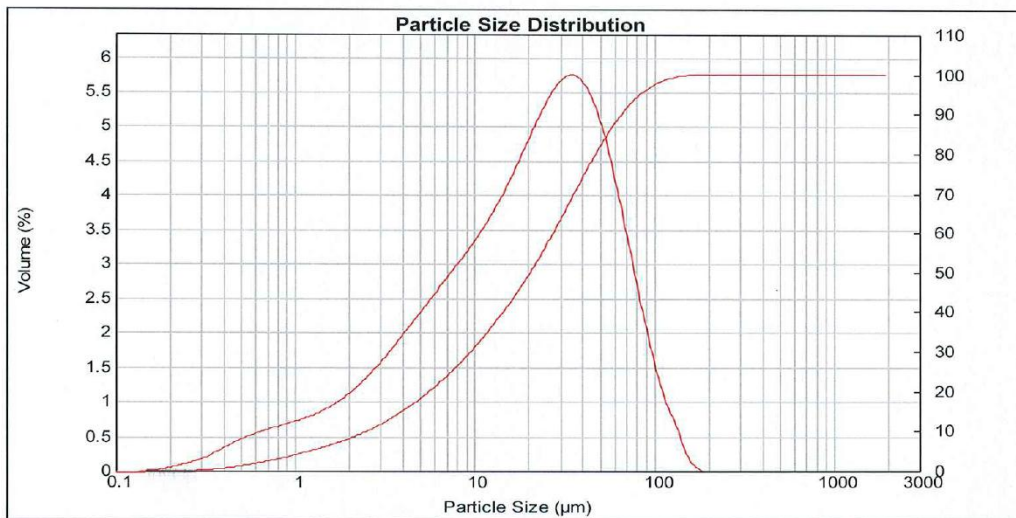
Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.02	1.082	0.77	7.962	3.14	58.573	4.05	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.05	1.262	0.84	9.283	3.38	60.291	3.23	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.08	1.471	0.93	10.623	3.64	79.621	2.41	505.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.13	1.715	1.05	12.610	3.93	92.832	1.68	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.18	2.000	1.19	14.713	4.27	108.234	1.09	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.25	2.332	1.36	17.154	4.61	126.191	0.68	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.34	2.719	1.55	20.000	5.03	147.128	0.00	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.44	3.170	1.76	23.316	5.39	171.539	0.04	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.51	3.696	1.99	27.187	5.66	200.000	0.00	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.57	4.309	2.22	31.696	5.77	233.183	0.00	1715.362	0.00
0.093	0.00	0.683	0.62	5.024	2.46	36.957	5.34	271.871	0.00	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.67	5.857	2.69	43.689	4.78	316.979	0.00		
0.126	0.01	0.928	0.72	6.829	2.91	50.238		369.670	0.00		
0.147	0.01	1.082	0.72	7.962	2.91	58.673		430.887	0.00		



ภาพที่ ก- 40 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment A ครั้งที่ 2

System Details			
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1
		Obscuration (%) :	3.42
		Dispersant Name :	
		Residual (%) :	0.954
		Dispersant RI :	1.000
Result Statistics			
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0005 %Vol
Mean Diameters :		Specific Surface Area :	1.14 m ² /g
D [0.1] :	2.49 um	D (0.5) :	20.67 um
D [0.9] :	66.15 um	D [3,2] :	5.28 um
D [4,3] :	28.63 um	Span :	3.080
		Uniformity :	0.976

Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.02	1.062	0.79	7.902	3.10	58.573	4.11	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.05	1.262	0.86	9.283	3.34	68.291	3.27	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.08	1.471	0.95	10.823	3.60	79.021	2.42	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.13	1.715	1.06	12.619	3.90	92.832	1.66	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.18	2.000	1.20	14.713	4.24	108.234	1.04	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.25	2.332	1.36	17.154	4.62	126.191	0.63	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.34	2.719	1.54	20.000	5.00	147.128	0.17	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.43	3.170	1.75	23.318	5.36	171.539	0.02	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.51	3.696	1.96	27.187	5.77	200.000	0.00	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.57	4.309	2.19	31.698	6.14	233.183	0.00	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.63	5.024	2.41	36.957	6.57	271.871	0.00	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.68	5.857	2.64	43.089	7.00	316.979	0.00		
0.126	0.00	0.928	0.73	6.829	2.87	50.238	7.53	369.570	0.00		
0.147	0.01	1.062	0.73	7.902	2.87	58.573	8.14	430.887	0.00		

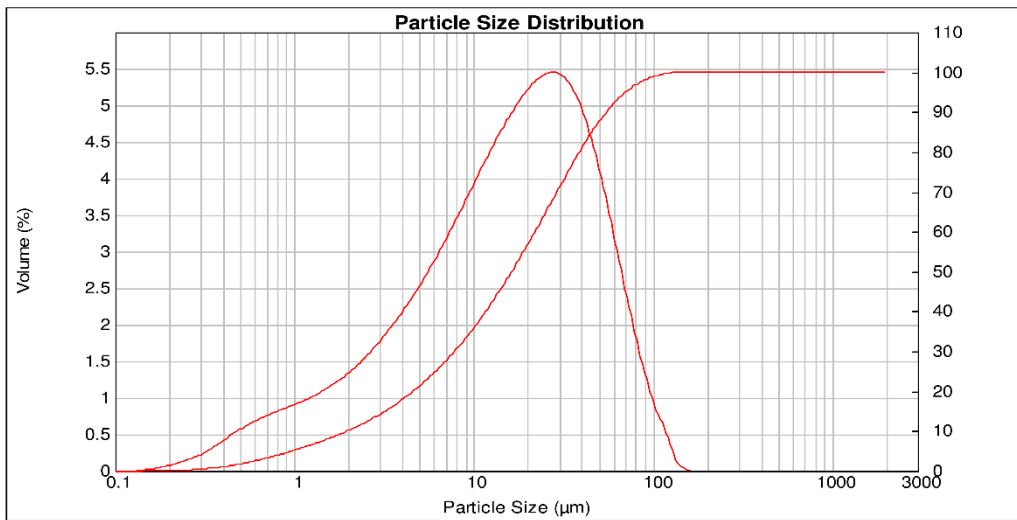


ภาพที่ ก- 41 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment A ครั้งที่ 3

System Details			
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1
		Obscuration (%) :	0.90
		Dispersant Name :	Dry dispersion
		Residual (%) :	0.867
		Dispersant RI :	1.000

Result Statistics			
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0001 %Vol
Mean Diameters :		Specific Surface Area :	1.34 m ² /g
D [0.1] :	1.96 um	D (0.5) :	16.28 um
D [4,3] :	23.35 um	D (0.9) :	54.77 um
		D [3,2] :	4.48 um
		Span :	3.244
		Uniformity :	1.02

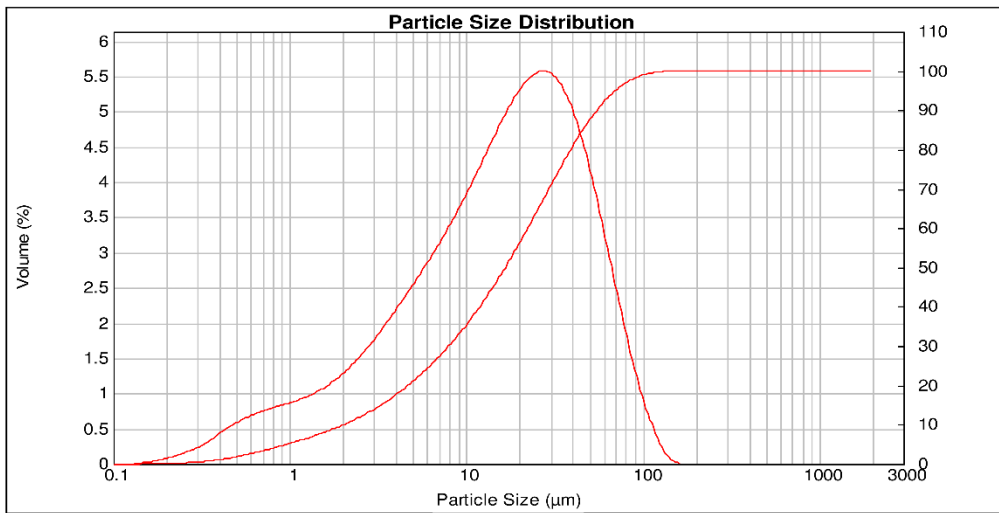
Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.03	1.082	0.98	7.962	3.61	58.573	3.01	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.06	1.262	1.06	9.289	3.94	68.291	2.23	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.10	1.471	1.16	10.823	4.27	79.621	1.54	586.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.15	1.715	1.28	12.619	4.58	92.832	0.96	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.21	2.000	1.42	14.713	4.87	108.234	0.67	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.30	2.332	1.57	17.154	5.12	126.191	0.46	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.42	2.719	1.75	20.000	5.44	147.128	0.31	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.53	3.170	1.96	23.318	5.46	171.539	0.20	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.63	3.696	2.18	27.187	5.31	200.000	0.12	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.71	4.309	2.42	31.698	4.98	233.183	0.08	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.78	5.024	2.69	36.957	4.45	271.871	0.05	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.85	5.857	2.97	43.089	3.78	316.979	0.03		
0.126	0.00	0.928	0.91	6.829	3.28	50.238		369.570	0.02		
0.147	0.01	1.082		7.962		58.573		430.887	0.00		



ภาพที่ ก- 42 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment B ครั้งที่ 1

System Details							
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	1.76	Residual (%) :	0.511
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :	Dry dispersion	Dispersant RI :	1.000
Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0002 %Vol	Specific Surface Area :	1.34 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	2.02 um	D (0.5) :	16.62 um	D (0.9) :	54.77 um
D [4,3] :	23.45 um	D [3,2] :	4.48 um	Span :	3.174	Uniformity :	0.994

Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.03	1.082	0.93	7.962	3.53	58.573	3.06	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.06	1.262	1.00	9.293	3.85	68.291	2.27	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.10	1.471	1.10	10.823	4.19	79.821	1.55	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.16	1.715	1.22	12.619	4.54	92.832	0.93	682.610	0.00
0.037	0.00	0.272	0.22	2.000	1.37	14.713	4.88	108.294	0.47	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.32	2.332	1.54	17.154	5.19	126.191	0.13	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.43	2.719	1.74	20.000	5.57	147.128	0.01	1082.399	0.00
0.059	0.00	0.431	0.54	3.170	1.96	23.318	5.77	171.539	0.00	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.63	3.696	2.19	27.187	5.95	200.000	0.00	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.71	4.309	2.44	31.698	6.05	233.183	0.00	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.77	5.024	2.69	36.957	6.11	271.871	0.00	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.82	5.857	2.95	43.089	6.14	316.979	0.00		
0.126	0.00	0.928	0.87	6.829	3.23	50.238	6.15	369.570	0.00		
0.147	0.01	1.082	0.87	7.962	3.23	58.573	6.15	430.887	0.00		

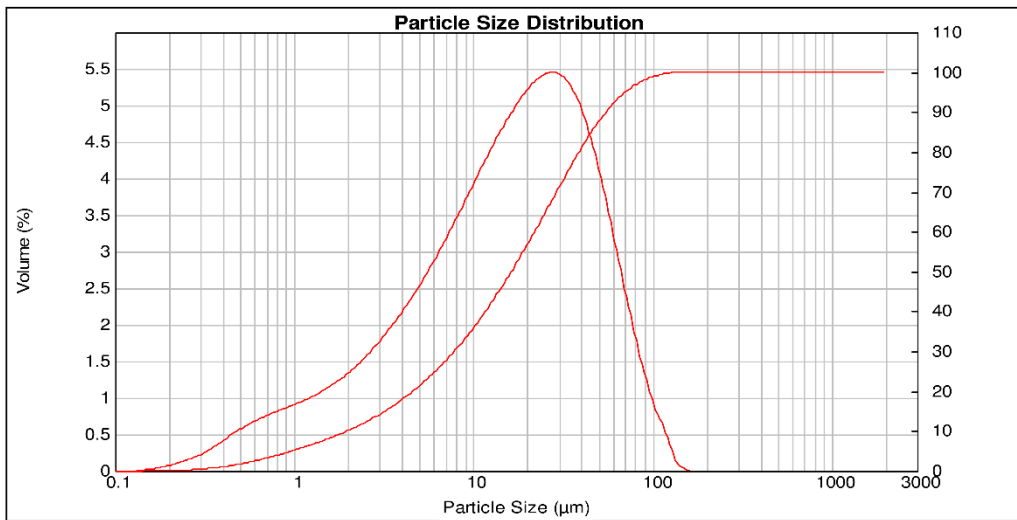


ภาพที่ ก- 43 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment B ครั้งที่ 2

System Details			
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1
		Obscuration (%) :	0.90
		Dispersant Name :	Dry dispersion
		Residual (%) :	0.867
		Dispersant RI :	1.000

Result Statistics			
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0001 %Vol
Mean Diameters :		Specific Surface Area :	1.34 m ² /g
D [0.1] :	1.96 um	D (0.5) :	16.28 um
D [0.9] :	54.77 um	D [3,2] :	4.48 um
D [4,3] :	23.35 um	Span :	3.244
		Uniformity :	1.02

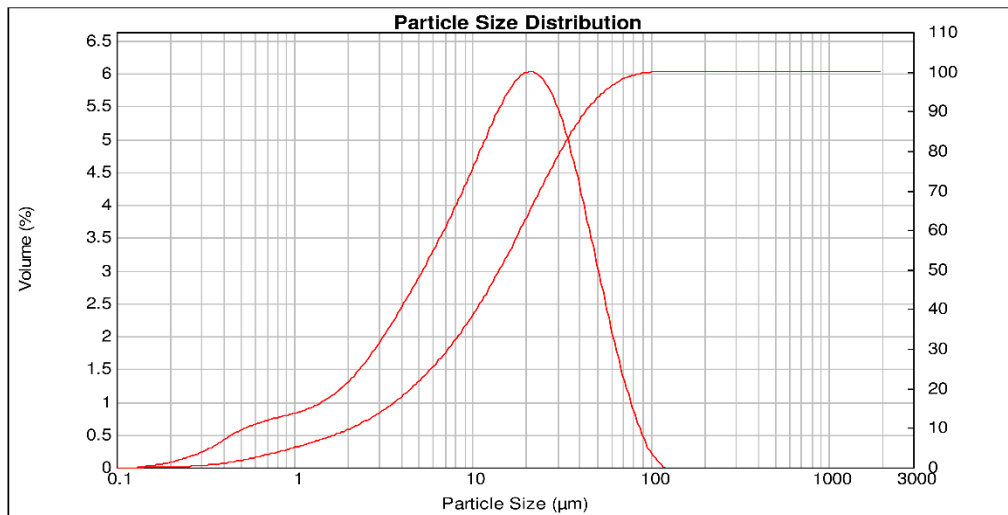
Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.03	1.062	0.98	7.962	3.61	58.573	3.01	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.06	1.262	1.06	9.283	3.94	68.291	2.23	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.10	1.471	1.16	10.823	4.27	79.621	1.54	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.15	1.715	1.28	12.619	4.58	92.832	0.98	692.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.21	2.000	1.42	14.713	4.87	108.234	0.62	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.30	2.332	1.57	17.154	5.12	126.191	0.41	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.42	2.719	1.75	20.000	5.44	147.128	0.27	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.53	3.170	1.96	23.318	5.78	171.539	0.17	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.69	3.696	2.19	27.187	6.14	200.000	0.11	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.91	4.309	2.42	31.698	6.51	233.183	0.07	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	1.18	5.024	2.69	36.957	6.90	271.871	0.05	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	1.51	5.857	2.97	43.089	7.31	316.979	0.04		
0.126	0.00	0.928	1.91	6.829	3.28	50.238	7.75	369.570	0.03		
0.147	0.01	1.082	2.47	7.962	3.61	58.573	3.78	430.887	0.02		



ภาพที่ ก- 44 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment B ครั้งที่ 3

System Details							
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	1.30	Residual (%) :	0.660
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :	Dry dispersion	Dispersant RI :	1.000
Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0002 %Vol	Specific Surface Area :	1.36 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	2.09 um	D (0.5) :	14.23 um	D (0.9) :	43.45 um
D [4,3] :	19.22 um	D [3,2] :	4.41 um	Span :	2.906	Uniformity :	0.908

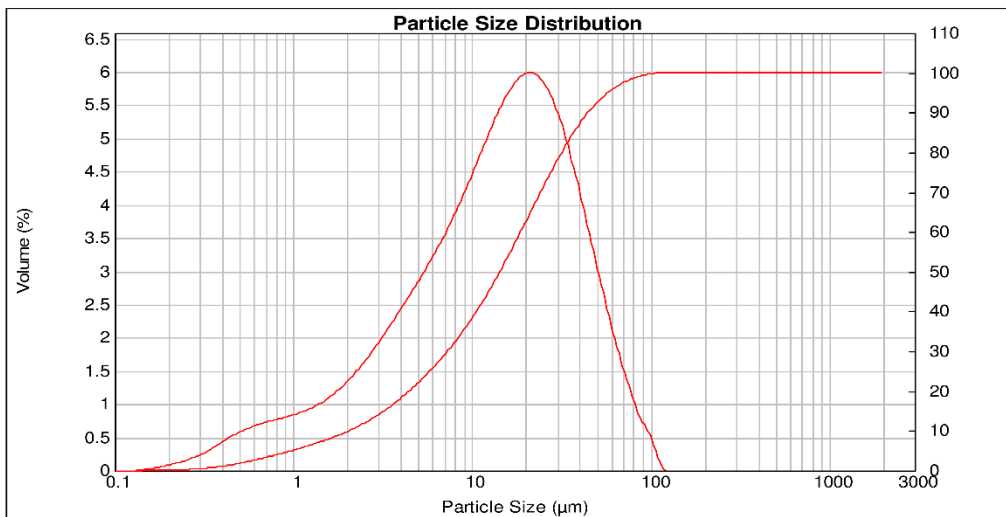
Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.03	1.082	0.89	7.982	4.16	58.573	1.89	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.06	1.282	0.97	9.283	4.57	66.291	1.19	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.10	1.471	1.08	10.823	4.99	79.621	0.65	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.16	1.715	1.22	12.619	5.39	92.832	0.24	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.22	2.000	1.40	14.713	5.74	106.234	0.03	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.31	2.332	1.62	17.154	5.97	126.191	0.00	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.42	2.719	1.87	20.000	6.04	147.128	0.00	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.53	3.170	2.14	23.318	5.92	171.539	0.00	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.61	3.696	2.44	27.187	5.57	200.000	0.00	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.68	4.309	2.75	31.698	5.03	233.183	0.00	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.74	5.024	3.07	36.957	4.33	271.871	0.00	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.78	5.857	3.41	43.089	3.52	316.979	0.00		
0.126	0.00	0.928	0.83	6.829	3.77	50.238	2.68	369.570	0.00		
0.147	0.01	1.082		7.982		58.573		430.887	0.00		



ภาพที่ ก- 45 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment C ครั้งที่ 1

System Details							
Accessory Name :	Sirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	1.90	Residual (%) :	0.361
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :	Dry dispersion	Dispersant RI :	1.000
Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0003 %Vol	Specific Surface Area :	1.38 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	2.04 um	D (0.5) :	14.32 um	D (0.9) :	44.67 um
D [4,3] :	19.64 um	D [3,2] :	4.36 um	Span :	2.978	Uniformity :	0.933

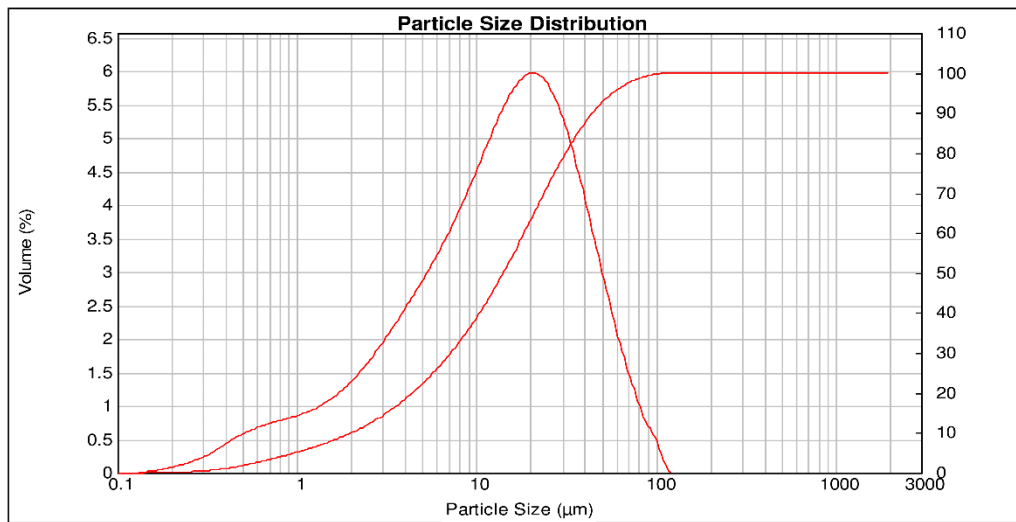
Size (um)	Volume In %	Size (um)	Volume In %	Size (um)	Volume In %	Size (um)	Volume In %	Size (um)	Volume In %	Size (um)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.03	1.082	0.91	7.382	4.06	58.573	1.97	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.06	1.262	0.99	9.283	4.48	68.291	1.36	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.11	1.471	1.11	10.823	4.91	79.621	0.85	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.16	1.715	1.25	12.619	5.34	92.822	0.51	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.23	2.000	1.44	14.713	5.94	108.234	0.04	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.32	2.332	1.66	17.154	6.00	126.191	0.00	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.43	2.719	1.90	20.000	5.86	147.128	0.00	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.54	3.170	2.16	23.318	5.49	171.539	0.00	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.69	3.696	2.44	27.187	4.93	200.000	0.00	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.75	4.309	2.72	31.698	4.23	233.183	0.00	1715.392	0.00
0.083	0.00	0.683	0.79	5.024	3.02	36.957	3.46	271.871	0.00	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.84	5.857	3.33	43.089	2.69	316.979	0.00		
0.126	0.01	0.928		6.829		50.238		369.570			
0.147		1.082		7.962		58.573		430.887			



ภาพที่ ก- 46 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment C ครั้งที่ 2

System Details							
Accessory Name :	Sciocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	2.20	Residual (%) :	0.416
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :	Dry dispersion	Dispersant RI :	1.000
Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0003 %Vol	Specific Surface Area :	1.39 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	2.01 um	D (0.5) :	14.1 um	D (0.9) :	44.18 um
D [4,3] :	19.41 um	D [3,2] :	4.32 um	Span :	2.992	Uniformity :	0.938

Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.03	1.092	0.92	7.962	4.11	58.573	1.92	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.06	1.262	1.01	9.283	4.53	68.291	1.32	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.11	1.471	1.13	10.823	4.97	79.621	0.82	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.16	1.715	1.28	12.619	5.38	92.632	0.50	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.23	2.000	1.46	14.713	5.73	108.234	0.04	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.32	2.332	1.68	17.154	5.94	126.191	0.00	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.43	2.719	1.92	20.000	5.98	147.128	0.00	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.54	3.170	2.18	23.318	5.81	171.539	0.00	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.63	3.696	2.45	27.187	5.42	200.000	0.00	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.70	4.309	2.74	31.688	4.85	233.183	0.00	1715.382	0.00
0.093	0.00	0.683	0.76	5.024	3.04	36.957	4.14	271.871	0.00	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.81	5.857	3.37	43.089	3.98	316.979	0.00		
0.126	0.00	0.928	0.86	6.829	3.72	50.238	2.62	369.570	0.00		
0.147	0.01	1.082		7.962		58.573		430.887	0.00		

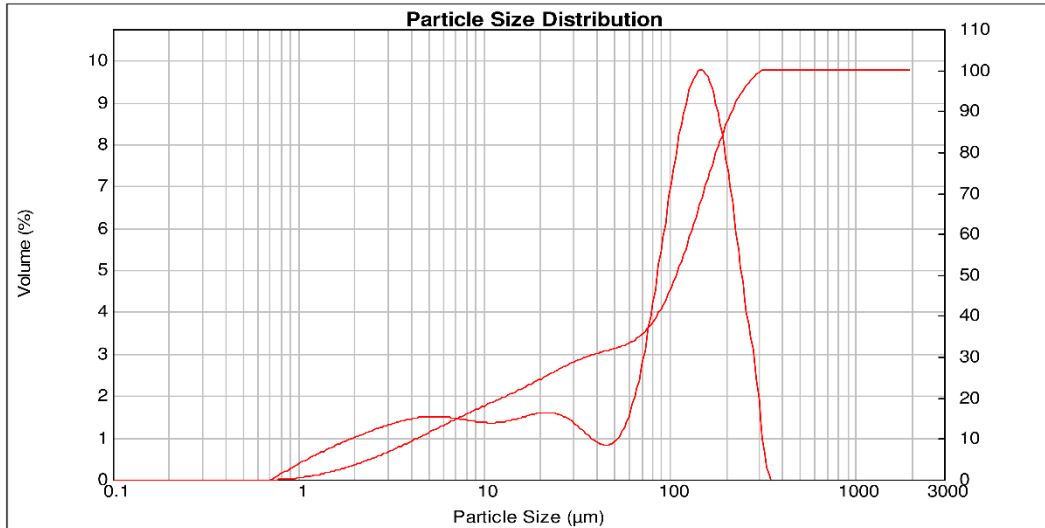


ภาพที่ ก- 47 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment C ครั้งที่ 3

System Details							
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	2.31	Residual (%) :	1.345
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :	Dry dispersion	Dispersant RI :	1.000

Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0009 %Vol	Specific Surface Area :	0.44 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	4.33 um	D (0.5) :	108.58 um	D (0.9) :	215.99 um
D [4,3] :	106.75 um	D [3,2] :	13.64 um	Span :	1.949	Uniformity :	0.625

Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.00	1.082	0.53	7.962	1.40	58.573	1.82	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.00	1.262	0.68	9.283	1.37	68.291	3.14	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.00	1.471	0.82	10.823	1.36	79.621	4.92	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.00	1.715	0.95	12.619	1.41	92.832	6.89	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.00	2.000	1.07	14.713	1.48	108.234	8.61	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.00	2.332	1.18	17.154	1.57	126.191	9.64	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.00	2.719	1.29	20.000	1.61	147.128	9.66	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.00	3.170	1.38	23.318	1.56	171.539	8.60	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.00	3.696	1.45	27.187	1.40	200.000	6.72	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.00	4.309	1.50	31.696	1.16	233.183	4.41	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.03	5.024	1.51	36.957	0.92	271.871	2.42	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.21	5.857	1.50	43.089	0.83	316.979	0.09		
0.126	0.00	0.928	0.39	6.829	1.45	50.238	1.08	369.570	0.00		
0.147	0.00	1.082	0.39	7.962	1.45	58.573	1.08	430.887	0.00		



ภาพที่ ก- 48 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment T ครั้งที่ 1

System Details							
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	1.21	Residual (%) :	0.800
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :	Dry dispersion	Dispersant RI :	1.000

Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0004 %Vol	Specific Surface Area :	0.468 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	4.02 um	D (0.5) :	106.99 um	D (0.9) :	215.47 um
D [4,3] :	104.86 um	D [3,2] :	12.83 um	Span :	1.976	Uniformity :	0.645

Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.147	0.00	1.082	0.57	7.962	1.53	58.573	1.68	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.00	1.262	0.73	9.283	1.53	66.291	1.68	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.00	1.471	0.88	10.823	1.49	79.621	2.92	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.00	1.715	1.02	12.619	1.48	92.832	4.64	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.00	2.000	1.15	14.713	1.50	108.234	6.58	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.00	2.332	1.28	17.154	1.55	126.191	8.34	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.00	2.719	1.39	20.000	1.60	147.128	9.44	1062.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.00	3.170	1.49	23.316	1.62	171.539	9.55	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.00	3.696	1.58	27.187	1.56	200.000	8.57	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.00	4.309	1.61	31.696	1.41	233.183	6.73	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.00	5.024	1.63	36.957	1.16	271.871	4.40	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.04	5.857	1.61	43.089	0.92	316.979	2.33		
0.126	0.00	0.928	0.22	6.829	1.58	50.238	0.80	369.570	0.08		
0.147	0.00	1.082	0.41	7.962	1.58	58.573	1.00	430.887	0.00		

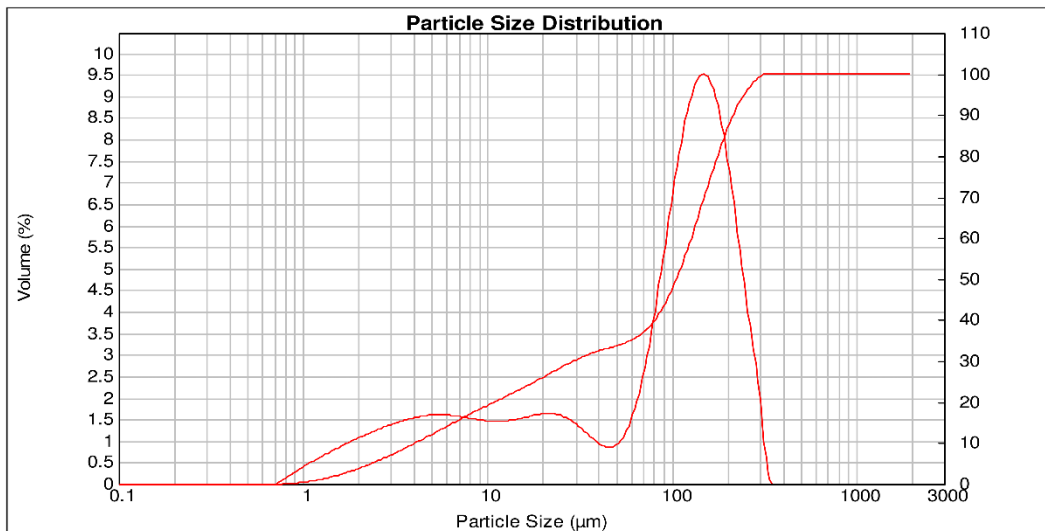


ภาพที่ ก- 49 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment T ครั้งที่ 2

System Details							
Accessory Name :	Scirocco 2000	Beam Length (mm) :	10.00	Obscuration (%) :	1.73	Residual (%) :	0.888
Particle RI :	1.525	Absorption :	0.1	Dispersant Name :	Dry dispersion	Dispersant RI :	1.000

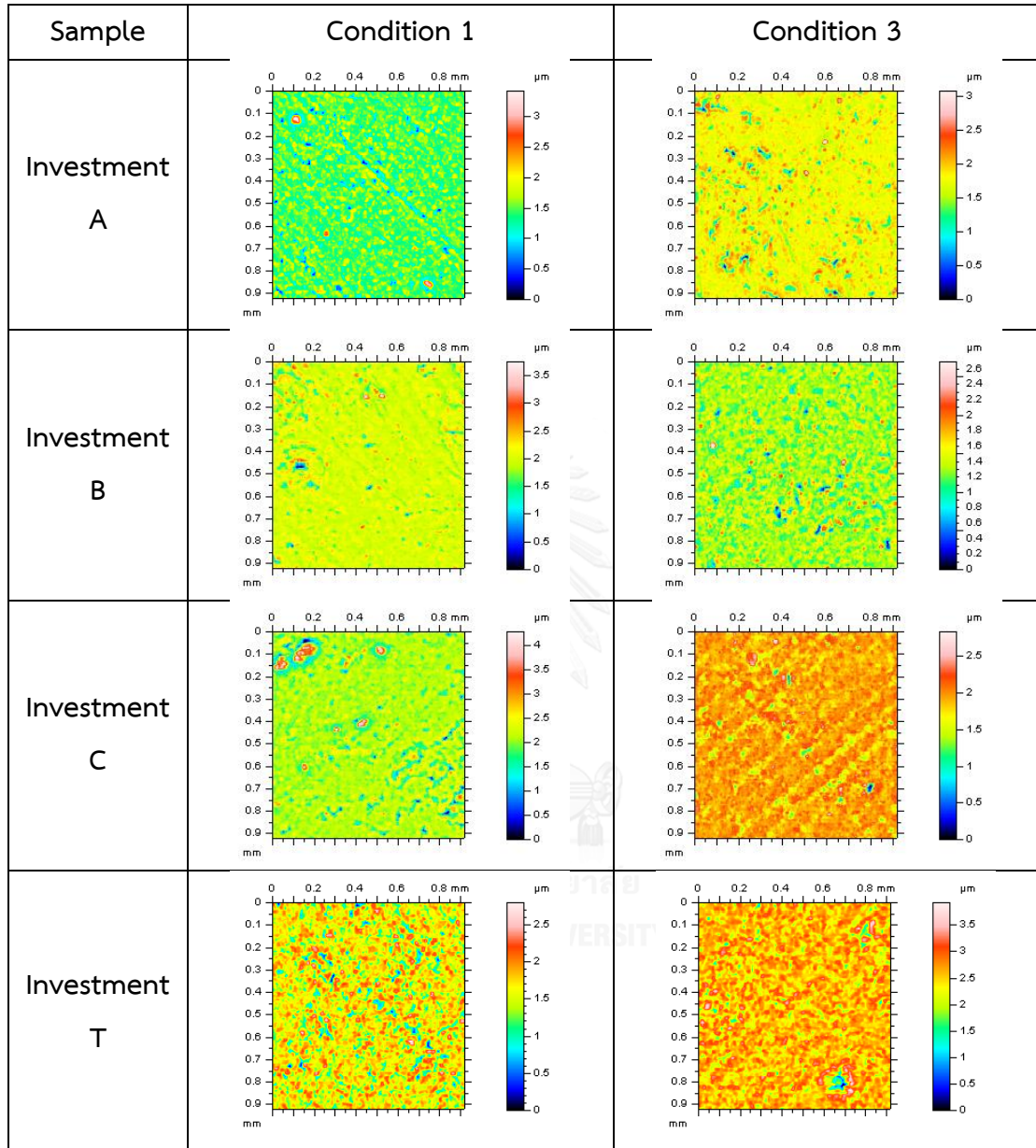
Result Statistics							
Distribution Type :	Volume	Concentration :	0.0006 %Vol	Specific Surface Area :	0.464 m ² /g		
Mean Diameters :		D (0.1) :	4.06 um	D (0.5) :	106.2 um	D (0.9) :	215.65 um
D [4,3] :	104.69 um	D [3,2] :	12.92 um	Span :	1.992	Uniformity :	0.648

Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %	Size (µm)	Volume In %
0.020	0.00	0.172	0.00	1.062	0.56	7.962	1.51	58.573	1.77	430.887	0.00
0.023	0.00	0.172	0.00	1.262	0.72	9.283	1.47	68.291	3.00	502.377	0.00
0.027	0.00	0.200	0.00	1.471	0.87	10.823	1.46	79.621	4.71	585.729	0.00
0.032	0.00	0.233	0.00	1.715	1.01	12.619	1.49	92.832	6.61	682.910	0.00
0.037	0.00	0.272	0.00	2.000	1.14	14.713	1.55	108.234	8.31	796.214	0.00
0.043	0.00	0.317	0.00	2.332	1.26	17.154	1.61	126.191	9.38	928.318	0.00
0.050	0.00	0.370	0.00	2.719	1.37	20.000	1.64	147.128	9.44	1082.339	0.00
0.059	0.00	0.431	0.00	3.170	1.47	23.318	1.59	171.539	8.45	1261.915	0.00
0.068	0.00	0.502	0.00	3.696	1.54	27.187	1.44	200.000	6.64	1471.285	0.00
0.080	0.00	0.586	0.00	4.309	1.59	31.696	1.20	233.183	4.37	1715.392	0.00
0.093	0.00	0.683	0.04	5.024	1.61	36.957	0.96	271.871	2.42	2000.000	0.00
0.108	0.00	0.796	0.22	5.857	1.60	43.089	0.86	316.979	0.09		
0.126	0.00	0.928	0.41	6.829	1.56	50.238	1.08	369.570	0.00		
0.147	0.00	1.062	0.41	7.962	1.56	58.573	1.08	430.887	0.00		



ภาพที่ ก- 50 แสดงข้อมูลการทดสอบขนาดอนุภาคผงปูน Investment T ครั้งที่ 3

ตารางที่ ก- 1 แสดงผลการทดสอบความขรุขระของผิวโลหะหลังการหล่อด้วยรูปแบบการอบที่ 1 และ 3



ภาคผนวก ข

Name and formula

Reference code:	00-049-1642
Mineral name:	Tazheranite, syn
Compound name:	Zirconium Oxide
Empirical formula:	O ₂ Zr
Chemical formula:	ZrO ₂

Crystallographic parameters

Crystal system:	Cubic
Space group:	Fm-3m
Space group number:	225
a (Å):	5.1280
b (Å):	5.1280
c (Å):	5.1280
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	90.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	134.85
Z:	4.00
RIR::	-

Subfiles and quality

Subfiles:	Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, Alloy, metal or intermetallic, Superconducting Material
Quality:	Indexed (I)

Comments

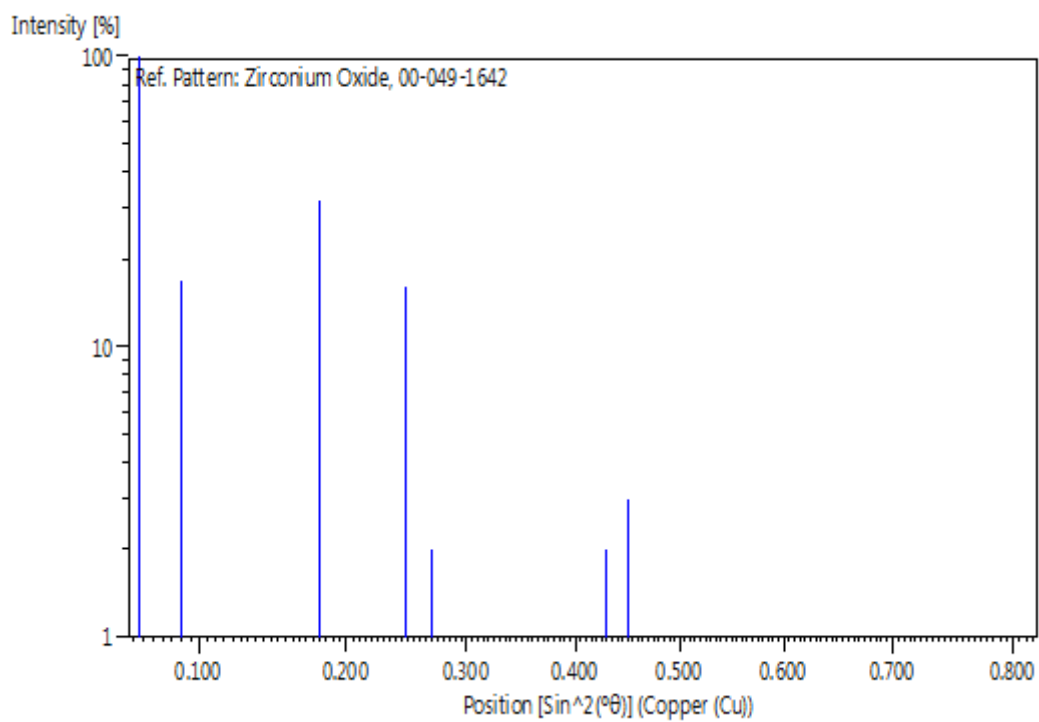
Creation Date:	01-Sep-99
Additional Patterns:	See 00-022-0540. To replace 00-027-0997
General Comments:	Oxygen deficient structure (in range of "Zr O" 1.688-"Zr O" 1.740)
Sample Preparation:	Prepared by sintering 10 wt.% "Zr O ₂ " in "Al ₂ O ₃ " at 1973 K for 90 minutes at a pressure of 0.133 MPa. The oxygen deficient phase was synthesized by annealing in vacuum at pressures below 2.8x10 ⁻² MPa.

References

Primary reference: Tomaszewski, H., Godwod, K., *J. Eur. Ceram. Soc.*, **15**, 17, (1995)
 Unit cell: Duwez, Odell., *J. Am. Ceram. Soc.*, **33**, 274, (1950)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	1	1	2.96463	30.120	100.0
2	2	0	0	2.56448	34.960	17.0
3	2	2	0	1.81521	50.220	32.0
4	3	1	1	1.54668	59.740	16.0
5	2	2	2	1.48102	62.680	2.0
6	4	0	0	1.28085	73.940	1.0
7	3	3	1	1.17697	81.760	2.0
8	4	2	0	1.14676	84.400	3.0
9	4	2	2	1.04697	94.740	1.0
10	3	3	3	0.98647	102.680	1.0
11	5	3	1	0.86685	125.400	1.0
12	6	0	0	0.85472	128.640	1.0

Stick Pattern

Name and formula

Reference code:	01-079-0612
Mineral name:	Periclase, syn
Compound name:	Magnesium Oxide
Empirical formula:	MgO
Chemical formula:	MgO

Crystallographic parameters

Crystal system:	Cubic
Space group:	Fm-3m
Space group number:	225
a (Å):	4.2170
b (Å):	4.2170
c (Å):	4.2170
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	90.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	74.99
Z:	4.00
RIR:	3.04

Status, subfiles and quality

Status:	Alternate Pattern
Subfiles:	Pharmaceutical, Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Superconducting Material, ICSD Pattern
Quality:	Hypothetical (H)

Comments

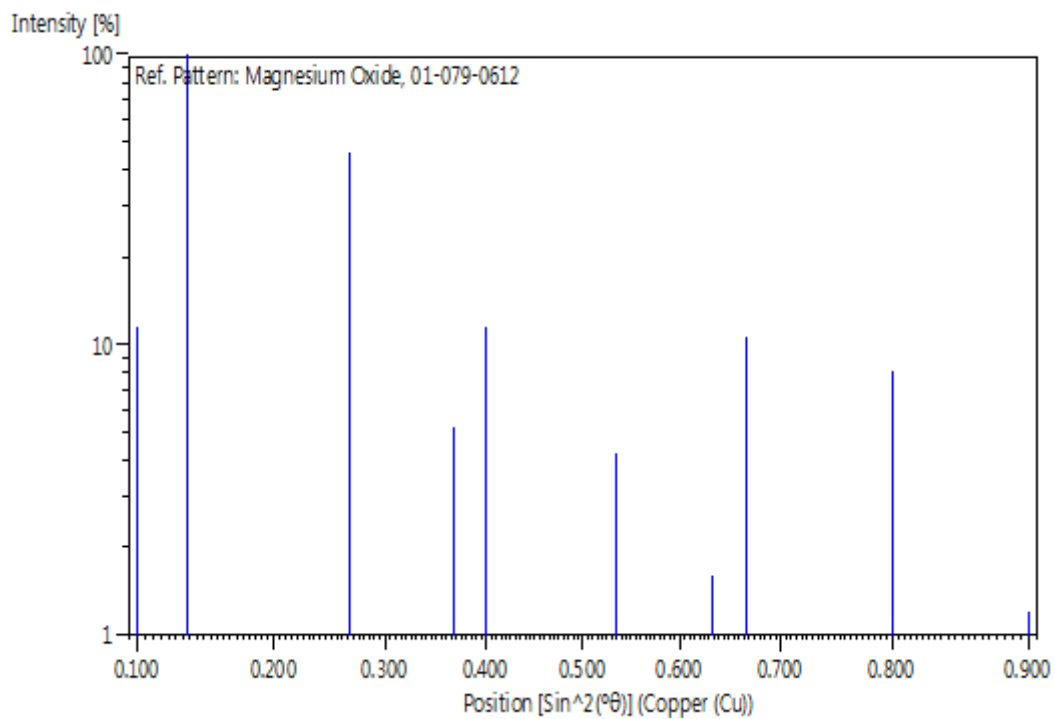
ANX:	AX
ICSD collection code:	41990
Creation Date:	01-Sep-98
Modification Date:	01-Sep-11
Cross-References:	ICSD:41990
ANX:	AX
Analysis:	Mg1 O1
Formula from original source:	Mg O
ICSD Collection Code:	41990
Hypothetical Structure:	Structure calculated theoretically
Calculated Pattern Original Remarks:	Melts at ambient pressure at 3098 K, predicted by PIB potential at 3200(500) K, 590 K for a 1000-atom cluster. Predicted melting point at 300 GPa about 10000 K, for a 1000-atom cluster about 15000 K
Minor Warning:	No e.s.d reported/abstracted on the cell dimension
Wyckoff Sequence:	b a(FM3-M)
Unit Cell Data Source:	Single Crystal.

References

Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*
 Structure: Cohen, R.E., Gong, Z., *Phys. Rev. B: Condens. Matter. Mater. Phys.* , **50**, 12301, (1994)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	1	1	2.43469	36.889	11.5
2	2	0	0	2.10850	42.856	100.0
3	2	2	0	1.49093	62.217	46.2
4	3	1	1	1.27147	74.578	5.2
5	2	2	2	1.21734	78.510	11.5
6	4	0	0	1.05425	93.884	4.2
7	3	3	1	0.96745	105.541	1.6
8	4	2	0	0.94295	109.552	10.7
9	4	2	2	0.86079	126.984	8.1
10	5	1	1	0.81156	143.302	1.2

Stick Pattern

Name and formula

Reference code:	01-078-1217
Mineral name:	Griceite, syn
Compound name:	Lithium Fluoride
Empirical formula:	FLi
Chemical formula:	LiF

Crystallographic parameters

Crystal system:	Cubic
Space group:	Fm-3m
Space group number:	225
a (Å):	4.0270
b (Å):	4.0270
c (Å):	4.0270
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	90.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	65.30
Z:	4.00
RIR:	1.52

Status, subfiles and quality

Status:	Alternate Pattern
Subfiles:	Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, ICSD Pattern
Quality:	Indexed (I)

Comments

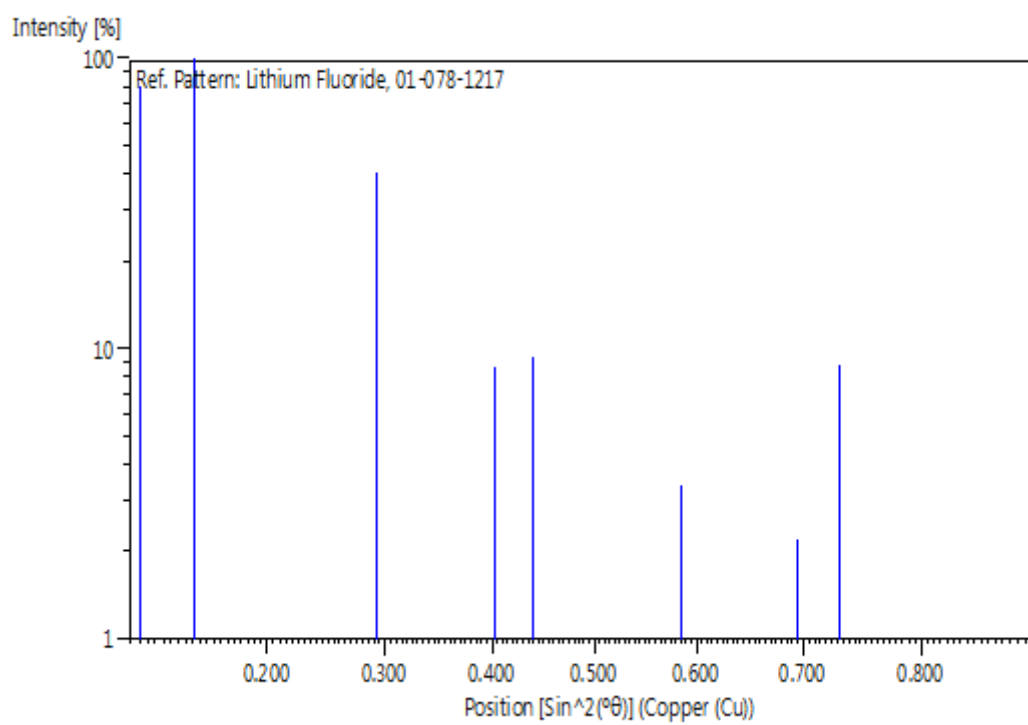
ANX:	AX
ICSD collection code:	62361
Creation Date:	01-Sep-98
Modification Date:	01-Sep-11
Cross-References:	ICSD:62361
ANX:	AX
Analysis:	F1 Li1
Formula from original source:	Li F
ICSD Collection Code:	62361
Calculated Pattern Original Remarks:	Mp. 1116 K
Minor Warning:	No e.s.d reported/abstracted on the cell dimension. No R factors reported/abstracted
Wyckoff Sequence:	b a(FM3-M)
Unit Cell Data Source:	Single Crystal.

References

Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*, (2004)
 Structure: Recker, K., Wallrafen, F., Dupre, K., *Naturwissenschaften*, **75**, 156, (1988)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	1	1	2.32499	38.697	79.8
2	2	0	0	2.01350	44.986	100.0
3	2	2	0	1.42376	65.508	40.7
4	3	1	1	1.21419	78.753	8.7
5	2	2	2	1.16249	83.001	9.3
6	4	0	0	1.00675	99.838	3.4
7	3	3	1	0.92386	112.979	2.2
8	4	2	0	0.90047	117.618	8.9
9	4	2	2	0.82201	139.138	7.0

Stick Pattern

Name and formula

Reference code:	00-042-1468
Mineral name:	Corundum, syn
Compound name:	Aluminum Oxide
Common name:	sapphire, alundum, alumina, diamonite, ruby
Empirical formula:	Al ₂ O ₃
Chemical formula:	Al ₂ O ₃

Crystallographic parameters

Crystal system:	Rhombohedral
Space group:	R-3c
Space group number:	167
a (Å):	4.7588
b (Å):	4.7588
c (Å):	12.9920
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	120.0000
Calculated density (g/cm ³):	3.98
Measured density (g/cm ³):	4.05
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	254.80
Z:	6.00
RIR:	1.00

Status, subfiles and quality

Status:	Marked as deleted by ICDD
Subfiles:	Pharmaceutical, Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Superconducting Material
Quality:	Star (S)

Comments

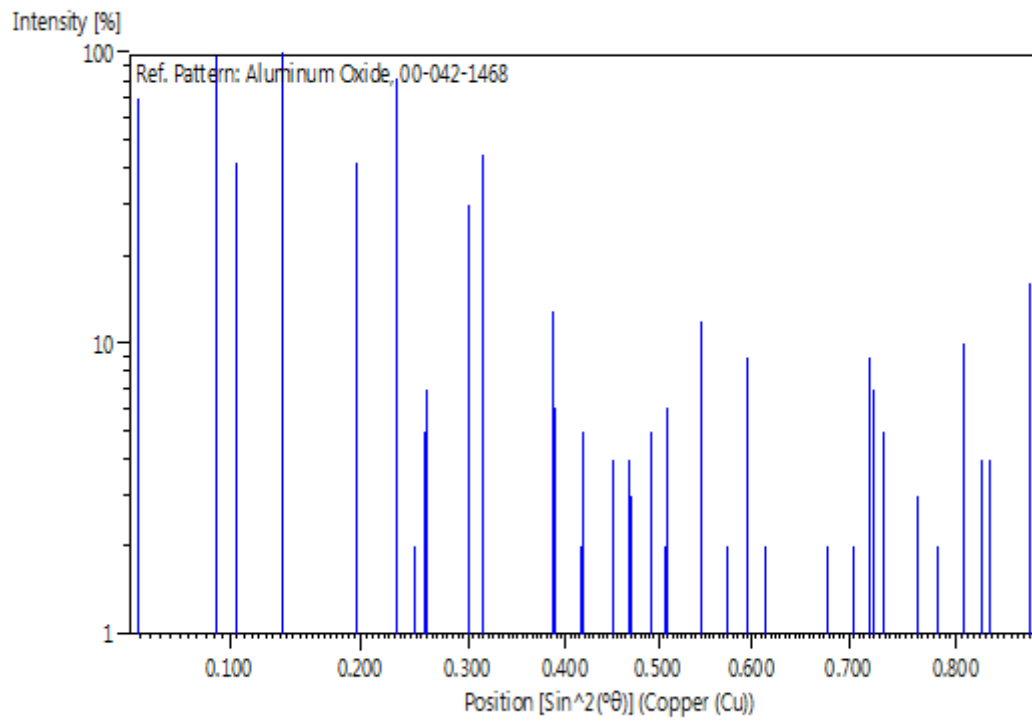
Color:	White
Creation Date:	01-Sep-92
Additional Patterns:	Validated by calculated pattern 00-043-1484
Color:	White
Deleted Or Rejected By:	Deleted by 00-010-0173 which is satisfactory
Melting Point:	2323 K
Sample Source or Locality:	Sample is the National Institute of Standards and Technology corundum standard reference material 674
Unit Cell Data Source:	Powder Diffraction.

References

- Primary reference: Welton-Holzer, J., McCarthy, G., North Dakota State University, Fargo, North Dakota, USA., *ICDD Grant-in-Aid*, (1989)
- Structure: Ishizawa, N., Miyata, T., Minato, I., Marumo, F., Iwai, S., *Acta Crystallogr., Sec. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.*, **26**, 228, (1980)
- Optical data: Winchell, A., Winchell, H., *Microscopic Character of Artificial Inorg. Solid Sub.*, 60, (1964)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	0	1	2	3.48000	25.577	70.0
2	1	0	4	2.55100	35.151	97.0
3	1	1	0	2.37900	37.785	42.0
4	0	0	6	2.16500	41.685	1.0
5	1	1	3	2.08500	43.363	100.0
6	2	0	2	1.96400	46.184	1.0
7	0	2	4	1.73980	52.559	42.0
8	1	1	6	1.60140	57.504	82.0
9	2	1	1	1.54610	59.765	2.0
10	1	2	2	1.51470	61.134	5.0
11	0	1	8	1.51090	61.305	7.0
12	2	1	4	1.40450	66.522	30.0
13	3	0	0	1.37380	68.209	45.0
14	1	2	5	1.33580	70.432	1.0
15	2	0	8	1.27540	74.309	1.0
16	1	0	10	1.23900	76.882	13.0
17	1	1	9	1.23410	77.244	6.0
18	2	1	7	1.19290	80.442	2.0
19	2	2	0	1.18980	80.695	5.0
20	3	0	6	1.15980	83.237	1.0
21	2	2	3	1.14710	84.369	4.0
22	1	3	1	1.13870	85.137	1.0
23	3	1	2	1.12570	86.359	4.0
24	1	2	8	1.12420	86.502	3.0
25	0	2	10	1.09900	89.000	5.0
26	0	0	12	1.08240	90.740	2.0
27	1	3	4	1.07820	91.193	6.0
28	2	2	6	1.04270	95.251	12.0
29	0	4	2	1.01750	98.410	2.0
30	2	1	10	0.99780	101.067	9.0
31	1	1	12	0.98530	102.850	1.0
32	4	0	4	0.98200	103.334	2.0
33	3	2	1	0.94320	109.509	1.0
34	1	2	11	0.94120	109.854	1.0
35	2	3	2	0.93570	110.819	2.0
36	3	1	8	0.93470	110.997	2.0
37	2	2	9	0.91800	114.092	2.0
38	3	2	4	0.90780	116.105	9.0
39	0	1	14	0.90540	116.594	7.0
40	4	1	0	0.89940	117.843	5.0
41	2	3	5	0.88850	120.216	1.0
42	4	1	3	0.88050	122.053	3.0
43	0	4	8	0.87000	124.602	2.0
44	1	3	10	0.85820	127.682	10.0
45	3	0	12	0.85030	129.893	4.0
46	2	0	14	0.84610	131.125	4.0
47	3	2	7	0.84240	132.244	1.0
48	2	1	13	0.84100	132.677	1.0
49	4	1	6	0.83050	136.101	16.0

Stick Pattern

Name and formula

Reference code: 00-029-0009
 Compound name: Aluminum Borate
 Empirical formula: $\text{Al}_{18}\text{B}_4\text{O}_{33}$
 Chemical formula: $\text{Al}_{18}\text{B}_4\text{O}_{33}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 a (Å): 7.7040
 b (Å): 15.0050
 c (Å): 5.6690
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000
 Calculated density (g/cm³): 2.68
 Measured density (g/cm³): 2.94
 Volume of cell (10⁶ pm³): 655.33
 Z: 1.00
 RIR:: -

Status, subfiles and quality

Status: Marked as deleted by ICDD
 Subfiles: Inorganic
 Quality: Indexed (I)

Comments

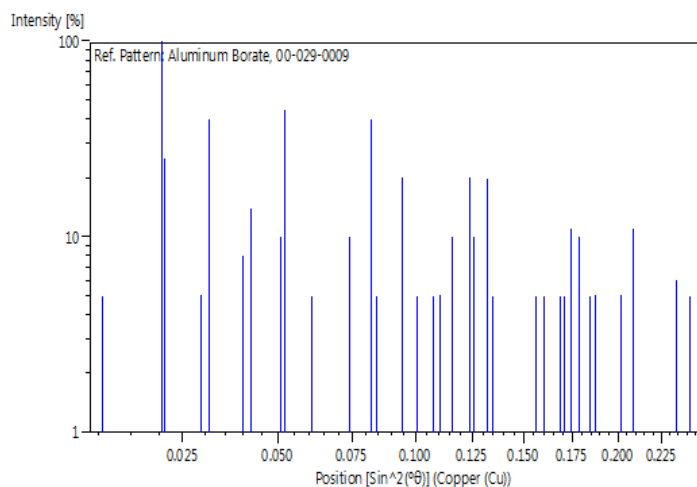
Color: White
 Creation Date: 01-Sep-79
 Color: White
 Deleted Or Rejected By: Deleted by 00-032-0003
 General Comments: 2è-calibraion with "Na Cl" as internal standard
 Melting Point: 1713 K
 Sample Preparation: Synthesized in a sealed Pt-tube by solid-state reaction at 1000 C
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Uhlig et al., Institut fur Kristallographie, Technische Hochschule, Aachen, Germany., *ICDD Grant-in-Aid*, (1976)
 Unit cell: Scholze., *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **284**, 272, (1956)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	0	2	0	7.51000	11.774	5.0
2	1	2	0	5.38000	16.464	100.0
3	0	1	1	5.30000	16.714	25.0
4	0	2	1	4.52000	19.624	5.0
5	1	1	1	4.37000	20.305	40.0
6	2	0	0	3.85000	23.083	8.0
7	0	3	1	3.75000	23.707	14.0
8	2	2	0	3.42000	26.033	10.0
9	1	3	1	3.37000	26.426	45.0
10	2	1	1	3.12000	28.587	5.0
11	0	0	2	2.83500	31.532	10.0
12	2	3	1	2.68700	33.318	40.0
13	0	5	1	2.65300	33.758	5.0
14	1	5	1	2.50900	35.759	20.0
15	2	4	1	2.42900	36.978	5.0
16	1	3	2	2.34800	38.303	5.0
17	3	1	1	2.31200	38.923	5.0
18	0	4	2	2.26100	39.838	10.0
19	2	5	1	2.18500	41.285	20.0
20	1	4	2	2.17000	41.584	10.0
21	3	4	0	2.11900	42.633	20.0
22	2	6	0	2.09800	43.081	5.0
23	2	4	2	1.95000	46.535	5.0
24	4	0	0	1.92590	47.152	5.0
25	0	8	0	1.87550	48.500	5.0
26	4	2	0	1.86540	48.779	5.0
27	3	5	1	1.84520	49.349	11.0
28	4	0	1	1.82340	49.979	10.0
29	3	6	0	1.79130	50.938	5.0
30	0	8	1	1.78050	51.269	5.0
31	4	3	1	1.71300	53.446	5.0
32	0	4	3	1.68760	54.316	11.0
33	4	0	2	1.59310	57.831	6.0
34	1	5	3	1.56550	58.950	5.0

Stick Pattern

Name and formula

Reference code:	01-086-1449
Mineral name:	Baddeleyite, syn
Compound name:	Zirconium Oxide
Empirical formula:	O ₂ Zr
Chemical formula:	ZrO ₂

Crystallographic parameters

Crystal system:	Monoclinic
Space group:	P21/c
Space group number:	14
a (Å):	5.1442
b (Å):	5.2097
c (Å):	5.3112
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	99.2200
Gamma (°):	90.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	140.50
Z:	4.00
RIR:	4.60

Status, subfiles and quality

Status:	Alternate Pattern
Subfiles:	Alloy, metal or intermetallic, Common Phase, Forensic, ICSD Pattern, Inorganic, Mineral, Superconducting Material
Quality:	Star (S)

Comments

ANX:	AX2
ICSD collection code:	82543
Creation Date:	01-Sep-99
Modification Date:	01-Sep-11
Cross-References:	ICSD:82543
ANX:	AX2
Analysis:	O2 Zr1
Formula from original source:	Zr O2
ICSD Collection Code:	82543
Calculated Pattern Original Remarks:	Stable up to 1273 K (2nd ref., Tomaszewski), 1273-2573 K: P42/nmc. For data obtained at other beam line cf. 82544, 18190 for single crystal data. Sample Source or Locality: Specimen from Commission on Powder Diffraction of IUCR. Wyckoff Sequence: e3(P121/C1). Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

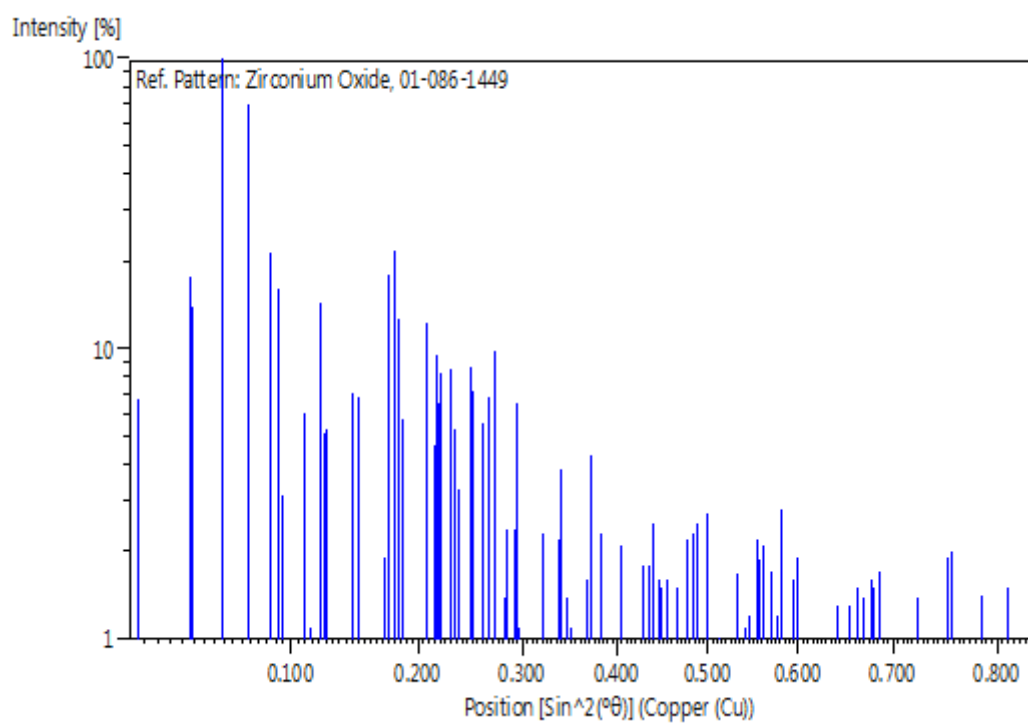
Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*, (1997)
 Structure: Gualtieri, A., Norby, P., Hanson, J., Hriljac, J., *J. Appl. Crystallogr.*, **29**, 707, (1996)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	0	0	5.07776	17.451	6.8
2	0	1	1	3.69538	24.063	17.8
3	1	1	0	3.63627	24.460	13.9
4	-1	1	1	3.16267	28.193	100.0
5	1	1	1	2.83923	31.484	70.1
6	0	0	2	2.62129	34.179	21.2
7	0	2	0	2.60485	34.401	13.3
8	2	0	0	2.53888	35.324	16.3
9	-1	0	2	2.49809	35.920	3.1
10	0	2	1	2.33276	38.563	6.0
11	1	2	0	2.31768	38.824	0.2
12	2	1	0	2.28228	39.451	1.1
13	-1	1	2	2.25252	39.994	0.6
14	-2	1	1	2.21246	40.750	14.5
15	1	0	2	2.19056	41.176	5.1
16	-1	2	1	2.17954	41.394	5.3
17	1	2	1	2.06467	43.812	0.1
18	1	1	2	2.01932	44.849	7.1
19	2	1	1	1.98999	45.547	6.9
20	-2	0	2	1.98999	45.547	6.9
21	-2	1	2	1.85898	48.959	1.9
22	0	2	2	1.84769	49.278	17.9
23	2	2	0	1.81813	50.134	21.7
24	-1	2	2	1.80298	50.585	12.8
25	-2	2	1	1.78224	51.216	5.7
26	3	0	0	1.69316	54.123	12.3
27	2	0	2	1.69316	54.123	12.3
28	1	2	2	1.67653	54.705	0.7
29	2	2	1	1.65982	55.302	4.7
30	0	1	3	1.65680	55.412	9.6
31	-1	1	3	1.65076	55.632	6.5
32	1	3	0	1.64313	55.913	8.2
33	-3	1	1	1.60919	57.199	8.6
34	3	1	0	1.60919	57.199	8.6
35	-1	3	1	1.59165	57.889	5.3
36	-2	2	2	1.58133	58.303	3.3
37	1	3	1	1.54523	59.802	8.7
38	-3	0	2	1.53870	60.082	7.2
39	1	1	3	1.50893	61.393	5.6
40	-2	1	3	1.49535	62.012	6.8
41	3	1	1	1.47699	62.870	9.9
42	-3	1	2	1.47699	62.870	9.9
43	0	2	3	1.45121	64.119	1.4
44	0	3	2	1.44714	64.321	2.4
45	-1	2	3	1.44714	64.321	2.4
46	2	3	0	1.43335	65.015	0.8
47	-1	3	2	1.42589	65.398	2.4
48	2	2	2	1.41961	65.723	6.5
49	3	2	0	1.41961	65.723	6.5
50	-2	3	1	1.41556	65.935	1.1
51	1	3	2	1.36083	68.951	2.3
52	2	3	1	1.35185	69.474	0.1
53	1	2	3	1.34873	69.658	0.9
54	-2	2	3	1.33900	70.238	0.6
55	-3	2	2	1.32483	71.103	2.2
56	3	2	1	1.32483	71.103	2.2
57	-1	0	4	1.32132	71.320	3.9
58	0	0	4	1.31065	71.991	0.9
59	-2	3	2	1.30842	72.133	1.4
60	0	4	0	1.30242	72.518	1.1
61	2	1	3	1.30006	72.671	1.0
62	-3	1	3	1.28563	73.620	0.4
63	4	0	0	1.26944	74.717	1.6
64	0	4	1	1.26400	75.094	4.3

65	1	4	0	1.26158	75.263	0.6
66	-4	1	1	1.24454	76.478	2.3
67	-1	4	1	1.23783	76.968	0.3
68	4	1	0	1.23335	77.300	0.8
69	0	3	3	1.23179	77.416	0.7
70	-1	3	3	1.22931	77.601	0.5
71	-4	0	2	1.22254	78.112	0.9
72	1	0	4	1.22254	78.112	0.9
73	-2	1	4	1.21462	78.720	0.6
74	1	4	1	1.21462	78.720	0.6
75	-3	3	1	1.21209	78.916	2.1
76	3	3	0	1.21209	78.916	2.1
77	2	2	3	1.19336	80.404	0.4
78	-4	1	2	1.18961	80.710	0.2
79	1	1	4	1.18961	80.710	0.2
80	3	2	2	1.18217	81.324	0.5
81	-3	2	3	1.18217	81.324	0.5
82	-1	2	4	1.17838	81.641	1.8
83	0	2	4	1.17079	82.285	0.5
84	1	3	3	1.16725	82.589	1.8
85	0	4	2	1.16725	82.589	1.8
86	-2	3	3	1.16093	83.138	2.5
87	4	1	1	1.16093	83.138	2.5
88	2	4	0	1.15884	83.321	0.8
89	-1	4	2	1.15488	83.671	0.3
90	3	3	1	1.15228	83.903	1.6
91	-3	3	2	1.15228	83.903	1.6
92	-4	2	1	1.14938	84.163	1.5
93	-2	4	1	1.14938	84.163	1.5
94	4	2	0	1.14114	84.912	1.6
95	-3	0	4	1.12741	86.196	1.5
96	1	4	2	1.11950	86.956	0.3
97	2	4	1	1.11448	87.446	2.2
98	-4	2	2	1.10671	88.218	2.3
99	1	2	4	1.10671	88.218	2.3
100	3	1	3	1.10317	88.575	2.5
101	2	0	4	1.09528	89.383	1.0
102	-4	1	3	1.09083	89.846	2.7
103	4	2	1	1.08308	90.667	0.8
104	4	0	2	1.07683	91.342	1.0
105	2	1	4	1.07185	91.888	0.2
106	2	3	3	1.06213	92.978	0.4
107	3	3	2	1.05502	93.794	1.7
108	-3	3	3	1.05502	93.794	1.7
109	-1	3	4	1.05154	94.200	0.1
110	0	3	4	1.04613	94.840	1.1
111	0	4	3	1.04429	95.060	0.9
112	-1	4	3	1.04277	95.242	1.2
113	-1	1	5	1.03973	95.610	0.1
114	-3	2	4	1.03466	96.231	2.2
115	-3	4	1	1.03205	96.555	1.9
116	3	4	0	1.03205	96.555	1.9
117	-4	3	1	1.03121	96.660	1.5
118	0	1	5	1.02790	97.075	2.1
119	-4	2	3	1.02482	97.466	0.3
120	4	3	0	1.02482	97.466	0.3
121	1	5	0	1.02067	97.998	1.7
122	5	0	0	1.01555	98.665	0.9
123	-2	3	4	1.01400	98.869	1.2
124	-2	1	5	1.00953	99.464	2.8
125	-5	1	1	1.00953	99.464	2.8
126	1	4	3	1.00409	100.199	0.5
127	-5	0	2	1.00263	100.399	1.0
128	-4	3	2	0.99931	100.857	1.6
129	1	3	4	0.99931	100.857	1.6
130	4	2	2	0.99515	101.438	1.9
131	3	4	1	0.99515	101.438	1.9
132	-3	4	2	0.99411	101.585	0.7

133	-5	1	2	0.98456	102.958	0.2
134	4	3	1	0.98267	103.235	0.4
135	-1	2	5	0.98267	103.235	0.4
136	-4	1	4	0.97804	103.923	0.4
137	1	1	5	0.97804	103.923	0.4
138	0	2	5	0.97267	104.734	0.1
139	0	5	2	0.96825	105.416	0.7
140	2	5	0	0.96419	106.052	0.6
141	3	0	4	0.96419	106.052	0.6
142	-1	5	2	0.96164	106.456	1.3
143	-2	5	1	0.95846	106.967	0.1
144	-2	2	5	0.95643	107.296	0.3
145	-5	2	1	0.95643	107.296	0.3
146	5	1	1	0.95215	107.998	1.3
147	3	1	4	0.94809	108.677	0.4
148	5	2	0	0.94641	108.961	1.5
149	3	3	3	0.94641	108.961	1.5
150	4	1	3	0.94092	109.902	1.4
151	1	5	2	0.94092	109.902	1.4
152	-4	3	3	0.93858	110.311	1.0
153	2	5	1	0.93858	110.311	1.0
154	-5	2	2	0.93571	110.818	1.6
155	2	4	3	0.93481	110.978	1.5
156	-4	2	4	0.92940	111.954	1.7
157	-3	4	3	0.92940	111.954	1.7
158	-1	4	4	0.92756	112.291	0.7
159	2	3	4	0.92641	112.504	0.3
160	-2	5	2	0.92307	113.128	1.0
161	4	3	2	0.91517	114.641	0.1
162	-4	4	1	0.91352	114.964	0.5
163	4	4	0	0.90907	115.850	0.4
164	5	2	1	0.90776	116.114	0.1
165	2	1	5	0.90463	116.752	1.4
166	3	2	4	0.90463	116.752	1.4
167	-3	2	5	0.90333	117.019	0.5
168	5	0	2	0.89965	117.789	0.2
169	0	3	5	0.89759	118.227	1.0
170	4	2	3	0.89759	118.227	1.0
171	0	5	3	0.89494	118.797	0.1
172	-1	5	3	0.89398	119.005	0.1
173	1	4	4	0.89137	119.578	0.3
174	-4	4	2	0.89137	119.578	0.3
175	-5	2	3	0.88950	119.991	0.6
176	3	5	0	0.88729	120.487	1.9
177	-3	5	1	0.88729	120.487	1.9
178	-5	3	1	0.88528	120.945	2.0
179	-2	3	5	0.88528	120.945	2.0
180	4	4	1	0.87888	122.434	0.9
181	5	3	0	0.87665	122.968	0.6
182	0	0	6	0.87337	123.765	0.7
183	-5	0	4	0.87337	123.765	0.7
184	0	6	0	0.86834	125.021	1.4
185	-4	1	5	0.86834	125.021	1.4
186	2	2	5	0.86663	125.458	0.1
187	-2	5	3	0.86663	125.458	0.1
188	-4	3	4	0.86332	126.314	0.8
189	-3	5	2	0.86332	126.314	0.8
190	0	1	6	0.86173	126.735	0.3
191	-5	1	4	0.86173	126.735	0.3
192	-2	1	6	0.85833	127.647	0.2
193	0	6	1	0.85661	128.116	1.5
194	3	4	3	0.85300	129.124	0.2
195	-3	4	4	0.85241	129.290	0.3
196	5	2	2	0.85036	129.875	0.1
197	-1	6	1	0.84833	130.466	0.3
198	-6	1	1	0.84599	131.158	2.1
199	5	3	1	0.84599	131.158	2.1

Stick Pattern

Name and formula

Reference code:	01-087-0652
Mineral name:	Periclase
Compound name:	Magnesium Oxide
Empirical formula:	MgO
Chemical formula:	MgO

Crystallographic parameters

Crystal system:	Cubic
Space group:	Fm-3m
Space group number:	225
a (Å):	4.2110
b (Å):	4.2110
c (Å):	4.2110
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	90.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	74.67
Z:	4.00
RIR:	3.04

Status, subfiles and quality

Status:	Alternate Pattern
Subfiles:	Pharmaceutical, Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Superconducting Material, ICSD Pattern
Quality:	Indexed (I)

Comments

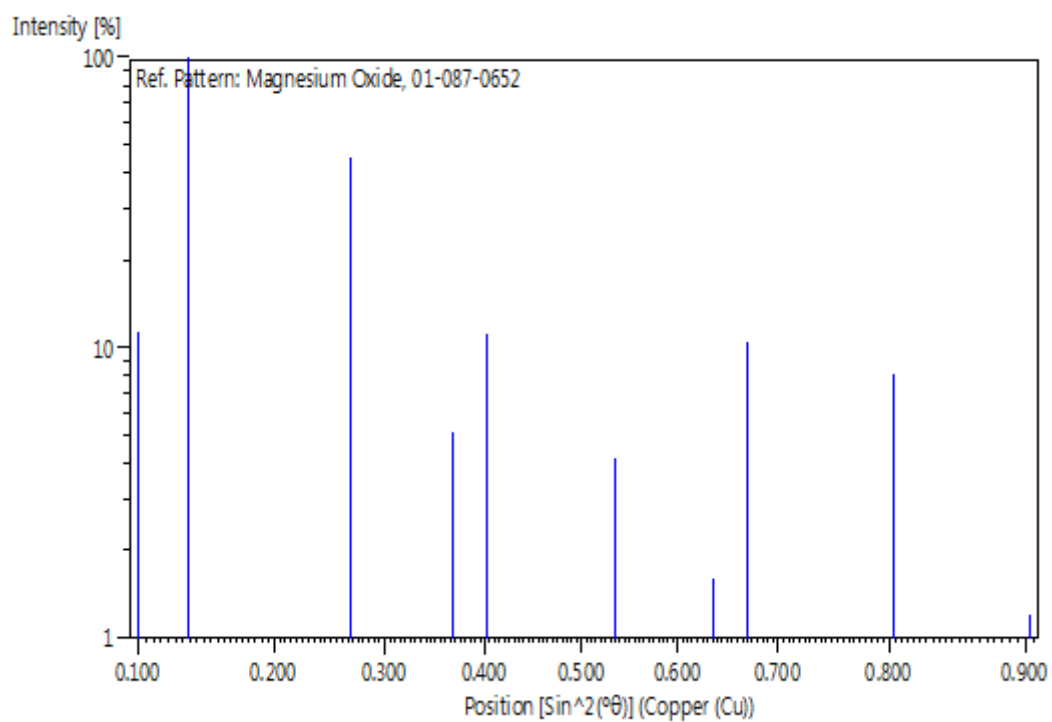
ANX:	AX
ICSD collection code:	64929
Creation Date:	01-Sep-00
Modification Date:	01-Sep-11
Cross-References:	ICSD:64929
ANX:	AX
Analysis:	Mg1 O1
Formula from original source:	Mg O
ICSD Collection Code:	64929
Minor Warning:	No e.s.d reported/abstracted on the cell dimension. No R factors reported/abstracted
Wyckoff Sequence:	b a(FM3-M)
Unit Cell Data Source:	Single Crystal.

References

Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*, (1997)
 Structure: Wyckoff, R.W.G., *Z. Kristallogr., Kristallgeom., Kristallphys., Kristallchem.*, **62**, 529, (1925)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	1	1	2.43122	36.943	11.3
2	2	0	0	2.10550	42.920	100.0
3	2	2	0	1.48881	62.315	45.4
4	3	1	1	1.26966	74.702	5.1
5	2	2	2	1.21561	78.643	11.3
6	4	0	0	1.05275	94.058	4.2
7	3	3	1	0.96607	105.756	1.6
8	4	2	0	0.94161	109.784	10.5
9	4	2	2	0.85957	127.312	8.1
10	5	1	1	0.81041	143.797	1.2

Stick Pattern

Name and formula

Reference code: 01-071-6332

Compound name: Magnesium Aluminum Oxide
Common name: spinel HP, magnesium dialuminum oxide

Empirical formula: Al_2MgO_4
Chemical formula: MgAl_2O_4

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic
Space group: Fd-3m
Space group number: 227

a (Å): 8.0776
b (Å): 8.0776
c (Å): 8.0776
Alpha (°): 90.0000
Beta (°): 90.0000
Gamma (°): 90.0000

Volume of cell (10^6 pm^3): 527.04
Z: 8.00

RIR: 1.71

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient pressure, Alternate Pattern
Subfiles: Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, ICSD Pattern
Quality: Star (S)

Comments

ANX: AB2X4
ICSD collection code: 77584
Creation Date: 01-Sep-05
Modification Date: 01-Sep-11
Cross-References: ICSD:77584
ANX: AB2X4
Analysis: Al2 Mg1 O4
Formula from original source: Mg Al2 O4
ICSD Collection Code: 77584
Pressure of Datacollection: 1000 MPa
Sample Source or Locality: Specimen from SE Asia
Wyckoff Sequence: e d a(FD3-MZ)
Unit Cell Data Source: Single Crystal.

References

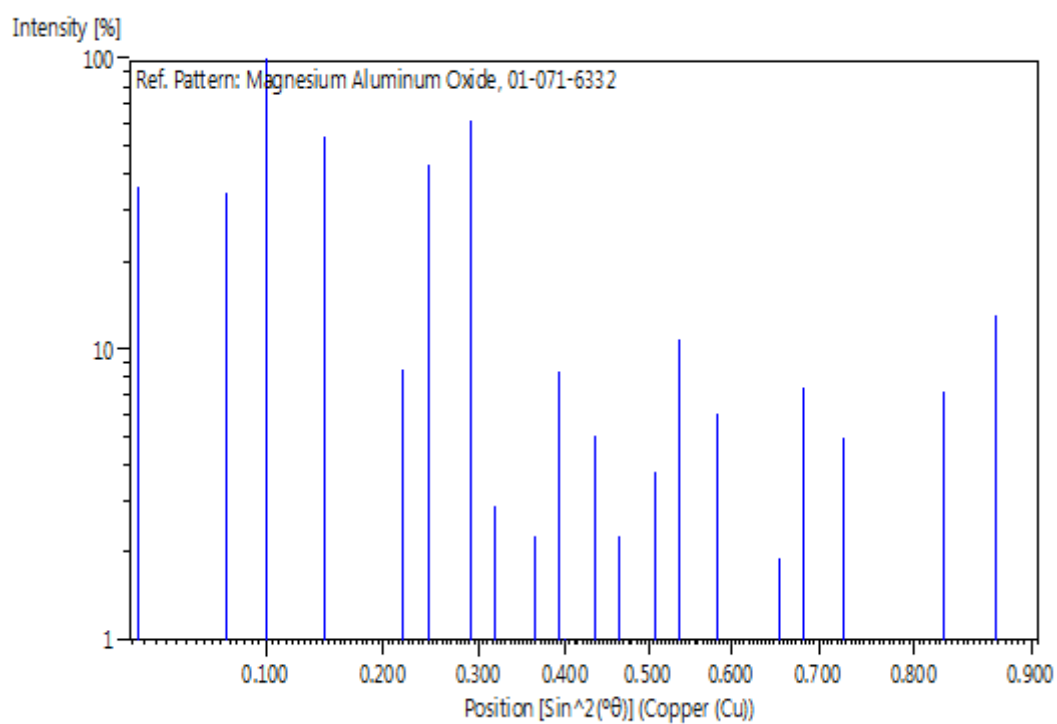
Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*
Structure: Finger, L.W., Hazen, R.M., Hofmeister, A.M., *Phys. Chem. Miner.*, **13**, 215, (1986)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	1	1	4.66360	19.015	36.2
2	2	2	0	2.85586	31.296	34.5
3	3	1	1	2.43549	36.876	100.0
4	2	2	2	2.33180	38.579	0.8
5	4	0	0	2.01940	44.847	53.5

6	3	3	1	1.85313	49.124	0.2
7	4	2	2	1.64883	55.703	8.5
8	5	1	1	1.55453	59.408	43.3
9	4	4	0	1.42793	65.293	61.7
10	5	3	1	1.36536	68.690	2.9
11	4	4	2	1.34627	69.804	0.2
12	6	2	0	1.27718	74.188	2.3
13	5	3	3	1.23182	77.413	8.4
14	6	2	2	1.21774	78.479	1.0
15	4	4	4	1.16590	82.705	5.0
16	7	1	1	1.13109	85.847	2.3
17	6	4	2	1.07941	91.062	3.8
18	7	3	1	1.05161	94.192	10.8
19	8	0	0	1.00970	99.441	6.0
20	7	3	3	0.98684	102.626	0.2
21	6	4	4	0.97955	103.697	0.1
22	8	2	2	0.95195	108.031	1.9
23	7	5	1	0.93272	111.352	7.4
24	6	6	2	0.92656	112.475	0.8
25	8	4	0	0.90310	117.067	5.0
26	9	1	1	0.88663	120.637	1.0
27	8	4	2	0.88134	121.856	0.2
28	6	6	4	0.86107	126.909	0.3
29	9	3	1	0.84676	130.927	7.2
30	8	4	4	0.82442	138.249	13.1
31	9	3	3	0.81183	143.188	0.5

Stick Pattern



Name and formula

Reference code:	01-089-3072
Mineral name:	Corundum, syn
Compound name:	Aluminum Oxide
Empirical formula:	Al ₂ O ₃
Chemical formula:	Al ₂ O ₃

Crystallographic parameters

Crystal system:	Rhombohedral
Space group:	R-3c
Space group number:	167
a (Å):	4.7600
b (Å):	4.7600
c (Å):	12.9900
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	120.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	254.89
Z:	6.00
RIR:	2.63

Status, subfiles and quality

Status:	Alternate Pattern
Subfiles:	Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Common Phase, Forensic, ICSD Pattern, Inorganic, Mineral, Pharmaceutical, Superconducting Material
Quality:	Blank (B)

Comments

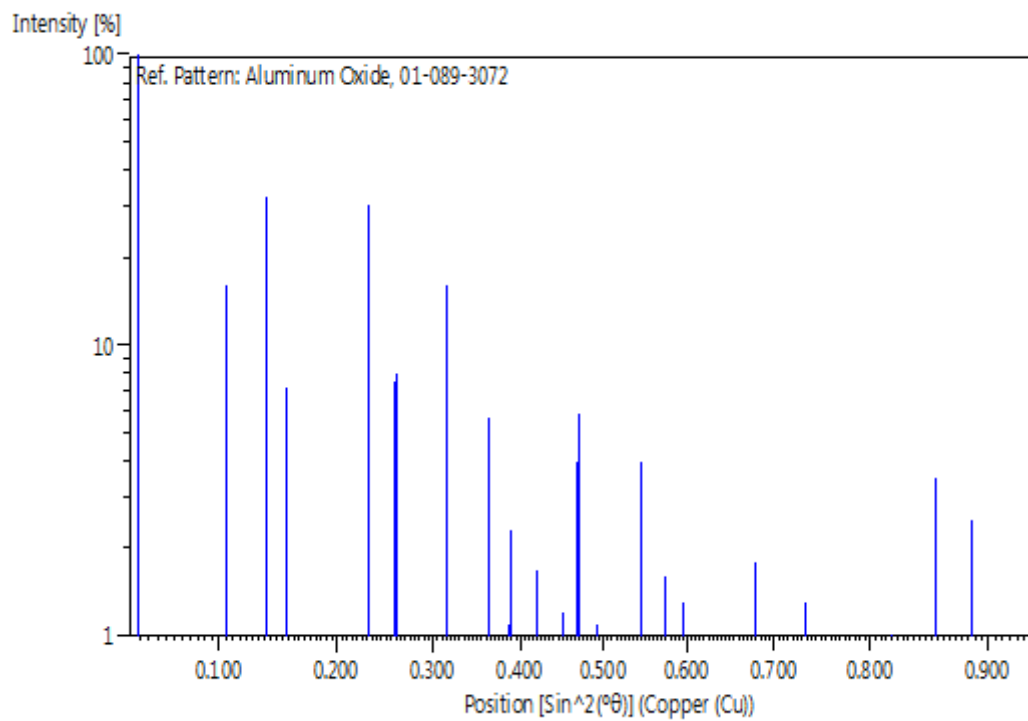
ANX:	A2X3
ICSD collection code:	43732
Creation Date:	01-Sep-02
Modification Date:	01-Sep-11
Cross-References:	ICSD:43732
ANX:	A2X3
Analysis:	Al2 O3
Formula from original source:	Al2 O3
ICSD Collection Code:	43732
Calculated Pattern Original Remarks:	Cell from 2nd reference: 4.7591(4), 12.9894(30). Minor Warning: No e.s.d reported/abstracted on the cell dimension. Significant Warning: 12%<R factor (for single crystal). Wyckoff Sequence: e c(R3-CH). Unit Cell Data Source: Single Crystal.

References

Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*
 Structure: Graham, J., *J. Phys. Chem. Solids*, **17**, 18, (1960)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	0	1	2	3.48045	25.573	100.0
2	1	0	4	2.55099	35.151	0.1
3	1	1	0	2.38000	37.768	16.2
4	0	0	6	2.16500	41.685	0.1
5	1	1	3	2.08570	43.348	32.6
6	2	0	2	1.96459	46.169	7.2
7	0	2	4	1.74023	52.545	0.7
8	1	1	6	1.60151	57.499	30.6
9	2	1	1	1.54699	59.727	1.0
10	1	2	2	1.51509	61.117	7.5
11	0	1	8	1.51077	61.311	8.0
12	2	1	4	1.40476	66.508	0.2
13	3	0	0	1.37409	68.193	16.2
14	1	2	5	1.33620	70.407	0.4
15	2	0	8	1.27550	74.302	5.6
16	1	0	10	1.23894	76.887	1.1
17	1	1	9	1.23413	77.242	2.3
18	2	1	7	1.19326	80.413	0.3
19	2	2	0	1.19000	80.678	1.7
20	0	3	6	1.16015	83.206	0.2
21	2	2	3	1.14746	84.336	1.2
22	1	3	1	1.13891	85.118	0.1
23	3	1	2	1.12600	86.330	4.0
24	1	2	8	1.12423	86.499	5.8
25	0	2	10	1.09896	89.004	1.1
26	0	0	12	1.08250	90.729	0.5
27	1	3	4	1.07843	91.168	0.1
28	3	1	5	1.04646	94.800	0.1
29	2	2	6	1.04285	95.233	4.0
30	0	4	2	1.01784	98.365	1.6
31	2	1	10	0.99773	101.077	1.3
32	1	1	12	0.98536	102.840	0.1
33	4	0	4	0.98229	103.290	0.1
34	1	3	7	0.97340	104.623	0.1
35	3	2	1	0.94322	109.506	0.1
36	1	2	11	0.94113	109.866	0.1
37	2	3	2	0.93585	110.793	0.7
38	3	1	8	0.93483	110.975	1.8
39	2	2	9	0.91817	114.059	0.5
40	3	2	4	0.90800	116.065	0.2
41	0	1	14	0.90521	116.633	0.9
42	4	1	0	0.89956	117.810	1.3
43	2	3	5	0.88867	120.178	0.1
44	4	1	3	0.88075	121.994	0.7
45	0	4	8	0.87011	124.574	0.5
46	1	3	10	0.85824	127.672	0.4
47	0	3	12	0.85033	129.884	1.0
48	2	0	14	0.84608	131.130	0.5
49	3	2	7	0.84261	132.181	0.1
50	2	1	13	0.84112	132.640	0.1
51	1	4	6	0.83070	136.031	3.5
52	3	1	11	0.82142	139.361	0.1
53	2	3	8	0.81721	140.984	2.5
54	1	1	15	0.81380	142.363	0.5
55	4	0	10	0.80735	145.149	0.1
56	2	2	12	0.80076	148.293	0.1
57	0	5	4	0.79911	149.138	0.1

Stick Pattern

Name and formula

Reference code:	01-086-2270
Mineral name:	Anhydrite
ICSD name:	Calcium Sulfate
Empirical formula:	CaO ₄ S
Chemical formula:	Ca (SO ₄)

Crystallographic parameters

Crystal system:	Orthorhombic
Space group:	Amma
Space group number:	63

a (Å):	6.9930
b (Å):	6.9950
c (Å):	6.2450
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	90.0000

Calculated density (g/cm ³):	2.96
Measured density (g/cm ³):	2.96
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	305.48
Z:	4.00

RIR:	1.47
------	------

Subfiles and Quality

Subfiles:	Inorganic Mineral Pharmaceutical ICSD Pattern
Quality:	Calculated (C)

Comments

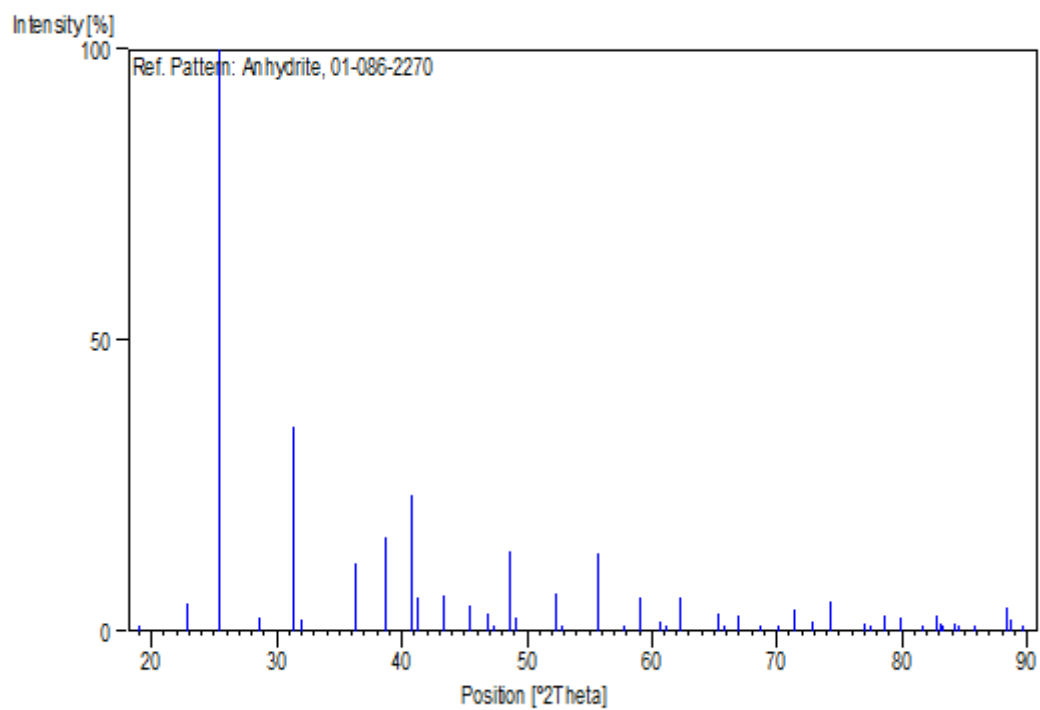
Sample source:	Specimen from Leopoldshall, Stassfurt, Germany.
Additional pattern:	See PDF 72-916.
ICSD collection code:	040043
Test from ICSD:	Calc. density unusual but tolerable.

References

Primary reference:	<i>Calculated from ICSD using POWD-12++</i> , (1997)
Structure:	Hawthorne, F.C., Ferguson, R.B., <i>Can. Mineral.</i> , 13 , 289, (1975)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	4.65856	19.035	0.2
2	1	1	1	3.87704	22.920	4.7
3	0	2	0	3.49750	25.447	100.0
4	0	0	2	3.12250	28.564	2.4
5	1	0	2	2.85118	31.349	35.0
6	2	1	1	2.79646	31.978	1.9
7	2	2	0	2.47275	36.301	11.6
8	0	2	2	2.32928	38.623	16.1
9	1	2	2	2.20991	40.799	23.4
10	0	3	1	2.18438	41.298	5.7
11	1	3	1	2.08460	43.372	6.2
12	0	1	3	1.99519	45.421	4.5
13	2	2	2	1.93852	46.827	3.2
14	1	1	3	1.91863	47.342	0.4
15	3	0	2	1.86792	48.709	13.9
16	2	3	1	1.85257	49.140	2.4
17	0	4	0	1.74875	52.270	6.5
18	2	1	3	1.73291	52.784	0.2
19	3	2	2	1.64766	55.746	13.4
20	3	3	1	1.59390	57.800	1.0
21	2	4	0	1.56404	59.011	5.9
22	0	0	4	1.56125	59.127	3.3
23	0	4	2	1.52576	60.645	1.7
24	1	0	4	1.52374	60.733	1.0
25	1	3	3	1.51593	61.080	0.7
26	1	4	2	1.49069	62.228	5.8
27	0	2	4	1.42566	65.410	3.2
28	2	3	3	1.41919	65.745	0.5
29	1	2	4	1.39692	66.930	2.6
30	0	5	1	1.36493	68.715	0.2
31	1	5	1	1.33953	70.207	0.1
32	2	2	4	1.32014	71.394	3.9
33	3	0	4	1.29717	72.859	1.7
34	3	4	2	1.27660	74.228	5.2
35	4	4	0	1.23638	77.075	1.4
36	0	1	5	1.22955	77.583	0.1
37	3	2	4	1.21622	78.596	2.8
38	5	2	2	1.19905	79.946	2.2
39	3	5	1	1.17801	81.672	0.1
40	0	6	0	1.16583	82.711	2.6
41	0	4	4	1.16464	82.814	2.2
42	0	5	3	1.16114	83.119	1.2
43	2	1	5	1.15993	83.225	0.4
44	4	4	2	1.14882	84.214	1.2
45	1	5	3	1.14525	84.537	0.7
46	6	1	1	1.13065	85.889	0.1
47	2	6	0	1.10572	88.318	3.8
48	2	4	4	1.10496	88.394	4.0
49	2	5	3	1.10197	88.697	2.1
50	6	0	2	1.09192	89.733	0.4

Stick Pattern

Name and formula

Reference code: 01-083-2465

Mineral name: Quartz low, syn
ICSD name: Silicon Oxide

Empirical formula: O₂Si
Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Hexagonal
Space group: P3121
Space group number: 152

a (Å): 4.9148
b (Å): 4.9148
c (Å): 5.4062
Alpha (°): 90.0000
Beta (°): 90.0000
Gamma (°): 120.0000

Calculated density (g/cm³): 2.65
Measured density (g/cm³): 2.66
Volume of cell (10⁶ pm³): 113.09
Z: 3.00

RIR: 3.05

Subfiles and Quality

Subfiles: Inorganic
Mineral
Alloy, metal or intermetallic
Pharmaceutical
ICSD Pattern
Quality: Calculated (C)

Comments

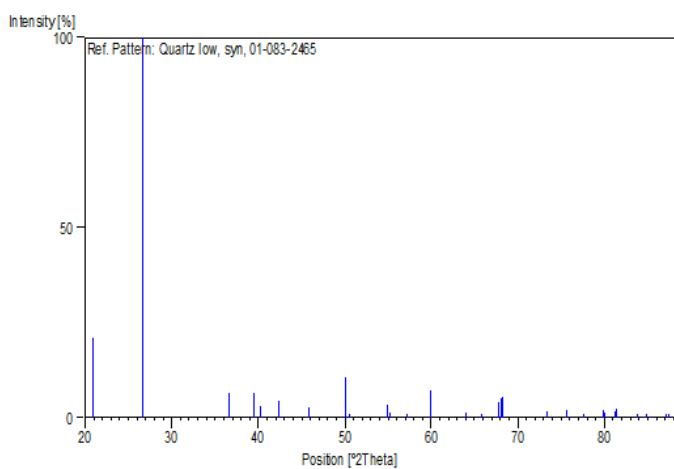
Additional pattern: See PDF 46-1045 and 33-1161.
ICSD collection code: 200721
Test from ICSD: At least one TF implausible.
Calc. density unusual but tolerable.
At least one TF missing.

References

Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*
Structure: Jorgensen, J.D., *J. Appl. Phys.*, **49**, 5473, (1978)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	0	0	4.25634	20.853	21.0
2	1	0	1	3.34425	26.634	100.0
3	1	1	0	2.45740	36.536	6.5
4	0	1	2	2.28183	39.459	6.6
5	1	1	1	2.23713	40.281	2.9
6	2	0	0	2.12817	42.441	4.5
7	0	2	1	1.98026	45.783	2.6
8	1	1	2	1.81832	50.128	10.8
9	0	0	3	1.80207	50.612	0.3
10	2	0	2	1.67212	54.861	3.3
11	1	0	3	1.65946	55.315	1.3
12	2	1	0	1.60875	57.217	0.2
13	2	1	1	1.54192	59.943	7.1
14	1	1	3	1.45320	64.021	1.4
15	3	0	0	1.41878	65.767	0.3
16	2	1	2	1.38244	67.725	4.1
17	0	2	3	1.37526	68.127	5.2
18	3	0	1	1.37231	68.294	5.4
19	0	1	4	1.28817	73.451	1.5
20	0	3	2	1.25625	75.639	1.9
21	2	2	0	1.22870	77.647	1.0
22	1	2	3	1.20010	79.862	2.1
23	2	2	1	1.19814	80.019	1.2
24	1	1	4	1.18425	81.152	1.7
25	3	1	0	1.18050	81.464	2.3
26	3	1	1	1.15332	83.810	1.1
27	0	2	4	1.14092	84.933	0.2
28	2	2	2	1.11856	87.047	0.1
29	0	3	3	1.11475	87.420	0.2

Stick Pattern

Name and formula

Reference code: 01-081-1849
 ICSD name: Calcium Sulfate Hydrate
 Empirical formula: CaHO_4S
 Chemical formula: $\text{Ca}(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Monoclinic
 Space group: I2
 Space group number: 5

a (Å): 12.0275
 b (Å): 6.9312
 c (Å): 12.6919
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.1800
 Gamma (°): 90.0000

Calculated density (g/cm³): 2.73
 Volume of cell (10⁶ pm³): 1058.06
 Z: 12.00

RIR: 1.09

Subfiles and Quality

Subfiles: Inorganic ICSD Pattern
 Quality: Hypothetical (H)

Comments

General comments: TF are of mixed type.
 TF are converted prior to pattern calculation.
 ICSD collection code: 073263
 Test from ICSD: No R value given.
 At least one TF missing.

References

Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*
 Structure: Abriel, W., Nesper, R., *Z. Kristallogr.*, **205**, 99, (1993)

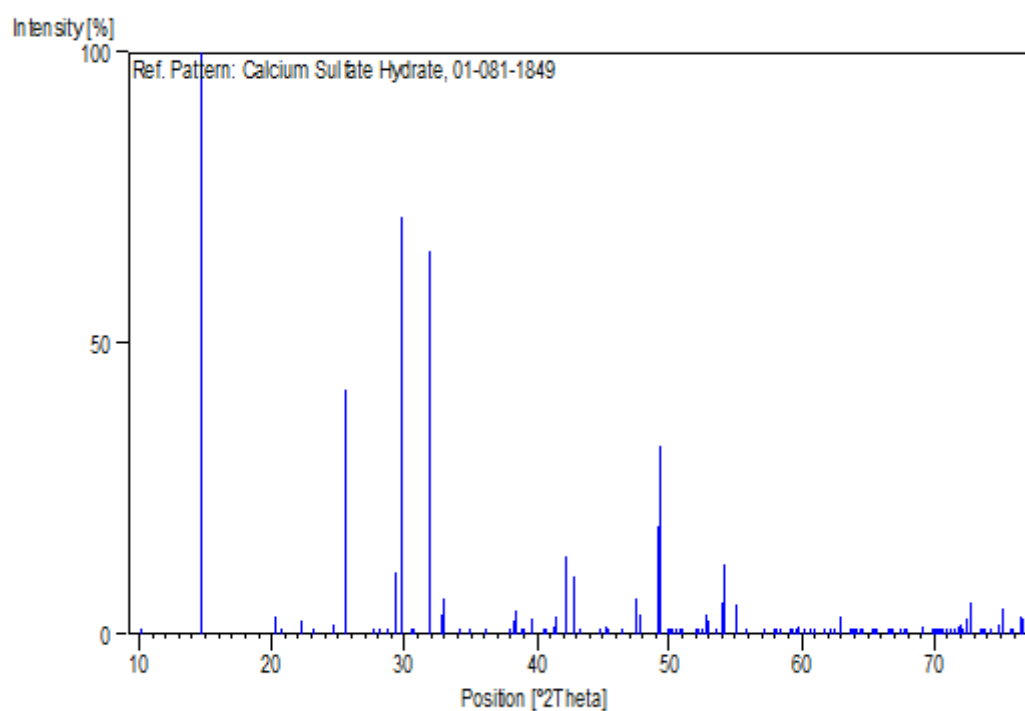
Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	-1	0	1	8.74384	10.108	0.8
2	2	0	0	6.00537	14.739	100.0
3	-1	1	2	4.36528	20.327	2.9
4	-2	1	1	4.27347	20.769	1.1
5	-1	0	3	3.98700	22.280	2.4
6	-3	0	1	3.82640	23.227	0.6
7	0	1	3	3.61109	24.633	1.7
8	3	1	0	3.47041	25.649	42.1
9	-1	2	1	3.22040	27.678	0.8
10	0	0	4	3.17296	28.100	0.1
11	2	1	3	3.09218	28.850	1.1
12	0	2	2	3.04136	29.343	10.5
13	4	0	0	3.00269	29.729	71.8
14	-3	0	3	2.91461	30.649	0.6
15	3	0	3	2.90549	30.748	0.5
16	1	1	4	2.80363	31.894	66.0
17	-4	0	2	2.72057	32.895	3.3
18	4	0	2	2.71254	32.995	6.2
19	-1	2	3	2.61781	34.226	0.4
20	-3	2	1	2.56657	34.931	0.3
21	-1	0	5	2.48208	36.160	0.1
22	-5	0	1	2.36477	38.021	0.2
23	-3	1	4	2.34491	38.355	2.3
24	0	2	4	2.34025	38.435	4.0
25	-4	1	3	2.31374	38.893	0.1
26	4	1	3	2.30764	39.000	0.1
27	4	2	0	2.26892	39.693	2.7
28	3	2	3	2.22652	40.482	0.2
29	-2	1	5	2.21809	40.642	0.4
30	2	1	5	2.21361	40.728	0.3
31	-4	0	4	2.18596	41.267	1.2
32	2	2	4	2.17923	41.400	2.9
33	-5	1	2	2.14149	42.164	6.5
34	4	2	2	2.13606	42.276	13.4
35	0	0	6	2.11531	42.711	9.9
36	5	0	3	2.08828	43.292	0.1
37	-1	2	5	2.01961	44.842	0.1
38	6	0	0	2.00179	45.263	1.4
39	-2	0	6	1.99614	45.399	1.0
40	-5	2	1	1.95182	46.489	0.2
41	-3	3	2	1.90992	47.571	6.1
42	-6	1	1	1.90472	47.709	3.5
43	-5	1	4	1.84889	49.244	18.6
44	-1	3	4	1.84612	49.323	32.5
45	-3	2	5	1.82556	49.916	0.4
46	3	2	5	1.82182	50.025	0.3
47	-4	3	1	1.81275	50.293	0.2
48	-3	1	6	1.80841	50.422	0.2
49	0	2	6	1.80555	50.508	0.3
50	-1	0	7	1.79369	50.865	0.1
51	5	2	3	1.78865	51.019	0.1
52	-6	1	3	1.75464	52.081	0.1
53	6	1	3	1.75065	52.209	0.1
54	5	0	5	1.74329	52.446	0.2
55	6	2	0	1.73521	52.709	3.5

56	0	4	0	1.73280	52.788	3.1
57	2	2	6	1.72801	52.946	2.5
58	0	3	5	1.70862	53.594	0.3
59	-6	0	4	1.69711	53.987	5.4
60	6	0	4	1.69182	54.170	12.1
61	5	3	0	1.66630	55.069	5.2
62	-2	3	5	1.64449	55.863	0.1
63	7	1	2	1.61089	57.134	1.0
64	-1	2	7	1.59181	57.883	0.1
65	-1	4	3	1.58969	57.967	0.1
66	0	0	8	1.58648	58.096	0.1
67	-3	4	1	1.57800	58.438	0.1
68	-5	2	5	1.56126	59.126	0.1
69	5	2	5	1.55736	59.289	0.1
70	-5	1	6	1.55064	59.572	0.6
71	1	3	6	1.54675	59.737	1.4
72	-1	1	8	1.53445	60.265	1.1
73	-6	2	4	1.52417	60.714	0.4
74	0	4	4	1.52068	60.869	1.1
75	-4	1	7	1.51714	61.026	0.5
76	8	0	0	1.50343	61.643	0.4
77	4	4	0	1.50134	61.738	0.6
78	-3	2	7	1.49270	62.135	0.1
79	-4	3	5	1.48689	62.405	0.2
80	4	3	5	1.48419	62.531	0.1
81	-2	4	4	1.47491	62.969	2.9
82	-4	4	2	1.46153	63.613	0.6
83	-6	0	6	1.45731	63.819	0.5
84	3	3	6	1.45282	64.039	0.5
85	-5	0	7	1.45008	64.175	0.3
86	7	2	3	1.44435	64.460	0.6
87	0	2	8	1.44252	64.552	1.0
88	-6	3	3	1.42635	65.374	0.1
89	6	3	3	1.42449	65.470	0.1
90	-1	4	5	1.42141	65.630	0.1
91	-2	2	8	1.40363	66.568	0.2
92	2	2	8	1.40182	66.665	0.3
93	-5	4	1	1.39716	66.917	0.1
94	2	3	7	1.38663	67.493	0.1
95	0	1	9	1.38189	67.756	0.1
96	7	3	0	1.37873	67.932	0.1
97	-4	4	4	1.35791	69.120	1.4
98	-1	5	2	1.34590	69.826	0.4
99	-6	2	6	1.34337	69.977	0.3
100	0	4	6	1.34046	70.151	0.2
101	-5	2	7	1.33770	70.317	0.1
102	5	2	7	1.33427	70.524	0.1
103	-3	0	9	1.33162	70.686	0.1
104	3	0	9	1.32900	70.846	0.1
105	-6	1	7	1.32205	71.275	0.1
106	6	1	7	1.31808	71.523	0.1
107	9	1	0	1.31221	71.892	1.2
108	-5	3	6	1.31013	72.024	1.7
109	7	1	6	1.30757	72.187	1.0
110	-5	1	8	1.30266	72.503	2.6
111	1	3	8	1.29981	72.687	5.3
112	4	3	7	1.28747	73.497	0.2
113	2	5	3	1.28582	73.607	0.3

114	6	4	2	1.28281	73.808	0.6
115	-9	0	3	1.27547	74.304	0.1
116	-8	2	4	1.26624	74.939	1.8
117	7	3	4	1.26311	75.156	4.3
118	4	1	9	1.25417	75.786	0.1
119	-4	5	1	1.25259	75.899	0.1
120	-3	3	8	1.24430	76.495	3.2
121	6	0	8	1.24212	76.654	2.7

Stick Pattern



Name and formula

Reference code: 01-080-0787
 ICSD name: Calcium Sulfate
 Empirical formula: CaO_4S
 Chemical formula: $\text{Ca}(\text{SO}_4)$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: Bmmb
 Space group number: 63

a (Å): 6.9920
 b (Å): 6.9990
 c (Å): 6.2400
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000

Calculated density (g/cm³): 2.96
 Volume of cell (10⁶ pm³): 305.37
 Z: 4.00

RIR: 1.75

Status, subfiles and quality

Status: Marked as deleted by ICDD
 Subfiles: Inorganic
 Corrosion
 Pharmaceutical
 ICSD Pattern
 Quality: Calculated (C)

Comments

ICSD collection code: 068592
 Test from ICSD: No R value given.
 At least one TF missing.

References

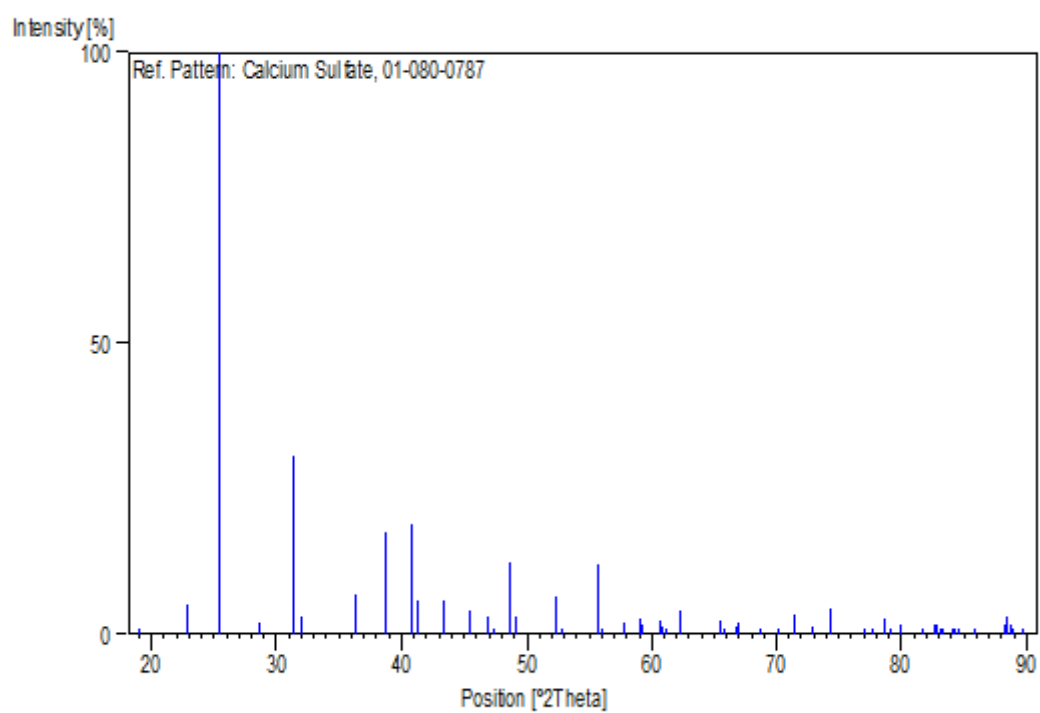
Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++, (1997)*
 Structure: Hartman, P., *Eur. J. Mineral.*, **1**, 721, (1989)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	0	1	4.65560	19.048	0.1
2	1	1	1	3.87635	22.924	5.0
3	0	2	0	3.49950	25.432	100.0
4	0	0	2	3.12000	28.587	2.1
5	0	1	2	2.84968	31.366	30.8
6	1	2	1	2.79735	31.968	3.2
7	2	2	0	2.47328	36.293	7.0
8	0	2	2	2.32780	38.648	17.4
9	2	1	2	2.20883	40.820	18.8
10	3	0	1	2.18334	41.318	5.9
11	1	3	1	2.08577	43.346	5.8
12	1	0	3	1.99365	45.458	4.2
13	2	2	2	1.93817	46.836	2.9
14	1	1	3	1.91738	47.375	0.3
15	0	3	2	1.86841	48.696	12.5
16	3	2	1	1.85239	49.145	2.9
17	0	4	0	1.74800	52.294	6.6
18	1	2	3	1.73227	52.805	0.3
19	2	3	2	1.64784	55.739	11.9
20	1	4	1	1.63789	56.108	0.5
21	3	3	1	1.59414	57.790	2.1
22	2	4	0	1.56377	59.022	2.6
23	0	0	4	1.56000	59.179	1.6
24	0	4	2	1.52497	60.679	2.4
25	0	1	4	1.52264	60.782	1.4
26	1	3	3	1.51507	61.118	0.9
27	4	1	2	1.49002	62.259	4.0
28	0	2	4	1.42460	65.464	2.2
29	3	2	3	1.41863	65.775	0.9
30	2	4	2	1.39867	66.835	1.3
31	2	1	4	1.39598	66.981	1.9
32	3	4	1	1.36539	68.688	0.6
33	1	5	1	1.34052	70.147	0.1
34	2	2	4	1.31946	71.436	3.5
35	0	3	4	1.29680	72.883	1.2
36	0	5	2	1.27647	74.236	4.4
37	4	4	0	1.23664	77.056	0.7
38	1	0	5	1.22858	77.656	0.1
39	2	3	4	1.21585	78.625	2.7
40	1	1	5	1.21008	79.073	0.2
41	2	5	2	1.19961	79.901	1.5
42	3	5	1	1.17787	81.684	0.3
43	0	6	0	1.16650	82.653	1.7
44	6	0	0	1.16533	82.755	1.8
45	0	4	4	1.16390	82.879	1.6
46	3	4	3	1.16051	83.175	0.9
47	1	2	5	1.15922	83.288	0.4
48	4	4	2	1.14963	84.141	0.3
49	4	1	4	1.14813	84.276	0.7
50	1	5	3	1.14561	84.504	0.4
51	1	6	1	1.13152	85.807	0.1
52	2	6	0	1.10653	88.236	1.6

53	2	4	4	1.10475	88.415	3.2
54	5	2	3	1.10152	88.743	1.6
55	3	0	5	1.10020	88.877	0.4
56	0	6	2	1.09263	89.658	0.1
57	6	0	2	1.09167	89.759	0.1

Stick Pattern



CHULALONGKORN UNIVERSITY

Name and formula

Reference code: 01-076-0935

Mineral name: Cristobalite low
ICSD name: Silicon Oxide

Empirical formula: O₂Si
Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Tetragonal
Space group: P41212
Space group number: 92

a (Å): 4.9787
b (Å): 4.9787
c (Å): 6.9502
Alpha (°): 90.0000
Beta (°): 90.0000
Gamma (°): 90.0000

Calculated density (g/cm³): 2.32
Volume of cell (10⁶ pm³): 172.28
Z: 4.00

RIR: 5.01

Subfiles and Quality

Subfiles: Inorganic
Mineral
Alloy, metal or intermetallic
Corrosion
Pharmaceutical
ICSD Pattern
Quality: Calculated (C)

Comments

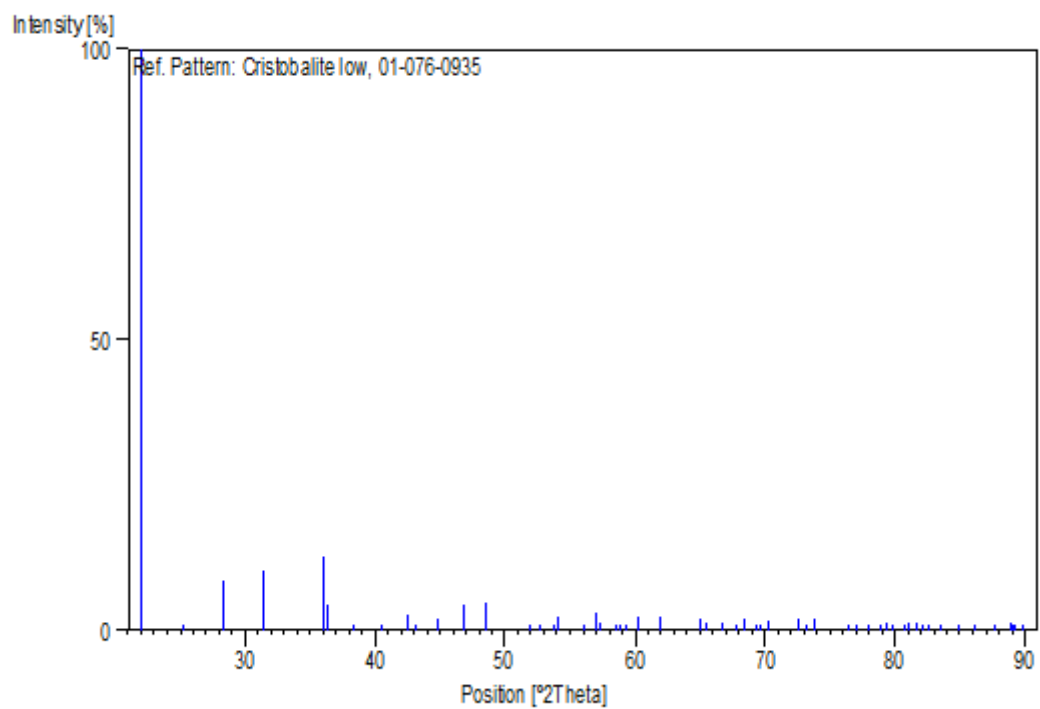
Sample source: Specimen from Ellora Caves, India.
Additional pattern: See PDF 39-1425 and PDF 82-1556.
ICSD collection code: 034927

References

Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*, (1997)
Structure: Peacor, D.R., *Z. Kristallogr., Kristallgeom., Kristallphys., Kristallchem.*, **138**, 274, (1973)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	0	1	4.04740	21.943	100.0
2	1	1	0	3.52047	25.278	0.7
3	1	1	1	3.14056	28.396	8.5
4	1	0	2	2.84960	31.366	10.3
5	2	0	0	2.48935	36.051	12.6
6	1	1	2	2.47315	36.295	4.3
7	2	0	1	2.34356	38.378	0.1
8	2	1	0	2.22654	40.481	0.1
9	2	1	1	2.12039	42.604	2.6
10	1	0	3	2.10046	43.028	0.2
11	2	0	2	2.02370	44.747	2.0
12	1	1	3	1.93528	46.910	4.5
13	2	1	2	1.87475	48.520	4.6
14	2	2	0	1.76024	51.903	0.4
15	0	0	4	1.73755	52.632	0.7
16	2	2	1	1.70636	53.671	0.1
17	2	0	3	1.69592	54.028	2.2
18	1	0	4	1.64051	56.010	0.4
19	3	0	1	1.61419	57.006	3.2
20	2	1	3	1.60534	57.349	1.2
21	3	1	0	1.57440	58.585	0.4
22	2	2	2	1.57028	58.753	0.5
23	1	1	4	1.55811	59.258	0.1
24	3	1	1	1.53550	60.220	2.3
25	3	0	2	1.49756	61.911	2.5
26	3	1	2	1.43409	64.978	2.0
27	2	0	4	1.42480	65.454	1.3
28	2	2	3	1.40157	66.679	1.2
29	3	2	0	1.38084	67.814	0.1
30	2	1	4	1.36981	68.436	2.0
31	3	2	1	1.35437	69.326	0.9
32	3	0	3	1.34913	69.634	0.6
33	1	0	5	1.33884	70.248	1.6
34	3	1	3	1.30217	72.534	1.9
35	1	1	5	1.29291	73.138	0.1
36	3	2	2	1.28325	73.779	1.9
37	4	0	0	1.24468	76.468	0.1
38	2	2	4	1.23658	77.061	0.6
39	4	0	1	1.22518	77.912	0.9
40	2	0	5	1.21365	78.795	0.1
41	4	1	0	1.20751	79.274	1.2
42	3	0	4	1.20011	79.861	0.1
43	4	1	1	1.18969	80.704	0.3
44	3	2	3	1.18614	80.995	1.2
45	2	1	5	1.17912	81.579	1.2
46	3	3	0	1.17349	82.055	0.3
47	4	0	2	1.17178	82.200	0.3
48	3	1	4	1.16670	82.636	0.7
49	3	3	1	1.15711	83.474	0.4
50	4	1	2	1.14062	84.960	0.2
51	1	0	6	1.12823	86.118	0.1
52	3	3	2	1.11181	87.710	0.4
53	1	1	6	1.10033	88.864	1.4
54	4	2	1	1.09926	88.973	1.0
55	4	0	3	1.09645	89.262	0.8
56	2	2	5	1.09090	89.839	0.1

Stick Pattern

Name and formula

Reference code: 01-072-0916

Mineral name: Anhydrite
ICSD name: Calcium Sulfate

Empirical formula: CaO_4S
Chemical formula: $\text{Ca}(\text{SO}_4)$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
Space group: Amma
Space group number: 63

a (Å): 7.0060
b (Å): 6.9980
c (Å): 6.2450
Alpha (°): 90.0000
Beta (°): 90.0000
Gamma (°): 90.0000

Calculated density (g/cm³): 2.95
Volume of cell (10⁶ pm³): 306.18
Z: 4.00

RIR: 1.77

Subfiles and Quality

Subfiles: Inorganic
Mineral
Pharmaceutical
ICSD Pattern
Quality: Calculated (C)

Comments

Sample source: Specimen from Stassfurt, West Germany.
Additional pattern: See PDF 37-1496, PDF 72-503, PDF 74-2421 and PDF 862270.
ICSD collection code: 016382
Test from ICSD: Published coordinates have been corrected.

References

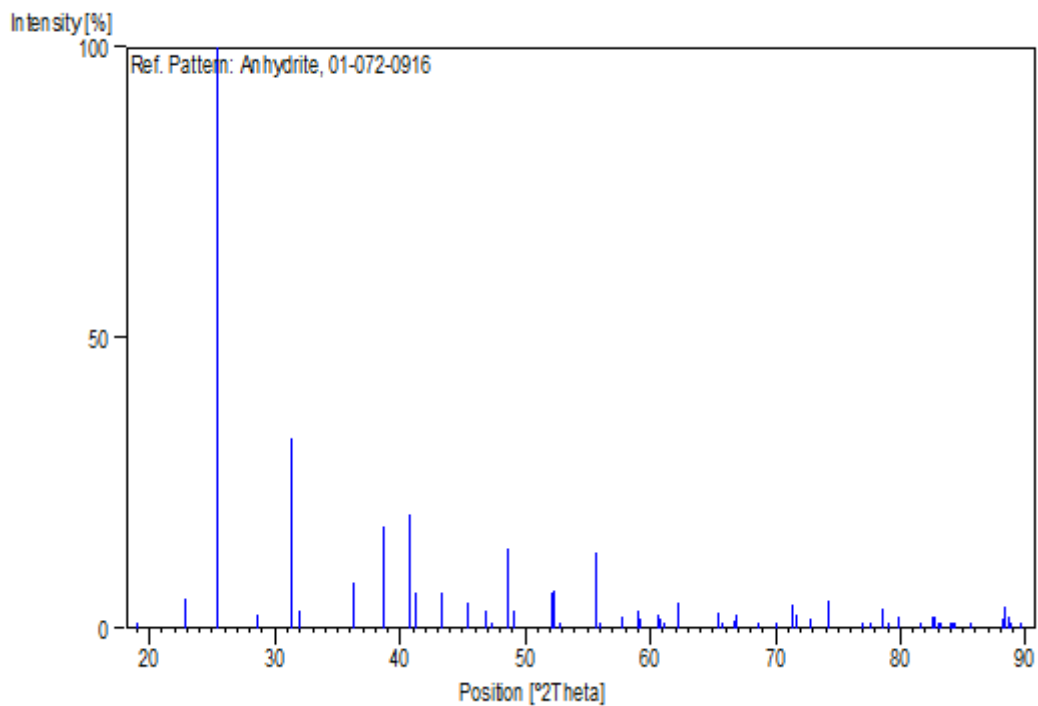
Primary reference: *Calculated from ICSD using POWD-12++*, (1997)
Structure: Kirfel, A., Will, G., *Acta Crystallogr., Sec. B*, **36**, 2881, (1980)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	4.65944	19.032	0.1
2	1	1	1	3.87976	22.904	5.2
3	2	0	0	3.50300	25.406	100.0
4	0	0	2	3.12250	28.564	2.2
5	1	0	2	2.85206	31.339	32.6
6	2	1	1	2.79997	31.937	3.2
7	2	2	0	2.47558	36.258	7.7
8	2	0	2	2.32972	38.615	17.7
9	1	2	2	2.21070	40.784	19.7
10	0	3	1	2.18520	41.282	6.0
11	3	1	1	2.08778	43.303	6.1
12	0	1	3	1.99526	45.420	4.4
13	2	2	2	1.93988	46.792	3.1
14	1	1	3	1.91896	47.333	0.4
15	3	0	2	1.87015	48.647	13.7
16	2	3	1	1.85404	49.098	3.0
17	4	0	0	1.75150	52.182	6.2
18	0	4	0	1.74950	52.246	6.4
19	2	1	3	1.73375	52.757	0.3
20	3	2	2	1.64934	55.684	12.9
21	4	1	1	1.63949	56.048	0.5
22	3	3	1	1.59561	57.732	2.1
23	4	2	0	1.56516	58.965	2.9
24	0	0	4	1.56125	59.127	1.7
25	4	0	2	1.52626	60.623	2.5
26	1	0	4	1.52387	60.728	1.5
27	3	1	3	1.51633	61.062	0.9
28	1	4	2	1.49128	62.200	4.5
29	2	0	4	1.42576	65.404	2.6
30	2	3	3	1.41985	65.711	0.9
31	4	2	2	1.39998	66.765	1.4
32	1	2	4	1.39712	66.919	2.3
33	4	3	1	1.36667	68.615	0.6
34	5	1	1	1.34184	70.068	0.1
35	1	5	1	1.34049	70.149	0.1
36	2	2	4	1.32057	71.367	4.1
37	4	1	3	1.31629	71.635	2.2
38	3	0	4	1.29792	72.810	1.5
39	5	0	2	1.27761	74.159	4.9
40	4	4	0	1.23779	76.971	0.8
41	0	1	5	1.22957	77.582	0.1
42	3	2	4	1.21690	78.544	3.3
43	1	1	5	1.21106	78.996	0.2
44	5	2	2	1.20075	79.810	1.9
45	5	3	1	1.17892	81.596	0.3
46	6	0	0	1.16767	82.552	1.9
47	0	6	0	1.16633	82.668	1.9
48	4	0	4	1.16486	82.795	2.0
49	4	3	3	1.16207	83.038	1.0
50	2	1	5	1.16018	83.203	0.5
51	4	4	2	1.15068	84.046	0.4
52	1	4	4	1.14909	84.189	0.8
53	5	1	3	1.14669	84.406	0.5
54	6	1	1	1.13264	85.702	0.1
55	6	2	0	1.10762	88.127	1.8

56	4	2	4	1.10573	88.317	3.8
57	2	5	3	1.10246	88.647	1.9
58	0	3	5	1.10109	88.787	0.5
59	6	0	2	1.09370	89.547	0.2
60	0	6	2	1.09260	89.662	0.1

Stick Pattern



Name and formula

Reference code:	00-039-1425
Mineral name:	Cristobalite, syn
PDF index name:	Silicon Oxide
Empirical formula:	O ₂ Si
Chemical formula:	SiO ₂

Crystallographic parameters

Crystal system:	Tetragonal
Space group:	P41212
Space group number:	92
a (Å):	4.9732
b (Å):	4.9732
c (Å):	6.9236
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	90.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	171.24
Z:	4.00
RIR:	-

Subfiles and Quality

Subfiles:	Inorganic Mineral Alloy, metal or intermetallic Cement and Hydration Product Common Phase Educational pattern Forensic NBS pattern Pigment/Dye
Quality:	Star (S)

Comments

Color:	Colorless
Sample preparation:	Cristobalite was prepared by the Trans Tech Company using Berkeley 5 micron MIN-U-SIL(R). A two kilogram sample was heated at 1600 C for eight hours. The sample was then air quenched, treated with 6N HCl and then jet-milled. The +325 mesh fraction was then removed by sieving.
Structure:	The structure was determined by Peacor (1).
Polymorphism:	There are a number of other forms of SiO ₂ .
Additional pattern:	To replace 11-695 and validated by calculated pattern.

See ICSD 75484 (PDF 82-1404); See ICSD 75490 (PDF 82-1410). See ICSD 30269 (PDF 75-923); See ICSD 34927 (PDF 76-935); See ICSD 34928 (PDF 76-936); See ICSD 34929 (PDF 76-937); See ICSD 47219 (PDF 77-1315); See ICSD 47220 (PDF 77-1316); See ICSD 47221 (PDF 77-1317);

Temperature: The temperature was ~25 C.

References

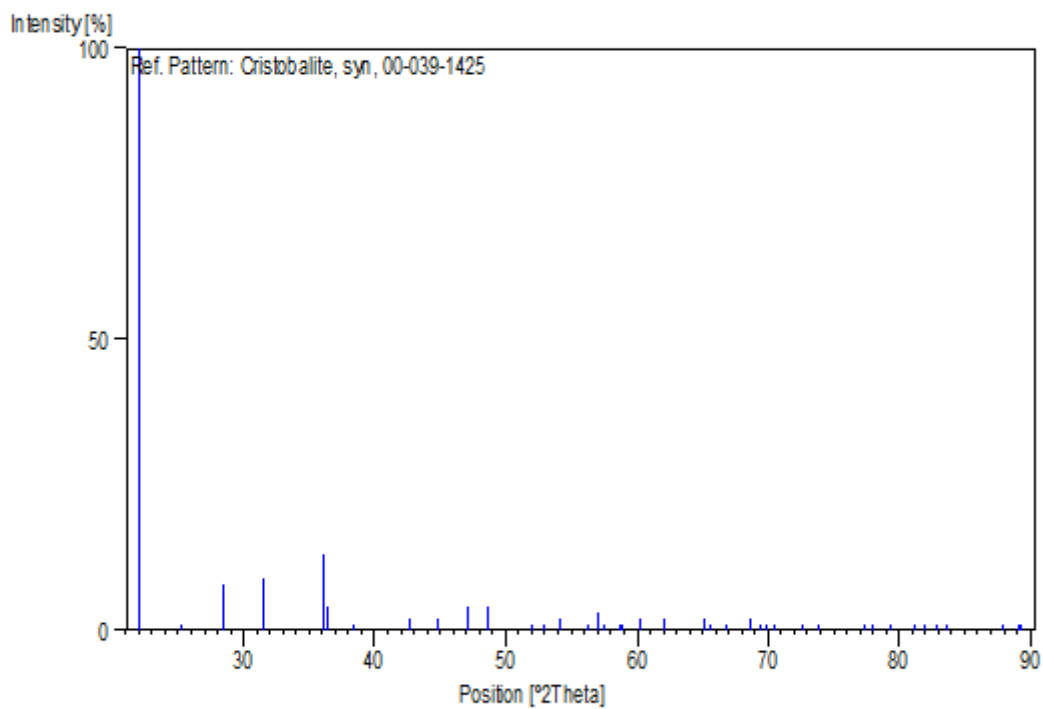
- Primary reference: Wong-Ng, W., McMurdie, H., Paretzkin, B., Hubbard, C., Dragoo, A., NBS, Gaithersburg, MD, USA., *ICDD Grant-in-Aid*, (1988)
- Structure: 1. Peacor, D., *Z. Kristallogr., Kristallgeom., Kristallphys., Kristallchem.*, **138**, 274, (1973)
- Unit cell: Wong-Ng, W., McMurdie, H., Paretzkin, B., Hubbard, C., *Powder Diffraction*, **3**, 253, (1988)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	0	1	4.03974	21.985	100.0
2	1	1	0	3.51470	25.320	1.0
3	1	1	1	3.13592	28.439	8.0
4	1	0	2	2.84116	31.462	9.0
5	2	0	0	2.48740	36.080	13.0
6	1	1	2	2.46750	36.381	4.0
7	2	0	1	2.34170	38.410	1.0
8	2	1	1	2.11791	42.656	2.0
9	2	0	2	2.01957	44.843	2.0
10	1	1	3	1.92935	47.063	4.0
11	2	1	2	1.87147	48.611	4.0
12	2	2	0	1.75907	51.940	1.0
13	0	0	4	1.73033	52.869	1.0
14	2	0	3	1.69221	54.156	2.0
15	1	0	4	1.63488	56.220	1.0
16	3	0	1	1.61217	57.084	3.0
17	2	1	3	1.60131	57.507	1.0
18	3	1	0	1.57207	58.680	1.0
19	2	2	2	1.56745	58.870	1.0
20	3	1	1	1.53356	60.304	2.0
21	3	0	2	1.49520	62.019	2.0
22	3	1	2	1.43165	65.102	2.0
23	2	0	4	1.42102	65.650	1.0
24	2	2	3	1.39908	66.813	1.0
25	2	1	4	1.36560	68.676	2.0
26	3	2	1	1.35277	69.420	1.0
27	3	0	3	1.34650	69.790	1.0
28	1	0	5	1.33398	70.542	1.0
29	3	1	3	1.29976	72.690	1.0
30	3	2	2	1.28133	73.908	1.0
31	2	2	4	1.23318	77.312	1.0
32	4	0	1	1.22375	78.020	1.0
33	4	1	0	1.20599	79.394	1.0
34	3	2	3	1.18427	81.150	1.0
35	2	1	5	1.17576	81.862	1.0
36	3	1	4	1.16384	82.884	1.0

37	3	3	1	1.15546	83.620	1.0
38	3	3	2	1.11050	87.840	1.0
39	4	2	1	1.09783	89.120	1.0
40	1	1	6	1.09628	89.280	1.0

Stick Pattern



Name and formula

Reference code:	00-033-0311
Mineral name:	Gypsum, syn
PDF index name:	Calcium Sulfate Hydrate
Empirical formula:	$\text{CaH}_4\text{O}_6\text{S}$
Chemical formula:	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Crystallographic parameters

Crystal system:	Monoclinic
Space group:	C2/c
Space group number:	15

a (Å):	6.2845
b (Å):	15.2079
c (Å):	5.6776
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	114.0900
Gamma (°):	90.0000

Calculated density (g/cm ³):	2.31
Measured density (g/cm ³):	2.32
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	495.37
Z:	4.00

RIR:	1.83
------	------

Subfiles and Quality

Subfiles:	Inorganic Mineral Cement and Hydration Product Common Phase Forensic NBS pattern Pigment/Dye
Quality:	Star (S)

Comments

Color:	Colorless
General comments:	Preferred orientation enhances 0k0 reflections.
Sample preparation:	Sample prepared by adding H_2SO_4 to a $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ solution; the precipitate was filtered out, washed in water and bottled while moist; the crystals were dried immediately before use with care taken to prevent dehydration.
Optical data:	$A=1.521$, $B=1.523$, $Q=1.530$, $\text{Sign}=+$, $2V=58^\circ$
Additional pattern:	To replace 6-46 and validated by calculated pattern 36-432. See ICSD 2057 (PDF 70-982).
Temperature:	Pattern taken at 25 C.

References

Primary reference:

Natl. Bur. Stand. (U.S.) Monogr. 25, 17, 16, (1980)

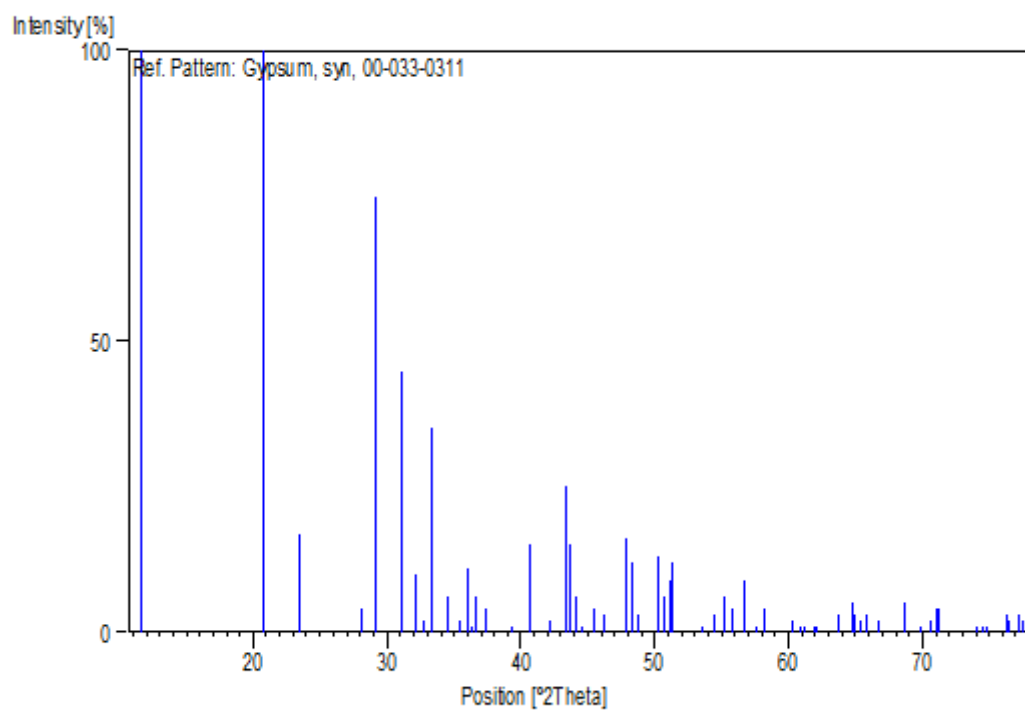
Optical data:

Winchell, A., *Elements of Optical Mineralogy, 2, 157, (1951)***Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	2	0	7.63000	11.589	100.0
2	0	2	1	4.28300	20.722	100.0
3	0	4	0	3.79900	23.397	17.0
4	1	1	1	3.17200	28.109	4.0
5	0	4	1	3.06500	29.111	75.0
6	-2	2	1	2.87300	31.104	45.0
7	-1	1	2	2.78900	32.066	10.0
8	1	3	1	2.73200	32.754	2.0
9	1	5	0	2.68500	33.344	35.0
10	-1	5	1	2.59700	34.508	6.0
11	0	6	0	2.53400	35.394	2.0
12	-2	0	2	2.49500	35.966	11.0
13	-1	3	2	2.47600	36.252	1.0
14	0	2	2	2.45200	36.619	6.0
15	-2	4	1	2.40600	37.345	4.0
16	2	4	0	2.29100	39.295	1.0
17	1	5	1	2.21900	40.625	15.0
18	0	4	2	2.14200	42.153	2.0
19	-2	4	2	2.08600	43.341	25.0
20	-1	5	2	2.07400	43.605	15.0
21	1	1	2	2.04800	44.187	6.0
22	1	7	0	2.03200	44.554	1.0
23	-1	7	1	1.99200	45.498	4.0
24	-2	6	1	1.96300	46.209	3.0
25	0	8	0	1.89980	47.840	16.0
26	2	4	1	1.87950	48.390	12.0
27	-1	1	3	1.86500	48.791	3.0
28	0	6	2	1.81180	50.321	13.0
29	-2	2	3	1.79950	50.689	6.0
30	0	8	1	1.78440	51.149	9.0
31	-2	6	2	1.77850	51.331	12.0
32	1	5	2	1.70930	53.571	1.0
33	0	2	3	1.68460	54.421	3.0
34	-2	4	3	1.66400	55.151	6.0
35	2	6	1	1.64560	55.822	4.0
36	-2	8	1	1.62090	56.749	9.0
37	-1	9	1	1.60050	57.539	1.0
38	2	8	0	1.58460	58.171	4.0
39	0	8	2	1.53270	60.341	2.0
40	0	10	0	1.52090	60.859	1.0
41	-2	8	2	1.51190	61.260	1.0
42	1	9	1	1.49820	61.881	1.0
43	-2	6	3	1.49470	62.042	1.0
44	-3	7	2	1.45910	63.731	3.0
45	-4	4	1	1.43920	64.719	5.0
46	3	7	0	1.43540	64.911	3.0
47	2	8	1	1.42780	65.299	2.0
48	-2	0	4	1.41780	65.818	3.0

49	-4	2	3	1.40150	66.683	2.0
50	2	6	2	1.36570	68.670	5.0
51	1	11	0	1.34400	69.939	1.0
52	-1	11	1	1.33240	70.638	2.0
53	-2	8	3	1.32620	71.018	4.0
54	-4	6	2	1.32340	71.191	4.0
55	0	8	3	1.27850	74.099	1.0
56	1	11	1	1.27220	74.528	1.0
57	0	12	0	1.26740	74.858	1.0
58	4	6	0	1.24810	76.221	3.0
59	2	10	1	1.24410	76.510	2.0
60	2	8	2	1.23360	77.281	3.0
61	-4	2	4	1.23090	77.482	2.0

Stick Pattern



Date: 22-Apr-16 Time: 4:31:41 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 01-089-8937
 Compound name: Silicon Oxide
 Common name: Quartz α , α -Si O₂
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Hexagonal
 Space group: P3221
 Space group number: 154
 a (Å): 4.9384
 b (Å): 4.9384
 c (Å): 5.4213
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 120.0000
 Volume of cell (10⁶ pm³): 114.50
 Z: 3.00
 RIR: 2.92

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient temperature, Alternate Pattern
 Subfiles: Pharmaceutical, Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, ICSD Pattern
 Quality: Star (S)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 89279
 Creation Date: 01-Sep-03
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:89279
 ANX: AX2
 Analysis: O2 Si1
 Formula from original source: Si O2
 ICSD Collection Code: 89279
 Calculated Pattern Original Remarks: Stable up to 846 K, above P6222, above 1143 K tridymite is stable
 Temperature of Data Collection: 597 K
 Wyckoff Sequence: c b(P3221)
 Unit Cell Data Source: Single Crystal.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Kihara, K., Eur. J. Mineral., **2**, 63, (1990)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	0	0	4.27678	20.753	20.2
2	0	1	1	3.35773	26.525	100.0
3	1	1	0	2.46920	36.355	5.9
4	1	0	2	2.28952	39.321	5.5
5	1	1	1	2.24710	40.095	2.5
6	2	0	0	2.13839	42.228	4.7
7	2	0	1	1.98923	45.565	2.8
8	1	1	2	1.82539	49.921	12.4

Date: 22-Apr-16 Time: 4:31:41 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Emyprean

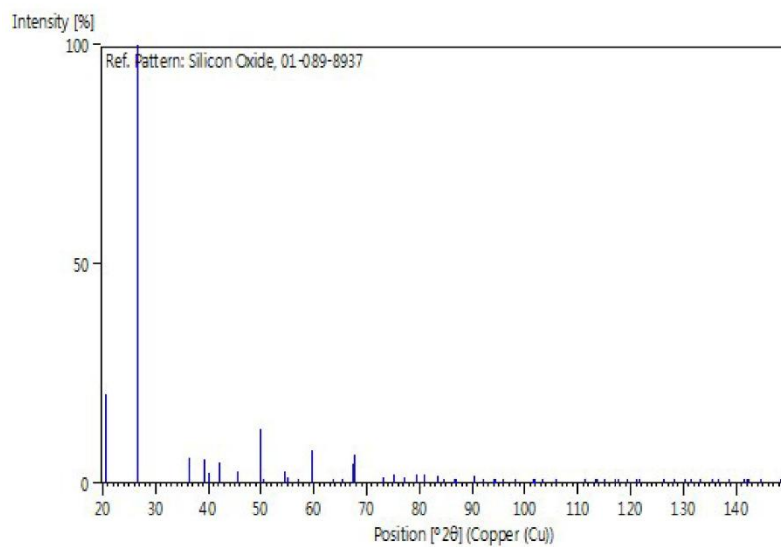
9	0	0	3	1.80710	50.461	0.3
10	0	2	2	1.67887	54.622	2.7
11	0	1	3	1.66460	55.130	1.3
12	2	1	0	1.61647	56.918	0.2
13	1	2	1	1.54908	59.638	7.6
14	1	1	3	1.45828	63.771	1.1
15	3	0	0	1.42559	65.413	0.5
16	1	2	2	1.38835	67.398	4.4
17	0	3	1	1.38025	67.847	6.3
18	2	0	3	1.38025	67.847	6.3
19	1	0	4	1.29200	73.197	1.5
20	3	0	2	1.26174	75.252	2.2
21	2	2	0	1.23460	77.207	1.3
22	2	1	3	1.20480	79.488	2.1
23	2	2	1	1.20480	79.488	2.1
24	1	1	4	1.18811	80.833	2.0
25	3	1	0	1.18617	80.993	1.8
26	1	3	1	1.15875	83.329	1.6
27	2	0	4	1.14476	84.581	0.2
28	2	2	2	1.12355	86.565	0.1
29	3	0	3	1.11924	86.981	0.1
30	1	3	2	1.08668	90.284	1.6
31	4	0	0	1.06919	92.183	0.4
32	0	1	5	1.05101	94.262	1.0
33	4	0	1	1.04899	94.500	0.5
34	2	1	4	1.03857	95.751	1.0
35	2	2	3	1.01941	98.161	0.8
36	0	4	2	0.99462	101.514	0.1
37	1	1	5	0.99276	101.776	0.5
38	1	3	3	0.99163	101.938	0.3
39	0	3	4	0.98226	103.295	0.3
40	3	2	0	0.98116	103.458	0.4
41	2	3	1	0.96548	105.849	0.9
42	4	1	0	0.93327	111.253	0.1
43	3	2	2	0.92258	113.219	0.4
44	4	1	1	0.91974	113.758	1.1
45	4	0	3	0.91974	113.758	1.1
46	2	2	4	0.91270	115.126	0.2
47	0	0	6	0.90355	116.975	0.1
48	1	2	5	0.90045	117.620	0.7
49	3	1	4	0.89260	119.307	0.5
50	1	0	6	0.88404	121.230	0.1
51	1	4	2	0.88243	121.601	0.4
52	3	0	5	0.86301	126.396	0.1
53	5	0	0	0.85536	128.463	0.1
54	1	1	6	0.84852	130.409	0.1
55	0	5	1	0.84490	131.483	0.1
56	0	4	4	0.83943	133.168	0.1
57	0	2	6	0.83230	135.489	0.7
58	1	4	3	0.82922	136.543	0.6
59	3	3	0	0.82307	138.744	0.2
60	5	0	2	0.81571	141.584	0.6
61	2	2	5	0.81468	142.000	0.3
62	3	3	1	0.81374	142.387	0.3
63	4	2	0	0.80823	144.752	0.5
64	1	3	5	0.80029	148.527	0.5
65	2	4	1	0.79940	148.985	0.1

Stick Pattern

Date: 22-Apr-16 Time: 4:31:41 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Empeyan



Name and formula

Reference code:	01-081-1849
ICSD name:	Calcium Sulfate Hydrate
Empirical formula:	CaHO _{4.5} S
Chemical formula:	Ca (SO ₄) (H ₂ O) _{0.5}

Crystallographic parameters

Crystal system:	Monoclinic
Space group:	I2
Space group number:	5
a (Å):	12.0275
b (Å):	6.9312
c (Å):	12.6919
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.1800
Gamma (°):	90.0000
Calculated density (g/cm ³):	2.73
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	1058.06
Z:	12.00
RIR:	1.09

Subfiles and Quality

Subfiles:	Inorganic ICSD Pattern
Quality:	Hypothetical (H)

Comments

General comments:	TF are of mixed type. TF are converted prior to pattern calculation.
ICSD collection code:	073263
Test from ICSD:	No R value given. At least one TF missing.

References

Primary reference:	<i>Calculated from ICSD using POWD-12++</i>
Structure:	Abriel, W., Nesper, R., <i>Z. Kristallogr.</i> , 205 , 99, (1993)

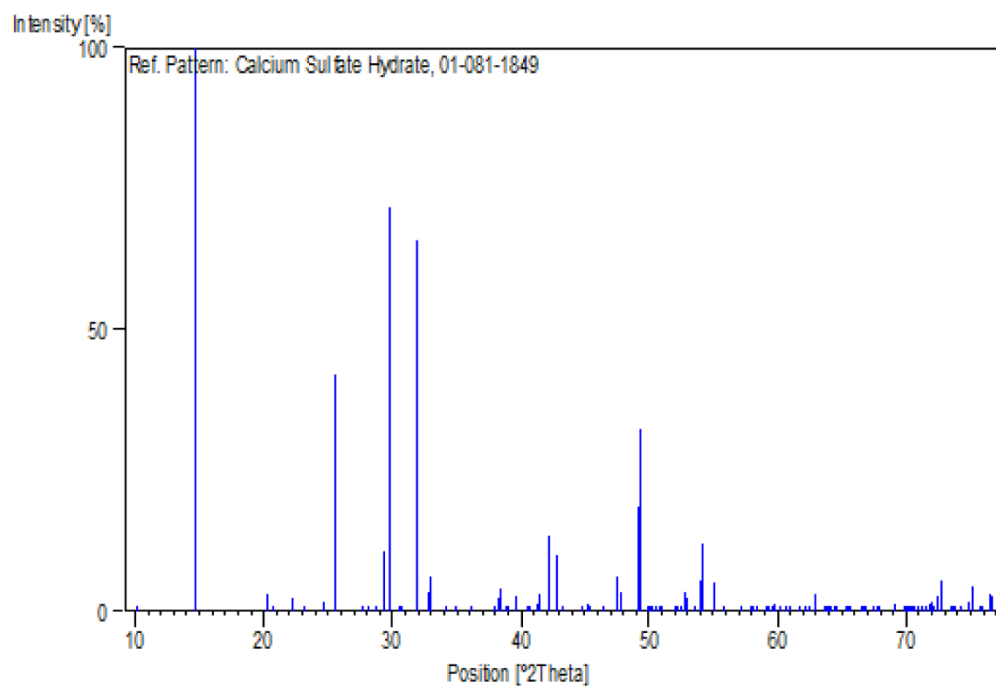
Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[deg]	I [%]
1	-1	0	1	8.74384	10.108	0.8
2	2	0	0	6.00537	14.739	100.0
3	-1	1	2	4.36528	20.327	2.9
4	-2	1	1	4.27347	20.769	1.1
5	-1	0	3	3.98700	22.280	2.4
6	-3	0	1	3.82640	23.227	0.6
7	0	1	3	3.61109	24.633	1.7
8	3	1	0	3.47041	25.649	42.1
9	-1	2	1	3.22040	27.678	0.8
10	0	0	4	3.17296	28.100	0.1
11	2	1	3	3.09218	28.850	1.1
12	0	2	2	3.04136	29.343	10.5
13	4	0	0	3.00269	29.729	71.8
14	-3	0	3	2.91461	30.649	0.6
15	3	0	3	2.90549	30.748	0.5
16	1	1	4	2.80363	31.894	66.0
17	-4	0	2	2.72057	32.895	3.3
18	4	0	2	2.71254	32.995	6.2
19	-1	2	3	2.61781	34.226	0.4
20	-3	2	1	2.56657	34.931	0.3
21	-1	0	5	2.48208	36.160	0.1
22	-5	0	1	2.36477	38.021	0.2
23	-3	1	4	2.34491	38.355	2.3
24	0	2	4	2.34025	38.435	4.0
25	-4	1	3	2.31374	38.893	0.1
26	4	1	3	2.30764	39.000	0.1
27	4	2	0	2.26892	39.693	2.7
28	3	2	3	2.22652	40.482	0.2
29	-2	1	5	2.21809	40.642	0.4
30	2	1	5	2.21361	40.728	0.3
31	-4	0	4	2.18596	41.267	1.2
32	2	2	4	2.17923	41.400	2.9
33	-5	1	2	2.14149	42.164	6.5
34	4	2	2	2.13606	42.276	13.4
35	0	0	6	2.11531	42.711	9.9
36	5	0	3	2.08828	43.292	0.1
37	-1	2	5	2.01961	44.842	0.1
38	6	0	0	2.00179	45.263	1.4
39	-2	0	6	1.99614	45.399	1.0
40	-5	2	1	1.95182	46.489	0.2
41	-3	3	2	1.90992	47.571	6.1
42	-6	1	1	1.90472	47.709	3.5
43	-5	1	4	1.84889	49.244	18.6
44	-1	3	4	1.84612	49.323	32.5
45	-3	2	5	1.82556	49.916	0.4
46	3	2	5	1.82182	50.025	0.3
47	-4	3	1	1.81275	50.293	0.2
48	-3	1	6	1.80841	50.422	0.2
49	0	2	6	1.80555	50.508	0.3
50	-1	0	7	1.79369	50.865	0.1
51	5	2	3	1.78865	51.019	0.1
52	-6	1	3	1.75464	52.081	0.1
53	6	1	3	1.75065	52.209	0.1

54	5	0	5	1.74329	52.446	0.2
55	6	2	0	1.73521	52.709	3.5
56	0	4	0	1.73280	52.788	3.1
57	2	2	6	1.72801	52.946	2.5
58	0	3	5	1.70862	53.594	0.3
59	-6	0	4	1.69711	53.987	5.4
60	6	0	4	1.69182	54.170	12.1
61	5	3	0	1.66630	55.069	5.2
62	-2	3	5	1.64449	55.863	0.1
63	7	1	2	1.61089	57.134	1.0
64	-1	2	7	1.59181	57.883	0.1
65	-1	4	3	1.58969	57.967	0.1
66	0	0	8	1.58648	58.096	0.1
67	-3	4	1	1.57800	58.438	0.1
68	-5	2	5	1.56126	59.126	0.1
69	5	2	5	1.55736	59.289	0.1
70	-5	1	6	1.55064	59.572	0.6
71	1	3	6	1.54675	59.737	1.4
72	-1	1	8	1.53445	60.265	1.1
73	-6	2	4	1.52417	60.714	0.4
74	0	4	4	1.52068	60.869	1.1
75	-4	1	7	1.51714	61.026	0.5
76	8	0	0	1.50343	61.643	0.4
77	4	4	0	1.50134	61.738	0.6
78	-3	2	7	1.49270	62.135	0.1
79	-4	3	5	1.48689	62.405	0.2
80	4	3	5	1.48419	62.531	0.1
81	-2	4	4	1.47491	62.969	2.9
82	-4	4	2	1.46153	63.613	0.6
83	-6	0	6	1.45731	63.819	0.5
84	3	3	6	1.45282	64.039	0.5
85	-5	0	7	1.45008	64.175	0.3
86	7	2	3	1.44435	64.460	0.6
87	0	2	8	1.44252	64.552	1.0
88	-6	3	3	1.42635	65.374	0.1
89	6	3	3	1.42449	65.470	0.1
90	-1	4	5	1.42141	65.630	0.1
91	-2	2	8	1.40363	66.568	0.2
92	2	2	8	1.40182	66.665	0.3
93	-5	4	1	1.39716	66.917	0.1
94	2	3	7	1.38663	67.493	0.1
95	0	1	9	1.38189	67.756	0.1
96	7	3	0	1.37873	67.932	0.1
97	-4	4	4	1.35791	69.120	1.4
98	-1	5	2	1.34590	69.826	0.4
99	-6	2	6	1.34337	69.977	0.3
100	0	4	6	1.34046	70.151	0.2
101	-5	2	7	1.33770	70.317	0.1
102	5	2	7	1.33427	70.524	0.1
103	-3	0	9	1.33162	70.686	0.1
104	3	0	9	1.32900	70.846	0.1
105	-6	1	7	1.32205	71.275	0.1
106	6	1	7	1.31808	71.523	0.1
107	9	1	0	1.31221	71.892	1.2
108	-5	3	6	1.31013	72.024	1.7
109	7	1	6	1.30757	72.187	1.0
110	-5	1	8	1.30266	72.503	2.6

111	1	3	8	1.29981	72.687	5.3
112	4	3	7	1.28747	73.497	0.2
113	2	5	3	1.28582	73.607	0.3
114	6	4	2	1.28281	73.808	0.6
115	-9	0	3	1.27547	74.304	0.1
116	-8	2	4	1.26624	74.939	1.8
117	7	3	4	1.26311	75.156	4.3
118	4	1	9	1.25417	75.786	0.1
119	-4	5	1	1.25259	75.899	0.1
120	-3	3	8	1.24430	76.495	3.2
121	6	0	8	1.24212	76.654	2.7

Stick Pattern



Name and formula

Reference code:	01-080-7958
Compound name:	Calcium Sulfate Hydrate
Empirical formula:	$\text{CaH}_{1.25}^{\text{O}} 4.625^{\text{S}}$
Chemical formula:	$\text{Ca} (\text{SO}_4) (\text{H}_2\text{O})_{0.625}$

Crystallographic parameters

Crystal system:	Hexagonal
Space group:	P3221
Space group number:	154
a (Å):	13.8690
b (Å):	13.8690
c (Å):	12.7189
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	120.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	2118.70
Z:	24.00
RIR:	1.55

Status, subfiles and quality

Status:	Diffraction data collected at non ambient pressure
Subfiles:	ICSD Pattern
Quality:	Inorganic Star (S)

Comments

ANX:	A8B8X37
------	---------

ICSD collection code: 262107
 Creation Date: 01-Sep-13
 Cross-References: ICSD:262107
 ANX: A888X37
 Analysis: H1.25 Ca1 O4.625 S1
 Formula from original source: Ca (S O4) (H2 O)0.625
 ICSD Collection Code: 262107
 Pressure of Datacollection: 101.3 MPa
 Temperature of Data Collection: 296 K
 Wyckoff Sequence: c24 b2 a3 (P3221)
 Unit Cell Data Source: Single Crystal.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Schmidt, H., Paschke, I., Freyer, D., Voigt, W., Acta Crystallogr., Sec. B: Struct. Sci. **67**, 467, (2011)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta(deg)	I [%]
1	1	0	0	12.01090	7.354	0.2
2	0	1	1	8.73266	10.121	0.2
3	1	1	0	6.93450	12.755	0.4
4	2	0	0	6.00545	14.739	78.2
5	1	0	2	5.62026	15.755	0.2
6	0	2	1	5.43064	16.309	0.1
7	1	1	2	4.68694	18.919	0.4
8	2	1	0	4.53970	19.538	0.3
9	0	2	2	4.36628	20.323	4.3
10	1	2	1	4.27552	20.759	0.5
11	0	0	3	4.23963	20.936	0.1
12	1	0	3	3.99788	22.218	1.2
13	0	3	1	3.81890	23.274	0.3
14	1	2	2	3.69486	24.066	0.9
15	1	1	3	3.61717	24.591	0.8
16	2	0	3	3.46725	25.672	55.4
17	2	2	0	3.46725	25.672	55.4
18	0	3	2	3.38812	26.283	0.2
19	2	2	1	3.34518	26.626	0.1
20	3	1	0	3.33123	26.740	0.2
21	1	3	1	3.22253	27.659	1.1

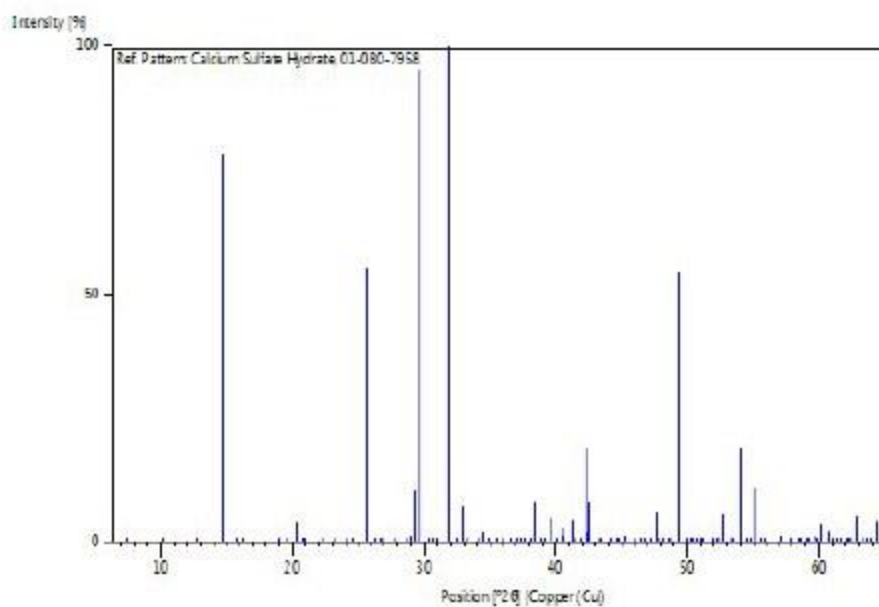


22	1	2	3	3.09853	28.790	0.3
23	1	0	4	3.07383	29.026	1.6
24	2	2	2	3.04419	29.315	10.7
25	4	0	0	3.00273	29.729	95.2
26	1	3	2	2.95089	30.264	0.9
27	0	3	3	2.91085	30.690	0.2
28	1	1	4	2.89035	30.913	0.8
29	2	0	4	2.81013	31.819	100.0
30	3	2	0	2.75549	32.467	0.4
31	0	4	2	2.71527	32.961	7.6
32	3	2	1	2.69302	33.241	0.6
33	2	2	3	2.68398	33.357	0.2
34	1	3	3	2.61938	34.204	0.7
35	1	2	4	2.60441	34.407	1.9
36	1	4	1	2.56706	34.924	0.7
37	3	2	2	2.52836	35.476	0.6
38	0	3	4	2.48997	36.041	0.3
39	0	4	3	2.45039	36.644	0.1
40	1	4	2	2.42325	37.069	0.7
41	5	0	0	2.40218	37.406	0.2
42	1	1	5	2.38817	37.634	0.6
43	0	5	1	2.36045	38.093	0.2
44	2	2	4	2.34347	38.380	8.3
45	2	0	5	2.34347	38.380	8.3
46	3	3	0	2.31150	38.932	0.6
47	3	2	3	2.31150	38.932	0.6
48	1	3	4	2.30010	39.133	0.4
49	4	2	0	2.26985	39.676	5.2
50	0	5	2	2.24721	40.093	0.3
51	1	4	3	2.22937	40.427	3.0
52	1	2	5	2.21914	40.622	1.4
53	0	4	4	2.18314	41.322	4.6
54	3	3	2	2.17245	41.535	0.4
55	5	1	0	2.15722	41.842	0.5
56	2	4	2	2.13776	42.241	18.8
57	1	5	1	2.12685	42.468	2.2
58	0	0	6	2.11982	42.616	8.3
59	1	0	6	2.09001	43.254	0.1
60	5	0	3	2.09001	43.254	0.1
61	2	3	4	2.08238	43.420	0.2
62	2	2	5	2.05100	44.119	0.1

63	1	5	2	2.04289	44.304	0.3
64	3	3	3	2.02946	44.613	1.2
65	1	1	6	2.02946	44.613	1.2
66	1	3	5	2.02173	44.792	0.5
67	6	0	0	2.00182	45.263	1.4
68	2	4	3	2.00182	45.263	1.4
69	0	2	6	1.99894	45.331	1.3
70	0	6	1	1.97458	45.922	0.2
71	4	3	0	1.97458	45.922	0.2
72	3	4	1	1.95121	46.505	0.9
73	4	0	5	1.94093	46.765	0.1
74	5	1	3	1.92265	47.237	0.7
75	2	1	6	1.92265	47.237	0.7
76	0	6	2	1.90945	47.584	6.2
77	2	5	1	1.90167	47.790	0.4
78	3	4	2	1.88577	48.219	0.2
79	0	3	6	1.87342	48.557	0.3
80	3	2	5	1.86909	48.677	0.4
81	2	4	4	1.84743	49.285	54.4
82	4	1	5	1.82541	49.920	0.3
83	1	6	1	1.81294	50.287	0.2
84	0	6	3	1.80858	50.417	0.4
85	2	2	6	1.80858	50.417	0.4
86	0	1	7	1.79654	50.779	0.1
87	3	4	3	1.78996	50.979	0.5
88	1	3	6	1.78996	50.979	0.5
89	1	5	4	1.78517	51.125	0.2
90	1	1	7	1.75765	51.985	0.1
91	1	6	2	1.75765	51.985	0.1
92	5	2	3	1.75149	52.182	0.3
93	0	5	5	1.74651	52.342	0.1
94	4	0	6	1.73363	52.761	5.8
95	4	4	0	1.73363	52.761	5.8
96	5	3	0	1.71584	53.351	0.1
97	3	3	5	1.71072	53.523	0.3
98	6	0	4	1.69406	54.092	18.8
99	2	4	5	1.69406	54.092	18.8
100	3	2	6	1.68144	54.532	0.9
101	6	1	3	1.68144	54.532	0.9
102	4	4	2	1.67259	54.844	0.8
103	6	2	0	1.66561	55.094	11.2
104	2	6	1	1.65151	55.604	0.1

105	1	5	5	1.64526	55.834	0.7
106	2	2	7	1.61127	57.119	1.2
107	2	6	2	1.61127	57.119	1.2
108	1	3	7	1.59513	57.751	0.1
109	0	7	3	1.59052	57.934	0.2
110	1	7	1	1.57858	58.414	0.3
111	0	6	5	1.57312	58.637	0.1
112	3	3	6	1.56231	59.083	0.2
113	3	4	5	1.55980	59.187	0.2
114	2	4	6	1.54926	59.630	1.3
115	1	7	2	1.54333	59.883	0.1
116	0	2	8	1.53692	60.158	3.8
117	4	4	4	1.52210	60.806	2.5
118	2	3	7	1.51689	61.037	0.2
119	3	5	4	1.51199	61.256	0.3
120	1	5	6	1.51199	61.256	0.3
121	8	0	0	1.50136	61.737	0.8
122	1	2	8	1.50136	61.737	0.8
123	5	4	2	1.49476	62.039	0.2
124	1	4	7	1.49476	62.039	0.2
125	1	7	3	1.48947	62.284	0.2
126	1	6	5	1.48641	62.427	0.1
127	2	6	4	1.47544	62.944	5.2
128	7	2	0	1.46737	63.330	0.1
129	0	8	2	1.46120	63.629	0.8
130	0	6	6	1.45543	63.911	0.7
131	2	2	8	1.44518	64.418	4.4
132	3	4	6	1.44518	64.418	4.4

Stick Pattern



Date: 22-Apr-16 Time: 4:34:45 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_580

User: Empyrean

Name and formula

Reference code: 01-080-6362
 Mineral name: Anhydrite
 Compound name: Calcium Sulfate
 Empirical formula: CaO_4S
 Chemical formula: $\text{Ca}(\text{SO}_4)$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: Amme
 Space group number: 63
 a (Å): 7.0012
 b (Å): 6.9932
 c (Å): 6.2416
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000
 Volume of cell (10^6 pm^3): 305.60
 Z: 4.00
 RIR: 1.75

Status, subfiles and quality

Status: Alternate Pattern
 Subfiles: Pharmaceutical, Common Phase, Inorganic, Forensic, Mineral, Ceramic, Cement and Hydration Product, ICSD Pattern
 Quality: Star (S)

Comments

ANX: ABX4
 ICSD collection code: 183918
 Creation Date: 01-Sep-13
 Cross-References: ICSD:183918
 ANX: ABX4
 Analysis: Ca1 O4 S1
 Formula from original source: Ca (S O4)
 ICSD Collection Code: 183918
 Sample Source or Locality: Baldonnel sedimentary formation, west-central Alberta, Canada
 Wyckoff Sequence: g f c2 (AMMA)
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Antao, S.M., Powder Diff., **26**, 326, (2011)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	0	1	1	4.65662	19.043	0.1
2	1	1	1	3.87732	22.918	4.9
3	0	2	0	3.50061	25.424	100.0
4	2	0	0	3.50061	25.424	100.0
5	0	0	2	3.12080	28.580	2.5
6	1	0	2	2.85044	31.357	35.2
7	2	1	1	2.79814	31.959	3.4
8	2	2	0	2.47389	36.284	7.5
9	2	0	2	2.32831	38.640	21.1
10	0	2	2	2.32831	38.640	21.1

Date: 22-Apr-16 Time: 4:34:45 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_580

User: Emyprean

11	1	2	2	2.20934	40.810	22.1
12	0	3	1	2.18375	41.310	6.7
13	1	3	1	2.08638	43.333	6.8
14	3	1	1	2.08638	43.333	6.8
15	0	1	3	1.99415	45.446	4.7
16	2	2	2	1.93866	46.823	3.7
17	1	1	3	1.91787	47.362	0.3
18	3	0	2	1.86896	48.680	15.1
19	2	3	1	1.85280	49.133	3.3
20	4	0	0	1.75030	52.220	7.5
21	0	4	0	1.74831	52.284	7.6
22	2	1	3	1.73273	52.790	0.3
23	3	2	2	1.64828	55.723	14.4
24	4	1	1	1.63839	56.089	0.4
25	3	3	1	1.59453	57.775	2.5
26	2	4	0	1.56409	59.009	3.3
27	4	2	0	1.56409	59.009	3.3
28	0	3	3	1.55221	59.506	0.1
29	0	4	2	1.52527	60.666	2.8
30	4	0	2	1.52527	60.666	2.8
31	1	3	3	1.51541	61.103	1.0
32	3	1	3	1.51541	61.103	1.0
33	1	4	2	1.49031	62.245	5.2
34	2	0	4	1.42495	65.446	2.8
35	0	2	4	1.42495	65.446	2.8
36	2	3	3	1.41897	65.757	1.0
37	2	4	2	1.39907	66.814	1.7
38	4	2	2	1.39907	66.814	1.7
39	1	2	4	1.39632	66.962	2.3
40	4	3	1	1.36575	68.667	0.7
41	0	5	1	1.36575	68.667	0.7
42	5	1	1	1.34093	70.122	0.1
43	1	5	1	1.34093	70.122	0.1
44	2	2	4	1.31980	71.415	4.5
45	4	1	3	1.31546	71.687	0.2
46	3	0	4	1.29716	72.859	1.6
47	3	3	3	1.29244	73.168	0.1
48	3	4	2	1.27676	74.217	5.6
49	5	0	2	1.27676	74.217	5.6
50	2	5	1	1.27158	74.570	0.3
51	4	4	0	1.23694	77.034	1.0
52	0	1	5	1.22889	77.633	0.1
53	3	2	4	1.21617	78.600	3.7
54	1	1	5	1.21039	79.049	0.2
55	5	2	2	1.19996	79.873	2.0
56	3	5	1	1.17813	81.662	0.4
57	5	3	1	1.17813	81.662	0.4
58	6	0	0	1.16687	82.621	2.2
59	4	0	4	1.16554	82.736	2.3
60	0	6	0	1.16554	82.736	2.3
61	4	3	3	1.16074	83.154	0.6
62	0	5	3	1.16074	83.154	0.6
63	2	1	5	1.15952	83.261	0.4
64	4	4	2	1.14991	84.115	0.4
65	1	4	4	1.14839	84.252	1.0
66	1	5	3	1.14595	84.473	0.1
67	5	1	3	1.14595	84.473	0.1
68	6	1	1	1.13187	85.774	0.1
69	6	2	0	1.10686	88.203	1.9
70	2	4	4	1.10505	88.385	3.9
71	4	2	4	1.10505	88.385	3.9
72	2	5	3	1.10175	88.719	0.2
73	0	3	5	1.10046	88.851	0.4
74	6	0	2	1.09297	89.623	0.1
75	0	6	2	1.09187	89.738	0.1
76	1	3	5	1.08735	90.213	0.1
77	3	1	5	1.08735	90.213	0.1
78	1	6	2	1.07883	91.125	1.8
79	4	5	1	1.07628	91.402	0.1
80	2	3	5	1.04981	94.404	0.1
81	6	2	2	1.04319	95.192	1.3
82	3	4	4	1.04174	95.367	2.0
83	5	0	4	1.04174	95.367	2.0

Date: 22-Apr-16 Time: 4:34:45 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_580

User: Emyprean

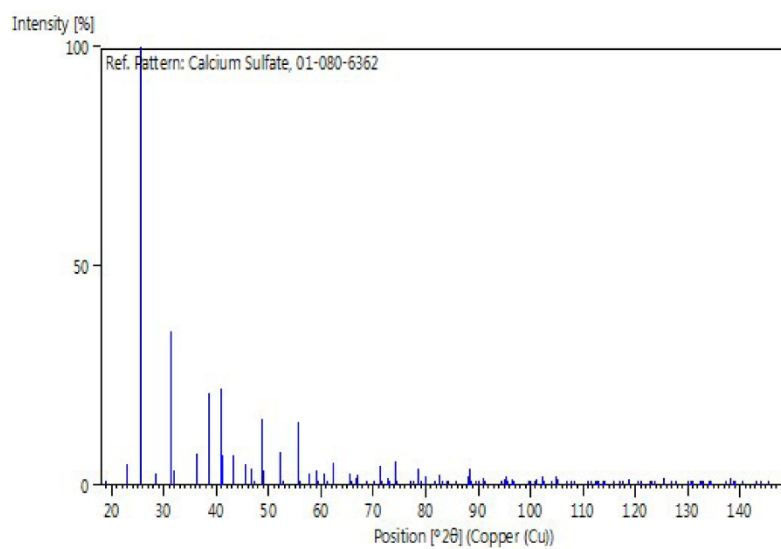
84	5	3	3	1.04027	95.545	0.9
85	0	0	6	1.04027	95.545	0.9
86	5	4	2	1.03149	96.625	1.2
87	1	0	6	1.02916	96.917	0.5
88	6	3	1	1.02916	96.917	0.5
89	6	1	3	1.00712	99.788	0.3
90	4	1	5	1.00575	99.973	0.1
91	5	2	4	0.99874	100.936	0.6
92	2	0	6	0.99717	101.155	1.6
93	0	2	6	0.99717	101.155	1.6
94	3	6	2	0.98898	102.316	2.1
95	0	7	1	0.98712	102.586	0.8
96	1	2	6	0.98712	102.586	0.8
97	1	7	1	0.97735	104.026	0.1
98	5	5	1	0.97735	104.026	0.1
99	6	4	0	0.97055	105.060	1.8
100	4	6	0	0.97055	105.060	1.8
101	4	4	4	0.96933	105.249	1.4
102	2	2	6	0.95894	106.890	0.8
103	7	0	2	0.95245	107.948	0.6
104	2	7	1	0.94950	108.441	0.1
105	6	0	4	0.93448	111.037	0.1
106	0	6	4	0.93380	111.159	0.1
107	0	5	5	0.93163	111.550	0.1
108	4	3	5	0.93163	111.550	0.1
109	6	4	2	0.92677	112.437	0.7
110	4	6	2	0.92677	112.437	0.7
111	1	6	4	0.92560	112.654	0.3
112	1	5	5	0.92319	113.104	0.1
113	5	1	5	0.92319	113.104	0.1
114	7	2	2	0.91897	113.905	1.0
115	3	2	6	0.91690	114.304	0.1
116	3	7	1	0.90863	115.937	0.1
117	2	6	4	0.90280	117.131	0.9
118	6	2	4	0.90280	117.131	0.9
119	2	5	5	0.90002	117.712	0.2
120	0	7	3	0.90002	117.712	0.2
121	5	4	4	0.89518	118.744	0.5
122	4	0	6	0.89425	118.947	1.2
123	0	4	6	0.89425	118.947	1.2
124	1	4	6	0.88678	120.603	0.5
125	6	5	1	0.88678	120.603	0.5
126	0	1	7	0.88450	121.124	0.1
127	1	1	7	0.87752	122.759	0.1
128	8	0	0	0.87515	123.331	0.4
129	0	8	0	0.87415	123.573	0.4
130	3	6	4	0.86697	125.370	1.0
131	2	4	6	0.86618	125.572	1.5
132	4	2	6	0.86618	125.572	1.5
133	5	6	2	0.86104	126.918	1.0
134	2	1	7	0.85755	127.861	0.1
135	8	2	0	0.84896	130.281	0.3
136	2	8	0	0.84811	130.530	0.3
137	6	1	5	0.84618	131.101	0.1
138	0	8	2	0.84176	132.443	0.4
139	7	0	4	0.84176	132.443	0.4
140	7	3	3	0.84075	132.754	0.1
141	3	7	3	0.84020	132.927	0.1
142	7	4	2	0.83639	134.140	1.0
143	1	8	2	0.83574	134.352	1.0
144	3	1	7	0.82698	137.327	0.1
145	1	3	7	0.82698	137.327	0.1
146	6	6	0	0.82463	138.171	1.6
147	4	6	4	0.82414	138.350	1.1
148	6	4	4	0.82414	138.350	1.1
149	6	5	3	0.82293	138.797	0.3
150	4	5	5	0.82218	139.074	0.1
151	7	2	4	0.81864	140.423	0.7
152	2	8	2	0.81864	140.423	0.7
153	8	3	1	0.81220	143.030	0.6
154	5	2	6	0.81220	143.030	0.6
155	2	3	7	0.81020	143.888	0.2
156	5	7	1	0.80644	145.562	0.1

Date: 22-Apr-16 Time: 4:34:45 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_580

User: Emyrean

157	7	5	1	0.80644	145.562	0.1
158	4	7	3	0.80059	148.377	0.2
159	6	3	5	0.80059	148.377	0.2

Stick Pattern

Date: 21-Apr-16 Time: 9:43:32 AM

File: HighScore Plus - 01-070-7345

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 01-077-8627
 Mineral name: Cristobalite, syn
 Compound name: Silicon Oxide
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Tetragonal
 Space group: P41212
 Space group number: 92
 a (Å): 4.9751
 b (Å): 4.9751
 c (Å): 6.9261
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000
 Volume of cell (10⁶ pm³): 171.43
 Z: 4.00
 RIR: 5.18

Status, subfiles and quality

Status: Alternate Pattern
 Subfiles: Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Common Phase, Forensic, ICSD Pattern, Inorganic, Mineral, Pharmaceutical
 Quality: Hypothetical (H)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 162615
 Creation Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:162615
 ANX: AX2
 Analysis: O2 Si1
 Formula from original source: Si O2
 ICSD Collection Code: 162615
 Hypothetical Structure: Structure calculated theoretically
 Calculated Pattern Original Remarks: DFT calculation within LDA; results of a GGA calculation are given in ICSD 162614
 Sample Source or Locality: theoretic
 Minor Warning: No e.s.d reported/abstracted on the cell dimension
 Wyckoff Sequence: b a (P41212)
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Demuth, T., Jeanvoine, Y., Hafner, J., Angyan, J.G., J. Phys.: Condens. Matter, **11**, 3833, (1999)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	0	1	4.04070	21.980	100.0
2	1	1	0	3.51793	25.296	0.6
3	1	1	1	3.13653	28.433	8.4
4	1	0	2	2.84227	31.449	10.3
5	2	0	0	2.48755	36.078	13.3
6	1	1	2	2.46792	36.375	4.5
7	2	0	1	2.34113	38.420	0.1

Date: 21-Apr-16 Time: 9:43:32 AM

File: HighScore Plus - 01-070-7345

User: Emyprean

8	2	1	0	2.22493	40.512	0.1
9	2	1	1	2.11832	42.647	2.4
10	1	0	3	2.09420	43.163	0.1
11	2	0	2	2.02035	44.825	2.6
12	1	1	3	1.93017	47.042	4.8
13	2	1	2	1.87189	48.599	5.0
14	2	2	0	1.75896	51.944	0.4
15	0	0	4	1.73152	52.830	0.7
16	2	2	1	1.70484	53.722	0.1
17	2	0	3	1.69220	54.156	2.4
18	1	0	4	1.63531	56.204	0.5
19	3	0	1	1.61278	57.060	3.9
20	2	1	3	1.60206	57.478	1.2
21	3	1	0	1.57326	58.631	0.4
22	2	2	2	1.56826	58.836	0.2
23	1	1	4	1.55354	59.450	0.1
24	3	1	1	1.53418	60.277	2.2
25	3	0	2	1.49571	61.996	2.4
26	3	1	2	1.43238	65.065	2.1
27	2	0	4	1.42114	65.644	1.2
28	2	2	3	1.39915	66.809	1.3
29	3	2	0	1.37984	67.870	0.1
30	2	1	4	1.36648	68.626	2.1
31	3	2	1	1.35325	69.392	0.8
32	3	0	3	1.34690	69.766	0.5
33	1	0	5	1.33446	70.513	1.6
34	3	1	3	1.30010	72.668	1.9
35	1	1	5	1.28890	73.402	0.1
36	3	2	2	1.28184	73.873	1.8
37	4	0	0	1.24378	76.533	0.1
38	2	2	4	1.23396	77.254	0.7
39	4	0	1	1.22419	77.987	1.0
40	2	0	5	1.21023	79.061	0.2
41	4	1	0	1.20664	79.343	1.3
42	3	0	4	1.19767	80.056	0.1
43	4	1	1	1.18873	80.782	0.2
44	3	2	3	1.18442	81.137	1.2
45	2	1	5	1.17594	81.847	1.3
46	3	3	0	1.17264	82.127	0.3
47	4	0	2	1.17057	82.303	0.3
48	3	1	4	1.16441	82.834	0.8
49	3	3	1	1.15619	83.555	0.4
50	4	1	2	1.13945	85.068	0.2
51	1	0	6	1.12448	86.475	0.1
52	3	3	2	1.11069	87.821	0.5
53	4	2	1	1.09839	89.063	1.0
54	1	1	6	1.09681	89.225	1.4
55	4	0	3	1.09498	89.414	0.4
56	2	2	5	1.08827	90.116	0.2
57	3	2	4	1.07911	91.094	0.3
58	4	1	3	1.06939	92.161	0.1
59	3	0	5	1.06313	92.864	0.1
60	4	2	2	1.05916	93.317	0.4
61	2	0	6	1.04710	94.724	0.1
62	3	3	3	1.04551	94.914	0.2
63	3	1	5	1.03966	95.619	0.2
64	2	1	6	1.02465	97.488	0.1
65	4	0	4	1.01017	99.378	0.1
66	4	2	3	1.00219	100.459	0.3
67	4	3	0	0.99502	101.457	0.4
68	4	1	4	0.98997	102.174	0.8
69	5	0	1	0.98491	102.907	0.4
70	3	2	5	0.97759	103.990	0.2
71	5	1	0	0.97570	104.275	0.1
72	3	3	4	0.97094	105.001	0.3
73	1	0	7	0.97094	105.001	0.3
74	5	1	1	0.96616	105.742	0.2
75	2	2	6	0.96508	105.911	0.1
76	5	0	2	0.95633	107.312	0.4
77	3	0	6	0.94742	108.789	0.2
78	5	1	2	0.93914	110.214	0.1
79	4	2	4	0.93594	110.776	0.1
80	3	1	6	0.93070	111.718	0.2

Date: 21-Apr-16 Time: 9:43:32 AM

File: HighScore Plus - 01-070-7345

User: Emyprean

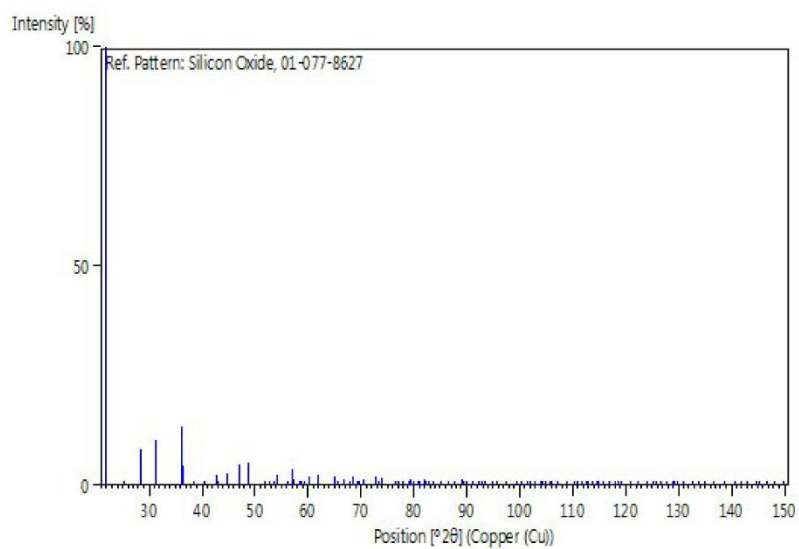
81	4	0	5	0.92546	112.680	0.1
82	5	2	0	0.92385	112.980	0.1
83	2	0	7	0.91938	113.826	0.1
84	5	2	1	0.91574	114.529	0.1
85	5	0	3	0.91377	114.915	0.5
86	4	1	5	0.90985	115.692	0.2
87	2	1	7	0.90408	116.866	0.5
88	5	1	3	0.89873	117.984	0.2
89	3	3	5	0.89501	118.782	0.1
90	5	2	2	0.89263	119.299	0.3
91	3	2	6	0.88538	120.922	0.2
92	4	4	0	0.87948	122.293	0.1
93	4	4	1	0.87248	123.986	0.1
94	4	2	5	0.86738	125.265	0.3
95	0	0	8	0.86576	125.680	0.1
96	5	0	4	0.86237	126.565	0.4
97	2	2	7	0.86237	126.565	0.4
98	5	2	3	0.85773	127.811	0.1
99	5	3	0	0.85322	129.060	0.2
100	1	0	8	0.85322	129.060	0.2
101	4	4	2	0.85242	129.287	0.3
102	3	0	7	0.85003	129.970	0.1
103	5	1	4	0.85003	129.970	0.1
104	5	3	1	0.84682	130.910	0.1
105	1	1	8	0.84068	132.777	0.1
106	3	1	7	0.83757	133.760	0.2
107	4	1	6	0.83412	134.882	0.1
108	6	0	0	0.82918	136.554	0.1
109	5	3	2	0.82845	136.810	0.1
110	6	0	1	0.82330	138.657	0.3
111	6	1	0	0.81790	140.712	0.4
112	2	0	8	0.81790	140.712	0.4
113	5	2	4	0.81509	141.834	0.1
114	6	1	1	0.81226	143.007	0.1
115	5	0	5	0.80814	144.795	0.2
116	6	0	2	0.80683	145.384	0.5
117	2	1	8	0.80683	145.384	0.5
118	3	2	7	0.80408	146.665	0.1
119	4	2	6	0.80103	148.156	0.2
120	5	1	5	0.79768	149.887	0.7

Stick Pattern

Date: 21-Apr-16 Time: 9:43:32 AM

File: HighScore Plus - 01-070-7345

User: Empeyan



Name and formula

Reference code:	01-076-9282
Mineral name:	Quartz, syn
Compound name:	Silicon Oxide
Common name:	α -Si O ₂ , Silicon dioxide
Empirical formula:	$^{\circ}_2\text{Si}$
Chemical formula:	SiO ₂

Crystallographic parameters

Crystal system:	Hexagonal
Space group:	P3221
Space group number:	154
a (Å):	4.9139
b (Å):	4.9139
c (Å):	5.4057
Alpha (°):	90.0000
Beta (°):	90.0000
Gamma (°):	120.0000
Volume of cell (10 ⁶ pm ³):	113.04
Z:	3.00
RIR:	3.09

Status, subfiles and quality

Status:	Alternate Pattern
Subfiles:	Alloy, metal or intermetallic
	Cement and Hydration Product
	Common Phase
	Forensic

Quality: ICSD Pattern
Inorganic
Mineral
Pharmaceutical
Indexed (I)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 173227
 Creation Date: 01-Sep-10
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:173227
 ANX: AX2
 Analysis: O2 Si1
 Formula from original source: Si O2
 ICSD Collection Code: 173227
 Calculated Pattern Original Remarks: Grain size 0.001-0.01 mm
 Sample Source or Locality: synthetic
 Minor Warning: No R factors reported/abstracted
 Wyckoff Sequence: c a (P3221)
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Nikitin, A.N., Markova, G.V., Balagurov, A.M., Vasin, R.N., Alekseeva, O.V., Kristallografiya **52** 450, (2007)

Peak list

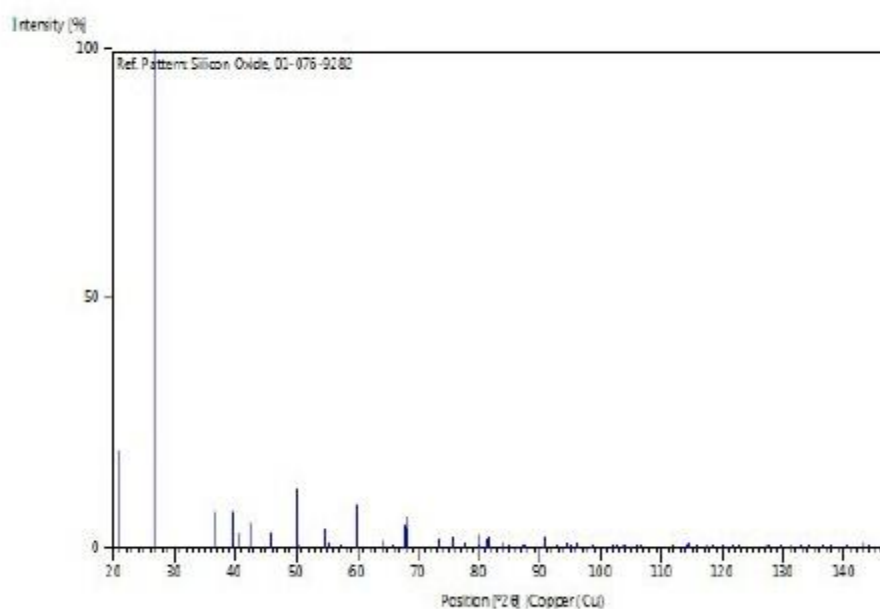
No.	h	k	l	d (Å)	2 θ (deg)	I (%)
1	1	0	0	4.25555	20.857	19.7
2	1	0	1	3.34375	26.638	100.0
3	1	1	0	2.45694	36.543	7.1
4	0	1	2	2.28167	39.464	7.2
5	1	1	1	2.23675	40.288	3.1
6	2	0	0	2.12778	42.449	5.1
7	0	2	1	1.97992	45.792	2.9
8	1	1	2	1.81806	50.136	11.9
9	0	0	3	1.80191	50.617	0.4
10	2	0	2	1.67188	54.870	3.6



11	1	0	3	1.65929	55.321	1.6
12	2	1	0	1.60845	57.228	0.2
13	2	1	1	1.54165	59.955	8.4
14	1	1	3	1.45303	64.029	1.6
15	3	0	0	1.41852	65.780	0.4
16	2	1	2	1.38222	67.737	5.0
17	0	2	3	1.37508	68.137	6.2
18	3	0	1	1.37206	68.308	4.0
19	0	1	4	1.28804	73.459	2.0
20	0	3	2	1.25605	75.653	2.4
21	2	2	0	1.22847	77.664	1.3
22	1	2	3	1.19993	79.875	2.6
23	2	2	1	1.19793	80.036	0.9
24	1	1	4	1.18412	81.162	2.1
25	3	1	0	1.18028	81.482	2.4
26	3	1	1	1.15311	83.829	1.5
27	0	2	4	1.14078	84.945	0.2
28	2	2	2	1.11838	87.065	0.1
29	0	3	3	1.11458	87.436	0.2
30	3	1	2	1.08165	90.821	2.3
31	4	0	0	1.06389	92.778	0.4
32	1	0	5	1.04786	94.634	1.2
33	0	4	1	1.04386	95.111	0.9
34	1	2	4	1.03469	96.228	1.2
35	2	2	3	1.01502	98.735	1.0
36	1	1	5	0.98957	102.231	0.9
37	0	4	2	0.98957	102.231	0.9
38	3	1	3	0.98733	102.555	0.5
39	3	0	4	0.97846	103.859	0.2
40	3	2	0	0.97629	104.185	0.6
41	2	0	5	0.96386	106.104	0.1
42	3	2	1	0.96075	106.599	1.2
43	4	1	0	0.92864	112.093	0.1
44	2	3	2	0.91823	114.048	0.4
45	0	4	3	0.91612	114.454	1.0
46	1	4	1	0.91523	114.628	1.2
47	2	2	4	0.90903	115.857	0.4
48	0	0	6	0.90095	117.516	0.1
49	2	1	5	0.89728	118.293	0.8
50	1	3	4	0.88897	120.110	0.7
51	0	1	6	0.88142	121.838	0.2
52	4	1	2	0.87825	122.586	0.5

53	0	3	5	0.85987	127.231	0.2
54	3	2	3	0.85839	127.630	0.1
55	5	0	0	0.85111	129.660	0.1
56	1	1	6	0.84588	131.191	0.2
57	5	0	1	0.84075	132.754	0.1
58	4	0	4	0.83594	134.286	0.1
59	2	0	6	0.82964	136.395	1.0
60	4	1	3	0.82546	137.869	1.2
61	3	3	0	0.81898	140.291	0.4
62	0	5	2	0.81181	143.195	1.4
63	2	2	5	0.81181	143.195	1.4
64	3	3	1	0.80974	144.087	0.5
65	4	2	0	0.80422	146.598	0.8

Stick Pattern



Date: 22-Apr-16 Time: 4:30:29 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_250

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 01-076-0938
 Compound name: Silicon Oxide
 Common name: Cristobalite low
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Tetragonal
 Space group: P41212
 Space group number: 92
 a (Å): 4.9898
 b (Å): 4.9898
 c (Å): 6.9920
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000
 Volume of cell (10⁶ pm³): 174.09
 Z: 4.00
 RIR: 5.06

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient temperature, Alternate Pattern
 Subfiles: Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Common Phase, Forensic, ICSD Pattern, Inorganic, Mineral, Pharmaceutical
 Quality: Indexed (I)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 34930
 Creation Date: 01-Sep-98
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:34930
 ANX: AX2
 Analysis: O2 Si1
 Formula from original source: Si O2
 ICSD Collection Code: 34930
 Calculated Pattern Original Remarks: Metastable up to 500 K (2nd ref. , Tomaszewski), above Fd3-m
 Sample Source or Locality: Specimen from Ellora Caves, India
 Temperature of Data Collection: 415 K
 Minor Warning: No e.s.d reported/abstracted on the cell dimension
 Wyckoff Sequence: b a(P41212)
 Unit Cell Data Source: Single Crystal.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++, (2004)
 Structure: Peacor, D.R., Z. Kristallogr., Kristallgeom., Kristallphys., Kristallchem., **138**, 274, (1973)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	0	1	4.06160	21.865	100.0
2	1	1	0	3.52832	25.221	0.5
3	1	1	1	3.14998	28.309	8.2
4	1	0	2	2.86319	31.214	9.7
5	2	0	0	2.49490	35.968	12.8
6	1	1	2	2.48339	36.140	5.4

Date: 22-Apr-16 Time: 4:30:29 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_250

User: Emyprean

7	2	0	1	2.34979	38.273	0.1
8	2	1	0	2.23151	40.387	0.1
9	2	1	1	2.12586	42.489	2.6
10	1	0	3	2.11167	42.788	0.2
11	2	0	2	2.03080	44.582	2.5
12	1	1	3	1.94470	46.669	4.6
13	2	1	2	1.88098	48.349	4.7
14	2	2	0	1.76416	51.779	0.4
15	0	0	4	1.74800	52.294	0.7
16	2	2	1	1.71055	53.529	0.1
17	2	0	3	1.70313	53.781	2.2
18	1	0	4	1.64970	55.671	0.5
19	3	0	1	1.61811	56.855	3.5
20	2	1	3	1.61183	57.097	1.6
21	3	1	0	1.57791	58.442	0.3
22	2	2	2	1.57499	58.561	0.3
23	1	1	4	1.56632	58.916	0.1
24	3	1	1	1.53920	60.060	2.3
25	3	0	2	1.50195	61.710	2.3
26	3	1	2	1.43821	64.769	2.5
27	2	0	4	1.43159	65.105	1.4
28	2	2	3	1.40663	66.408	1.3
29	3	2	0	1.38392	67.643	0.1
30	2	1	4	1.37608	68.081	2.1
31	3	2	1	1.35758	69.139	1.0
32	3	0	3	1.35387	69.356	0.7
33	1	0	5	1.34652	69.789	1.5
34	3	1	3	1.30662	72.248	1.8
35	1	1	5	1.30002	72.673	0.1
36	3	2	2	1.28677	73.544	1.8
37	4	0	0	1.24745	76.267	0.1
38	2	2	4	1.24170	76.685	0.8
39	4	0	1	1.22806	77.695	1.0
40	2	0	5	1.21985	78.317	0.1
41	4	1	0	1.21020	79.063	1.4
42	3	0	4	1.20495	79.476	0.1
43	4	1	1	1.19247	80.477	0.2
44	3	2	3	1.18995	80.682	1.2
45	2	1	5	1.18495	81.094	1.3
46	3	3	0	1.17611	81.832	0.3
47	4	0	2	1.17490	81.935	0.3
48	3	1	4	1.17128	82.243	0.6
49	3	3	1	1.15981	83.236	0.4
50	4	1	2	1.14362	84.685	0.2
51	4	2	0	1.11472	87.423	0.4
52	3	3	2	1.11472	87.423	0.4
53	1	1	6	1.10654	88.235	1.2
54	4	2	1	1.10181	88.713	0.9
55	4	0	3	1.09982	88.916	0.3
56	2	2	5	1.09587	89.322	0.2
57	3	2	4	1.08503	90.459	0.2
58	4	1	3	1.07404	91.647	0.1
59	3	0	5	1.07036	92.053	0.1
60	4	2	2	1.06293	92.887	0.4
61	2	0	6	1.05584	93.699	0.1
62	3	3	3	1.04999	94.382	0.2
63	3	1	5	1.04656	94.789	0.3
64	2	1	6	1.03296	96.442	0.1
65	4	0	4	1.01540	98.685	0.1
66	4	2	3	1.00638	99.888	0.3
67	4	3	0	0.99796	101.045	0.4
68	4	1	4	0.99501	101.459	0.8
69	5	0	1	0.98795	102.465	0.3
70	3	2	5	0.98366	103.090	0.1
71	1	0	7	0.97943	103.716	0.2
72	3	3	4	0.97580	104.260	0.2
73	2	2	6	0.97235	104.784	0.1
74	5	1	1	0.96913	105.279	0.3
75	5	0	2	0.95963	106.779	0.4
76	3	0	6	0.95440	107.628	0.2
77	5	1	2	0.94236	109.654	0.1
78	4	2	4	0.94049	109.977	0.1
79	3	1	6	0.93740	110.518	0.2

Date: 22-Apr-16 Time: 4:30:29 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_250

User: Emyprean

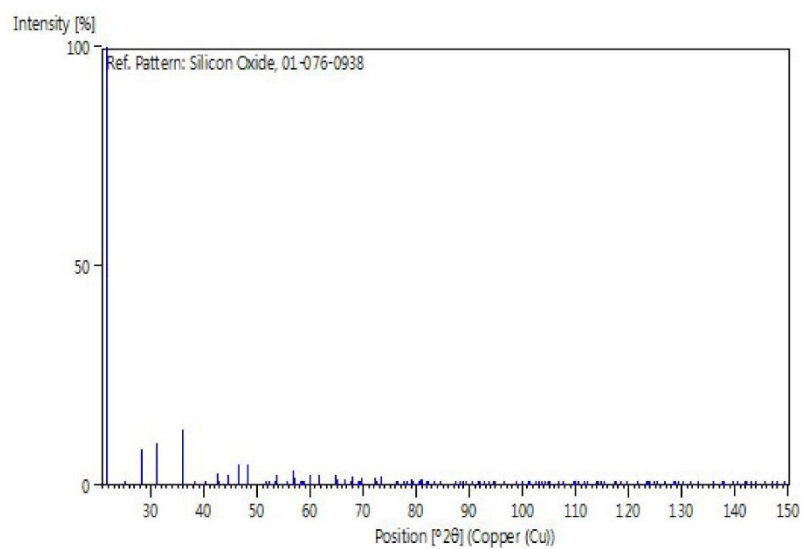
80	4	0	5	0.93089	111.683	0.1
81	2	0	7	0.92730	112.339	0.1
82	5	2	0	0.92730	112.339	0.1
83	5	2	1	0.91855	113.985	0.1
84	5	0	3	0.91740	114.208	0.4
85	4	1	5	0.91510	114.654	0.1
86	2	1	7	0.91169	115.325	0.4
87	5	1	3	0.90228	117.239	0.2
88	3	3	5	0.90009	117.697	0.1
89	5	2	2	0.89566	118.641	0.3
90	3	2	6	0.89140	119.570	0.3
91	4	4	0	0.88208	121.683	0.1
92	4	4	1	0.87514	123.332	0.1
93	0	0	8	0.87400	123.611	0.1
94	4	2	5	0.87216	124.064	0.2
95	2	2	7	0.86920	124.802	0.2
96	4	3	4	0.86666	125.448	0.2
97	5	2	3	0.86103	126.920	0.1
98	1	0	8	0.86103	126.920	0.1
99	4	4	2	0.85528	128.486	0.3
100	5	3	0	0.85528	128.486	0.3
101	5	1	4	0.85388	128.875	0.1
102	4	0	6	0.85157	129.530	0.1
103	5	3	1	0.84941	130.152	0.1
104	3	1	7	0.84397	131.765	0.1
105	4	1	6	0.83943	133.168	0.1
106	6	0	0	0.83120	135.860	0.1
107	5	3	2	0.83120	135.860	0.1
108	6	0	1	0.82581	137.744	0.3
109	4	4	3	0.82485	138.091	0.2
110	2	0	8	0.82485	138.091	0.2
111	6	1	0	0.82032	139.777	0.4
112	5	2	4	0.81868	140.409	0.1
113	6	1	1	0.81473	141.981	0.1
114	2	1	8	0.81381	142.360	0.4
115	4	3	5	0.81232	142.981	0.2
116	3	2	7	0.80993	144.004	0.1
117	4	2	6	0.80591	145.806	0.2
118	5	3	3	0.80331	147.036	0.1
119	5	1	5	0.80177	147.790	0.6
120	6	1	2	0.79863	149.388	0.1

Stick Pattern

Date: 22-Apr-16 Time: 4:30:29 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_250

User: Emyrean



Date: 22-Apr-16 Time: 4:32:47 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Empyrean

Name and formula

Reference code: 01-073-1942
 Compound name: Calcium Sulfate
 Common name: hexagonal anhydrite, γ -Ca S O4
 Empirical formula: CaO_4S
 Chemical formula: CaSO_4

Crystallographic parameters

Crystal system: Hexagonal
 Space group: P6222
 Space group number: 180
 a (Å): 6.9900
 b (Å): 6.9900
 c (Å): 6.3400
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 120.0000
 Volume of cell (10^6 pm^3): 268.27
 Z: 3.00
 RIR: 3.42

Status, subfiles and quality

Status: Alternate Pattern
 Subfiles: Pharmaceutical, Inorganic, Mineral, Ceramic, ICSD Pattern
 Quality: Indexed (I)

Comments

ANX: ABX4
 ICSD collection code: 24473
 Creation Date: 01-Sep-98
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:24473
 ANX: ABX4
 Analysis: Ca1 O4 S1
 Formula from original source: Ca S O4
 ICSD Collection Code: 24473
 Minor Warning: No e.s.d reported/abstracted on the cell dimension. No R factors reported/abstracted
 Wyckoff Sequence: k d c(P6222)
 Unit Cell Data Source: Single Crystal.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++, (1997)
 Structure: Floerke, O.W., Neues Jahrb. Mineral., Abh., **84**, 189, (1952)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	0	0	6.05352	14.621	100.0
2	1	0	1	4.37826	20.266	0.9
3	1	1	0	3.49500	25.465	15.5
4	1	1	1	3.06074	29.153	6.3
5	2	0	0	3.02676	29.487	47.1
6	1	0	2	2.80826	31.840	52.4
7	2	0	1	2.73145	32.761	5.6
8	1	1	2	2.34804	38.302	5.0
9	2	1	0	2.28801	39.348	0.1
10	2	0	2	2.18913	41.204	5.1

Date: 22-Apr-16 Time: 4:32:47 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Emyprean

11	2	1	1	2.15216	41.945	4.3
12	0	0	3	2.11333	42.753	4.0
13	3	0	0	2.01784	44.884	3.5
14	1	0	3	1.99524	45.420	1.0
15	3	0	1	1.92280	47.233	6.1
16	2	1	2	1.85524	49.064	23.2
17	1	1	3	1.80843	50.421	0.3
18	2	2	0	1.74750	52.310	4.5
19	2	0	3	1.73276	52.789	0.1
20	3	0	2	1.70224	53.811	14.4
21	2	2	1	1.68468	54.418	1.4
22	3	1	0	1.67894	54.620	2.6
23	3	1	1	1.62300	56.668	0.6
24	2	1	3	1.55244	59.496	1.8
25	1	0	4	1.53331	60.315	1.6
26	2	2	2	1.53037	60.443	0.5
27	4	0	0	1.51338	61.193	3.5
28	3	1	2	1.48369	62.554	5.6
29	4	0	1	1.47202	63.107	0.3
30	3	0	3	1.45942	63.715	0.2
31	1	1	4	1.44350	64.502	2.1
32	2	0	4	1.40413	66.541	0.1
33	3	2	0	1.38877	67.375	0.8
34	4	0	2	1.36573	68.669	0.1
35	3	2	1	1.35661	69.196	0.9
36	2	2	3	1.34672	69.777	0.1
37	4	1	0	1.32099	71.341	0.1
38	3	1	3	1.31458	71.743	0.2
39	2	1	4	1.30291	72.486	5.7
40	4	1	1	1.29321	73.118	0.2
41	3	2	2	1.27205	74.538	3.1
42	3	0	4	1.24645	76.340	3.5
43	1	0	5	1.24107	76.731	0.3
44	4	0	3	1.23042	77.518	0.1
45	4	1	2	1.21935	78.356	3.2
46	5	0	0	1.21070	79.024	0.5
47	1	1	5	1.19198	80.517	0.1
48	5	0	1	1.18921	80.743	0.1
49	2	2	4	1.17402	82.009	0.2
50	2	0	5	1.16952	82.393	0.3
51	3	3	0	1.16500	82.783	0.3
52	3	2	3	1.16060	83.167	0.1
53	3	1	4	1.15255	83.879	3.4
54	4	2	0	1.14401	84.650	3.7
55	5	0	2	1.13102	85.854	0.5
56	4	2	1	1.12583	86.346	0.1
57	4	1	3	1.12016	86.892	0.4
58	2	1	5	1.10907	87.982	0.1
59	3	3	2	1.09349	89.569	1.5
60	5	1	0	1.08724	90.224	0.6
61	4	2	2	1.07608	91.424	0.1
62	3	0	5	1.07362	91.693	0.1
63	5	1	1	1.07160	91.916	0.1
64	0	0	6	1.05667	93.603	0.5
65	5	0	3	1.05052	94.320	0.1
66	3	2	4	1.04454	95.030	1.6
67	1	0	6	1.04093	95.465	0.3
68	5	1	2	1.02844	97.007	2.2
69	3	3	3	1.02025	98.053	0.1
70	4	1	4	1.01476	98.769	1.0
71	3	1	5	1.01145	99.207	0.3
72	1	1	6	1.01145	99.207	0.3
73	6	0	0	1.00892	99.545	1.0
74	4	2	3	1.00606	99.931	0.3
75	2	0	6	0.99762	101.092	1.5
76	4	3	0	0.99519	101.433	0.3
77	4	3	1	0.98315	103.164	0.1
78	4	0	5	0.97194	104.847	0.1
79	5	2	0	0.96934	105.247	0.3
80	5	1	3	0.96680	105.642	0.1
81	6	0	2	0.96213	106.379	0.4
82	5	0	4	0.96213	106.379	0.4
83	2	1	6	0.95930	106.831	0.4

Date: 22-Apr-16 Time: 4:32:47 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Emyprean

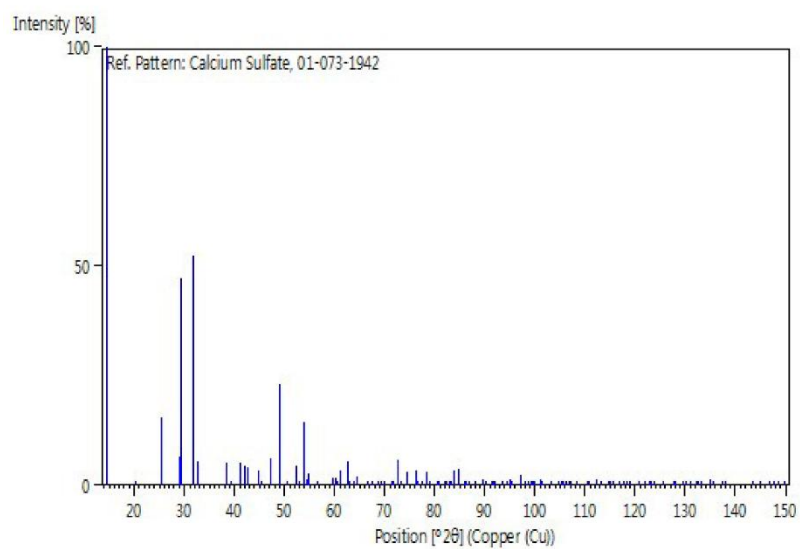
84	5	2	1	0.95820	107.008	0.2
85	4	3	2	0.94950	108.440	1.0
86	3	3	4	0.93871	110.289	0.5
87	3	0	6	0.93608	110.751	0.2
88	3	2	5	0.93608	110.751	0.2
89	5	2	2	0.92697	112.400	1.3
90	4	2	4	0.92697	112.400	1.3
91	6	1	0	0.92315	113.111	0.2
92	4	1	5	0.91477	114.718	0.1
93	6	1	1	0.91352	114.964	0.1
94	6	0	3	0.91048	115.566	0.1
95	2	2	6	0.90421	116.837	1.0
96	4	3	3	0.90036	117.641	0.1
97	5	1	4	0.89658	118.443	0.9
98	3	1	6	0.89429	118.937	0.3
99	6	1	2	0.88633	120.705	1.2
100	5	2	3	0.88108	121.917	0.1
101	1	1	7	0.87675	122.943	0.1
102	5	0	5	0.87565	123.209	0.1
103	4	4	0	0.87375	123.672	0.5
104	4	0	6	0.86638	125.521	1.0
105	3	3	5	0.85789	127.768	0.1
106	7	0	1	0.85685	128.050	0.1
107	6	0	4	0.85112	129.658	0.1
108	4	2	5	0.84940	130.154	0.1
109	6	1	3	0.84596	131.165	0.1
110	4	3	4	0.84283	132.113	0.8
111	4	4	2	0.84283	132.113	0.8
112	3	2	6	0.84093	132.699	0.3
113	6	2	0	0.83947	133.155	0.9
114	5	3	2	0.83430	134.823	1.2
115	6	2	1	0.83221	135.521	0.1
116	5	2	4	0.82695	137.338	0.8
117	4	1	6	0.82537	137.902	0.4
118	5	1	5	0.82537	137.902	0.4
119	6	2	2	0.81150	143.329	0.1
120	4	4	3	0.80746	145.100	0.1
121	2	2	7	0.80413	146.644	0.1
122	7	1	0	0.80181	147.768	0.3
123	7	0	3	0.80037	148.489	0.3
124	6	1	4	0.79771	149.871	1.0

Stick Pattern

Date: 22-Apr-16 Time: 4:32:47 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Empeyan



Date: 22-Apr-16 Time: 4:28:24 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_250

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 01-071-6246
 Compound name: Silicon Oxide
 Common name: cristobalite- β high
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic
 Space group: Fd-3m
 Space group number: 227
 a (Å): 7.1264
 b (Å): 7.1264
 c (Å): 7.1264
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000
 Volume of cell (10⁶ pm³): 361.91
 Z: 8.00
 RIR: 5.46

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient temperature
 Subfiles: Alloy, metal or intermetallic, Forensic, ICSD Pattern, Inorganic, Mineral, Pharmaceutical
 Quality: Star (S)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 77461
 Creation Date: 01-Sep-05
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:77461
 ANX: AX2
 ICSD Collection Code: 77461
 Calculated Pattern Original Remarks: Mean Si-O: 1.60, Si-O-Si: 150.0, for ideal model cp. 77458. Temperature of Data Collection: 573 K. Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Schmahl, W.W., Swainson, I.P., Dove, M.T., Graeme-Barber, A., Z. Kristallogr., **201**, 125, (1992)

Peak list

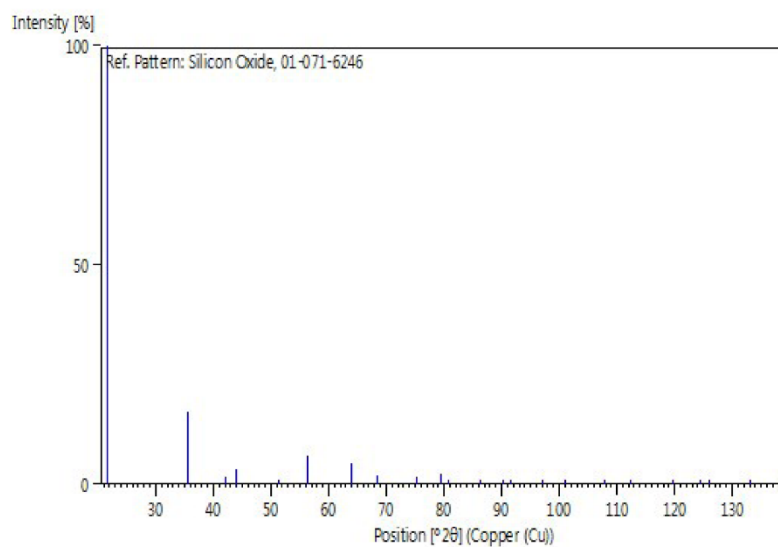
No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	1	1	4.11441	21.581	100.0
2	2	2	0	2.51955	35.604	16.4
3	3	1	1	2.14868	42.016	1.6
4	2	2	2	2.05721	43.979	3.4
5	4	0	0	1.78159	51.236	0.5
6	3	3	1	1.63490	56.219	6.3
7	4	2	2	1.45466	63.949	4.8
8	5	1	1	1.37147	68.341	1.9
9	4	4	0	1.25978	75.390	1.5
10	5	3	1	1.20458	79.505	2.3
11	4	4	2	1.18773	80.864	0.1
12	6	2	0	1.12678	86.256	1.2
13	5	3	3	1.08676	90.275	0.2

Date: 22-Apr-16 Time: 4:28:24 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_250

User: Emyrean

14	6	2	2	1.07434	91.614	0.1
15	4	4	4	1.02860	96.987	0.1
16	7	1	1	0.99789	101.054	0.4
17	6	4	2	0.95230	107.974	0.6
18	7	3	1	0.92777	112.252	0.5
19	8	0	0	0.89080	119.704	0.1
20	7	3	3	0.87063	124.445	0.1
21	6	4	4	0.86420	126.085	0.1
22	8	2	2	0.83985	133.036	0.2
23	7	5	1	0.82288	138.813	0.2

Stick Pattern

Date: 22-Apr-16 Time: 4:24:41 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_150

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 01-071-6244
 Compound name: Silicon Oxide
 Common name: cristobalite- α high
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Tetragonal
 Space group: P41212
 Space group number: 92
 a (Å): 4.9829
 b (Å): 4.9829
 c (Å): 6.9633
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000
 Volume of cell (10⁶ pm³): 172.89
 Z: 4.00
 RIR: 5.03

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient temperature, Alternate Pattern
 Subfiles: Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Common Phase, Forensic, ICSD Pattern, Inorganic, Mineral, Pharmaceutical, Pigment/Dye
 Quality: Star (S)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 77456
 Creation Date: 01-Sep-05
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:77456
 ANX: AX2
 ICSD Collection Code: 77456
 Calculated Pattern Original Remarks: Cell at 463 K: 4.9849, 6.9615. Mean Si-O: 1.596, Si-O-Si: 147.9. Temperature of Data Collection: 458 K. Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Schmahl, W.W., Swainson, I.P., Dove, M.T., Graeme-Barber, A., Z. Kristallogr., **201**, 125, (1992)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	0	1	4.05222	21.916	100.0
2	1	1	0	3.52342	25.256	0.5
3	1	1	1	3.14386	28.366	7.6
4	1	0	2	2.85398	31.317	8.9
5	2	0	0	2.49144	36.019	12.1
6	1	1	2	2.47653	36.244	5.4
7	2	0	1	2.34580	38.340	0.2
8	2	1	0	2.22841	40.446	0.1
9	2	1	1	2.12237	42.562	2.5
10	1	0	3	2.10401	42.952	0.2
11	2	0	2	2.02611	44.690	2.4
12	1	1	3	1.93830	46.833	4.0

Date: 22-Apr-16 Time: 4:24:41 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_150

User: Emyprean

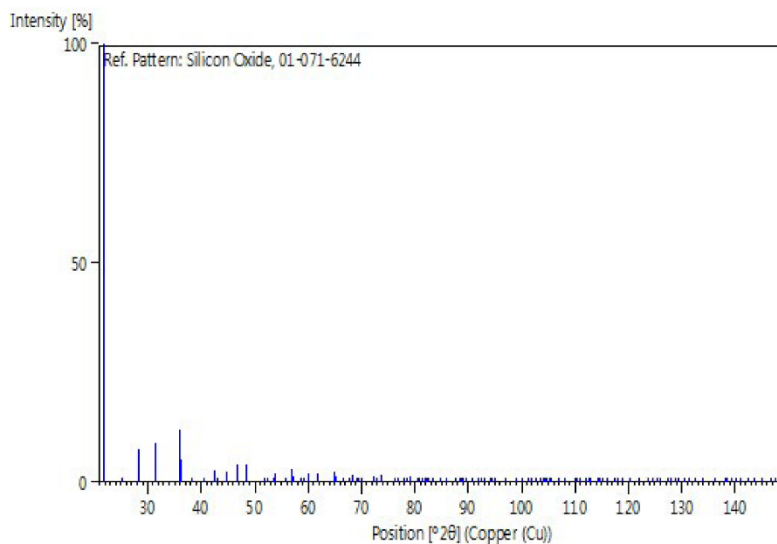
13	2	1	2	1.87688	48.462	4.2
14	2	2	0	1.76171	51.856	0.4
15	0	0	4	1.74081	52.526	0.6
16	2	2	1	1.70790	53.618	0.1
17	2	0	3	1.69829	53.946	1.9
18	1	0	4	1.64341	55.902	0.4
19	3	0	1	1.61563	56.951	3.2
20	2	1	3	1.60749	57.266	1.6
21	3	1	0	1.57572	58.531	0.3
22	2	2	2	1.57193	58.686	0.3
23	1	1	4	1.56072	59.149	0.1
24	3	1	1	1.53686	60.161	2.0
25	3	0	2	1.49910	61.840	2.0
26	3	1	2	1.43554	64.904	2.4
27	2	0	4	1.42699	65.341	1.2
28	2	2	3	1.40328	66.587	1.1
29	3	2	0	1.38200	67.750	0.1
30	2	1	4	1.37184	68.320	1.7
31	3	2	1	1.35556	69.257	0.9
32	3	0	3	1.35074	69.539	0.6
33	1	0	5	1.34125	70.103	1.1
34	3	1	3	1.30369	72.436	1.3
35	1	1	5	1.29515	72.991	0.1
36	3	2	2	1.28450	73.695	1.5
37	4	0	0	1.24572	76.392	0.1
38	2	2	4	1.23826	76.937	0.7
39	4	0	1	1.22625	77.831	0.9
40	2	0	5	1.21563	78.642	0.1
41	4	1	0	1.20852	79.195	1.2
42	4	1	1	1.19072	80.619	0.1
43	3	2	3	1.18745	80.887	1.1
44	2	1	5	1.18099	81.423	1.0
45	3	3	0	1.17447	81.971	0.2
46	4	0	2	1.17290	82.105	0.2
47	3	1	4	1.16822	82.505	0.5
48	3	3	1	1.15812	83.384	0.3
49	4	1	2	1.14170	84.861	0.2
50	1	0	6	1.13029	85.923	0.1
51	3	3	2	1.11286	87.606	0.4
52	1	1	6	1.10229	88.664	0.9
53	4	2	1	1.10021	88.876	0.8
54	4	0	3	1.09763	89.141	0.2
55	2	2	5	1.09252	89.670	0.1
56	3	2	4	1.08238	90.742	0.2
57	4	1	3	1.07193	91.880	0.1
58	3	0	5	1.06717	92.409	0.1
59	4	2	2	1.06119	93.085	0.3
60	2	0	6	1.05201	94.145	0.1
61	3	3	3	1.04795	94.623	0.1
62	3	1	5	1.04350	95.155	0.2
63	2	1	6	1.02932	96.897	0.1
64	4	0	4	1.01305	98.995	0.1
65	4	2	3	1.00447	100.147	0.2
66	4	3	0	0.99657	101.239	0.3
67	4	1	4	0.99274	101.779	0.6
68	4	3	1	0.98652	102.672	0.3
69	3	2	5	0.98097	103.487	0.1
70	5	1	0	0.97722	104.045	0.1
71	1	0	7	0.97550	104.305	0.1
72	3	3	4	0.97361	104.592	0.1
73	2	2	6	0.96915	105.276	0.1
74	5	1	1	0.96774	105.496	0.2
75	5	0	2	0.95810	107.025	0.3
76	3	0	6	0.95132	108.136	0.1
77	5	1	2	0.94086	109.913	0.1
78	4	2	4	0.93844	110.336	0.1
79	3	1	6	0.93445	111.043	0.1
80	4	0	5	0.92847	112.124	0.1
81	5	2	0	0.92530	112.711	0.1
82	2	0	7	0.92383	112.983	0.1
83	5	2	1	0.91723	114.240	0.1
84	4	3	3	0.91574	114.530	0.3
85	4	1	5	0.91276	115.113	0.1

Date: 22-Apr-16 Time: 4:24:41 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_150

User: Emyprean

86	2	1	7	0.90835	115.993	0.3
87	5	1	3	0.90065	117.579	0.1
88	3	3	5	0.89782	118.177	0.1
89	5	2	2	0.89425	118.946	0.3
90	3	2	6	0.88874	120.162	0.2
91	4	4	0	0.88086	121.969	0.1
92	4	4	1	0.87389	123.638	0.1
93	0	0	8	0.87002	124.597	0.1
94	4	2	5	0.87002	124.597	0.1
95	2	2	7	0.86620	125.566	0.1
96	5	0	4	0.86488	125.909	0.2
97	5	2	3	0.85952	127.326	0.1
98	1	0	8	0.85742	127.894	0.1
99	5	3	0	0.85456	128.686	0.2
100	3	0	7	0.85395	128.856	0.2
101	4	4	2	0.85395	128.856	0.2
102	5	1	4	0.85214	129.368	0.1
103	5	3	1	0.84819	130.506	0.1
104	1	1	8	0.84500	131.453	0.1
105	3	1	7	0.84116	132.628	0.1
106	4	1	6	0.83708	133.918	0.1
107	5	3	2	0.82992	136.299	0.1
108	6	0	0	0.82992	136.299	0.1
109	6	0	1	0.82463	138.170	0.2
110	4	4	3	0.82354	138.568	0.1
111	2	0	8	0.82170	139.252	0.1
112	6	1	0	0.81918	140.214	0.3
113	5	2	4	0.81705	141.049	0.1
114	6	1	1	0.81357	142.459	0.1
115	2	1	8	0.81075	143.648	0.2
116	4	3	5	0.81075	143.648	0.2
117	3	2	7	0.80735	145.147	0.1
118	6	0	2	0.80735	145.147	0.1
119	4	2	6	0.80374	146.827	0.1
120	5	3	3	0.80193	147.708	0.1
121	5	1	5	0.79993	148.712	0.4

Stick Pattern

Date: 22-Apr-16 Time: 4:34:17 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_580

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 01-070-8055
 Compound name: Silicon Oxide
 Common name: quartz- β high
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Hexagonal
 Space group: P6422
 Space group number: 181
 a (Å): 4.9965
 b (Å): 4.9965
 c (Å): 5.4543
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 120.0000
 Volume of cell (10⁶ pm³): 117.92
 Z: 3.00
 RIR: 4.32

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient temperature
 Subfiles: Inorganic, Mineral, Alloy, metal or intermetallic, ICSD Pattern
 Quality: Star (S)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 093975
 Creation Date: 01-Sep-05
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:093975
 ANX: AX2
 Analysis: O2 Si1
 Formula from original source: Si O2
 ICSD Collection Code: 093975
 Calculated Pattern Original Remarks: Stable from 846 to 1143 K (2nd ref. , Tomaszewski), below P3121
 Temperature of Data Collection: 1073 K
 Wyckoff Sequence: j c(P6422)
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Tucker, M.G., Keen, D.A., Dove, M.T., Mineral. Mag., **65**, 489, (2001)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	0	0	4.32710	20.509	19.9
2	1	0	1	3.38988	26.269	100.0
3	1	1	0	2.49825	35.918	4.1
4	1	0	2	2.30716	39.008	1.4
5	1	1	1	2.27133	39.649	0.1
6	2	0	0	2.16355	41.714	3.8
7	2	0	1	2.01111	45.042	3.2
8	1	1	2	1.84215	49.436	13.9
9	0	0	3	1.81810	50.135	0.1

Date: 22-Apr-16 Time: 4:34:17 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_580

User: Emyprean

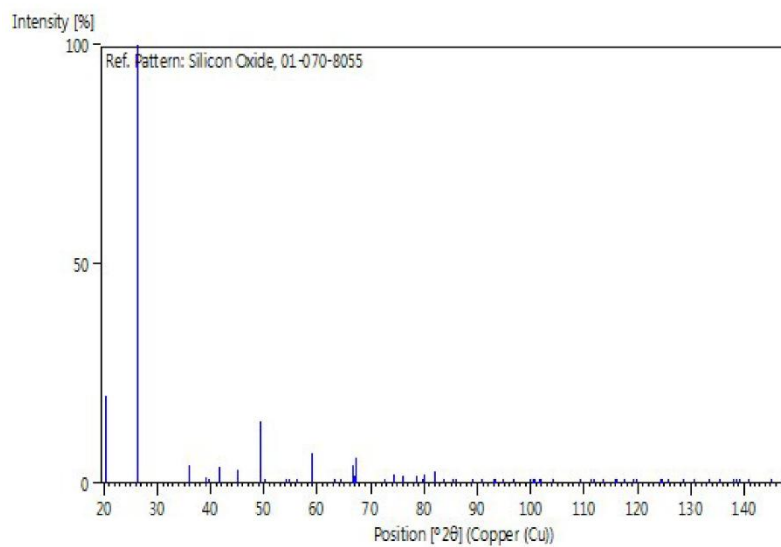
10	2	0	2	1.69494	54.062	0.8
11	1	0	3	1.67616	54.718	0.5
12	2	1	0	1.63549	56.197	0.1
13	2	1	1	1.56658	58.906	6.9
14	1	1	3	1.47003	63.202	0.4
15	3	0	0	1.44237	64.559	0.8
16	2	1	2	1.40260	66.623	4.0
17	3	0	1	1.39443	67.065	1.7
18	2	0	3	1.39190	67.203	6.0
19	1	0	4	1.30053	72.640	0.8
20	3	0	2	1.27502	74.335	2.1
21	2	2	0	1.24913	76.147	1.6
22	2	1	3	1.21592	78.619	1.7
23	3	1	0	1.20012	79.860	0.6
24	1	1	4	1.19690	80.118	1.9
25	3	1	1	1.17208	82.174	2.5
26	2	0	4	1.15358	83.787	0.1
27	2	2	2	1.13566	85.419	0.1
28	3	0	3	1.12996	85.954	0.1
29	3	1	2	1.09846	89.055	0.9
30	4	0	0	1.08177	90.808	0.7
31	4	0	1	1.06111	93.094	0.1
32	1	0	5	1.05776	93.477	0.8
33	2	1	4	1.04732	94.698	0.6
34	2	2	3	1.02955	96.868	0.6
35	4	0	2	1.00555	100.001	0.1
36	3	1	3	1.00159	100.542	0.1
37	1	1	5	0.99971	100.802	0.2
38	3	2	0	0.99270	101.784	0.2
39	3	0	4	0.99088	102.045	0.3
40	3	2	1	0.97666	104.130	0.7
41	4	1	0	0.94425	109.329	0.1
42	3	2	2	0.93283	111.333	0.5
43	4	1	1	0.93041	111.770	0.7
44	4	0	3	0.92966	111.907	0.6
45	2	2	4	0.92107	113.504	0.1
46	0	0	6	0.90905	115.853	0.2
47	2	1	5	0.90751	116.163	0.4
48	3	1	4	0.90089	117.529	0.3
49	4	1	2	0.89228	119.377	0.5
50	1	0	6	0.88963	119.963	0.1
51	3	2	3	0.87129	124.281	0.1
52	3	0	5	0.87005	124.589	0.1
53	5	0	0	0.86542	125.769	0.1
54	5	0	1	0.85473	128.638	0.3
55	1	1	6	0.85473	128.638	0.3
56	4	0	4	0.84747	130.718	0.1
57	2	0	6	0.83808	133.597	0.4
58	4	1	3	0.83808	133.597	0.4
59	3	3	0	0.83275	135.339	0.1
60	5	0	2	0.82488	138.080	0.2
61	3	3	1	0.82321	138.692	0.1
62	2	2	5	0.82165	139.273	0.1
63	4	2	0	0.81774	140.774	0.4
64	3	1	5	0.80722	145.206	0.6
65	3	2	4	0.80255	147.403	0.7

Stick Pattern

Date: 22-Apr-16 Time: 4:34:17 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_580

User: Emyrean



Date: 21-Apr-16 Time: 9:42:07 AM

File: HighScore Plus - 01-070-7345

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 01-070-7345
 Mineral name: Quartz
 Compound name: Silicon Oxide
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Hexagonal
 Space group: P3221
 Space group number: 154
 a (Å): 4.9148
 b (Å): 4.9148
 c (Å): 5.4067
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 120.0000
 Volume of cell (10⁶ pm³): 113.10
 Z: 3.00
 RIR: 3.06

Status, subfiles and quality

Status: Alternate Pattern
 Subfiles: Alloy, metal or intermetallic, Cement and Hydration Product, Common Phase, Forensic, ICSD Pattern, Inorganic, Mineral, Pharmaceutical
 Quality: Indexed (I)

Comments

ANX: AX2
 ICSD collection code: 093094
 Creation Date: 01-Sep-05
 Modification Date: 01-Sep-11
 Cross-References: ICSD:093094
 ANX: AX2
 Analysis: O2 Si1
 Formula from original source: Si O2
 ICSD Collection Code: 093094
 Calculated Pattern Original Remarks: Stable up to 846 K, above P6222, above 1143 K tridymite is stable
 Minor Warning: 10%<R factor<15% (for powder)
 Wyckoff Sequence: c a(P3221)
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Calculated from ICSD using POWD-12++
 Structure: Dusek, M., Petricek, V., Wunschel, M., Dinnebier, R.E., van Smaalen, S., J. Appl. Crystallogr., **34**, 398, (2001)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	0	0	4.25633	20.853	17.6
2	0	1	1	3.34437	26.633	100.0
3	1	1	0	2.45740	36.536	8.0
4	0	1	2	2.28199	39.456	7.3
5	1	1	1	2.23716	40.281	2.8
6	2	0	0	2.12817	42.440	5.0
7	0	2	1	1.98028	45.783	2.5
8	1	1	2	1.81840	50.126	12.6

Date: 21-Apr-16 Time: 9:42:07 AM

File: HighScore Plus - 01-070-7345

User: Emyprean

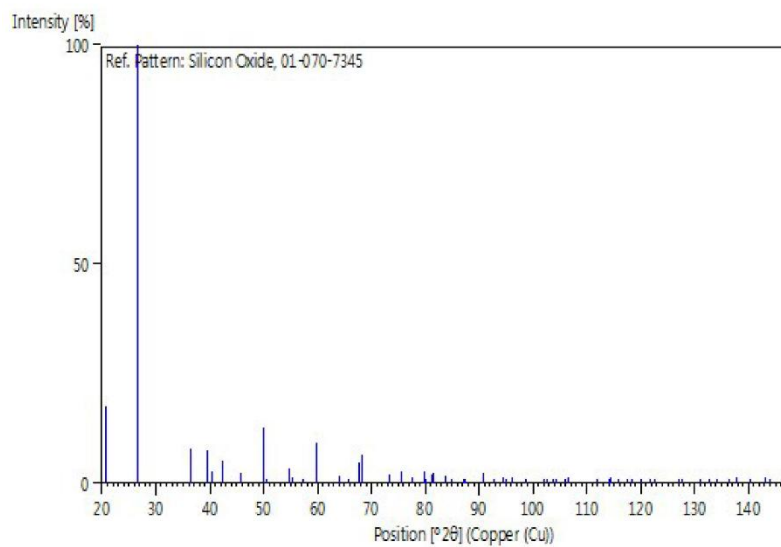
9	0	0	3	1.80224	50.607	0.4
10	0	2	2	1.67219	54.858	3.4
11	0	1	3	1.65960	55.310	1.5
12	2	1	0	1.60874	57.217	0.2
13	1	2	1	1.54193	59.943	9.1
14	1	1	3	1.45329	64.016	1.6
15	3	0	0	1.41878	65.767	0.3
16	1	2	2	1.38247	67.723	5.0
17	2	0	3	1.37533	68.123	6.6
18	0	3	1	1.37232	68.293	4.0
19	1	0	4	1.28828	73.443	2.0
20	0	3	2	1.25628	75.637	2.6
21	2	2	0	1.22870	77.647	1.4
22	2	1	3	1.20016	79.857	2.6
23	2	2	1	1.19815	80.018	1.0
24	1	1	4	1.18434	81.144	2.2
25	3	1	0	1.18049	81.464	2.4
26	1	3	1	1.15332	83.810	1.6
27	0	2	4	1.14099	84.926	0.2
28	2	2	2	1.11858	87.045	0.1
29	0	3	3	1.11479	87.416	0.2
30	1	3	2	1.08185	90.799	2.3
31	4	0	0	1.06408	92.757	0.4
32	0	1	5	1.04805	94.612	1.3
33	0	4	1	1.04406	95.087	0.8
34	1	2	4	1.03488	96.204	1.3
35	2	2	3	1.01521	98.710	1.0
36	1	1	5	0.98976	102.205	0.9
37	0	4	2	0.98976	102.205	0.9
38	1	3	3	0.98751	102.529	0.5
39	0	3	4	0.97864	103.832	0.3
40	3	2	0	0.97647	104.158	0.7
41	0	2	5	0.96404	106.076	0.1
42	2	3	1	0.96092	106.571	1.3
43	4	1	0	0.92881	112.062	0.1
44	2	3	2	0.91839	114.016	0.4
45	0	4	3	0.91629	114.422	1.1
46	1	4	1	0.91540	114.596	1.2
47	2	2	4	0.90920	115.823	0.4
48	0	0	6	0.90112	117.480	0.1
49	1	2	5	0.89745	118.257	0.9
50	3	1	4	0.88914	120.073	0.8
51	1	0	6	0.88158	121.799	0.2
52	1	4	2	0.87841	122.547	0.6
53	0	3	5	0.86003	127.189	0.2
54	2	3	3	0.85855	127.587	0.1
55	1	1	6	0.84603	131.144	0.2
56	0	5	1	0.84091	132.706	0.1
57	0	4	4	0.83609	134.236	0.1
58	0	2	6	0.82980	136.341	1.1
59	1	4	3	0.82562	137.815	1.3
60	3	3	0	0.81913	140.232	0.3
61	5	0	2	0.81196	143.132	1.5
62	2	2	5	0.81196	143.132	1.5
63	3	3	1	0.80989	144.022	0.5
64	4	2	0	0.80437	146.528	0.9

Stick Pattern

Date: 21-Apr-16 Time: 9:42:07 AM

File: HighScore Plus - 01-070-7345

User: Empeyan



Date: 22-Apr-16 Time: 4:25:23 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_150

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 00-045-0157
 Compound name: Calcium Sulfate
 Empirical formula: CaO_4S
 Chemical formula: CaSO_4

Crystallographic parameters

Crystal system: Hexagonal
 a (Å): 6.9723
 b (Å): 6.9723
 c (Å): 6.3050
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 120.0000
 Volume of cell (10^6 pm^3): 265.44
 RIR:: -

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient temperature
 Subfiles: Cement and Hydration Product, Ceramic, Inorganic, Pharmaceutical
 Quality: Indexed (I)

Comments

Creation Date: 01-Sep-95
 Additional Patterns: See PDF 01-073-1942
 General Comments: Anhydrite phase III
 Sample Preparation: "Ca S O4 · 0.5 H2 O" was dried on the hot stage of the X-ray diffractometer
 Temperature of Data Collection: Pattern taken at 353 K
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Bobrov, B., Romashkov, A., Tubolev, A., Inorg. Mater. (Engl. Transl.), **24**, 1006, (1988)

Peak list

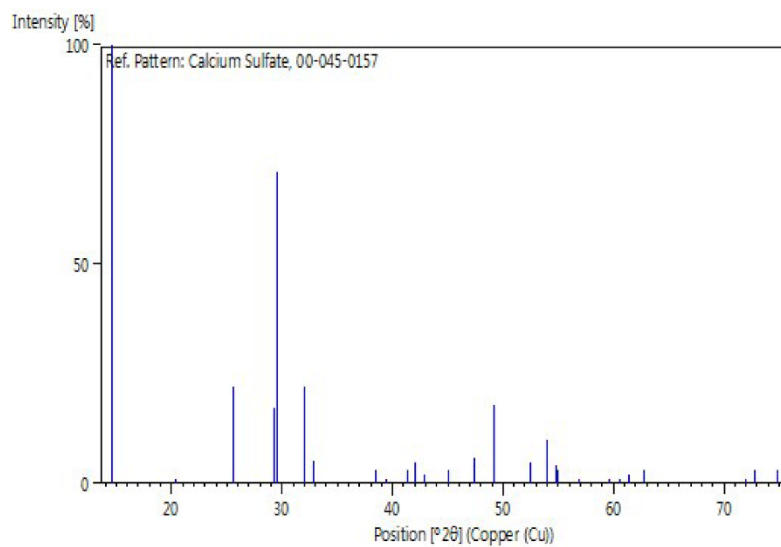
No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	1	0	0	6.04600	14.639	100.0
2	1	0	1	4.36400	20.333	1.0
3	1	1	0	3.48500	25.539	22.0
4	1	1	1	3.04400	29.317	17.0
5	2	0	0	3.01600	29.595	71.0
6	1	0	2	2.79400	32.007	22.0
7	2	0	1	2.72000	32.902	5.0
8	1	1	2	2.33800	38.473	3.0
9	2	1	0	2.28100	39.474	1.0
10	2	0	2	2.18000	41.384	3.0
11	2	1	1	2.14600	42.071	5.0
12	0	0	3	2.10600	42.909	2.0
13	3	0	0	2.01200	45.021	3.0
14	3	0	1	1.91700	47.385	6.0
15	2	1	2	1.84800	49.269	18.0
16	2	2	0	1.74300	52.455	5.0
17	3	0	2	1.69700	53.991	10.0
18	2	2	1	1.67500	54.759	4.0
19	3	1	0	1.67000	54.936	3.0
20	3	1	1	1.61700	56.898	1.0
21	2	1	3	1.54800	59.684	1.0

Date: 22-Apr-16 Time: 4:25:23 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_150

User: Emyrean

22	2	2	2	1.52600	60.634	1.0
23	4	0	0	1.50900	61.390	2.0
24	3	1	2	1.48000	62.728	3.0
25	4	1	0	1.31200	71.906	1.0
26	2	1	4	1.29800	72.805	3.0
27	3	2	2	1.26700	74.886	3.0

Stick Pattern

Date: 22-Apr-16 Time: 4:32:14 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Emyprean

Name and formula

Reference code: 00-027-0605
 Compound name: Silicon Oxide
 Common name: cristobalite, high
 Empirical formula: O₂Si
 Chemical formula: SiO₂

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic
 Space group: Fd-3m
 Space group number: 227
 a (Å): 7.1300
 b (Å): 7.1300
 c (Å): 7.1300
 Alpha (°): 90.0000
 Beta (°): 90.0000
 Gamma (°): 90.0000
 Calculated density (g/cm³): 2.20
 Volume of cell (10⁶ pm³): 362.47
 Z: 8.00
 RIR: -

Status, subfiles and quality

Status: Diffraction data collected at non ambient temperature
 Subfiles: Pharmaceutical, Inorganic, Forensic, Mineral, Alloy, metal or intermetallic
 Quality: Indexed (I)

Comments

Creation Date: 01-Sep-77
 Additional Patterns: To replace 00-004-0359
 General Comments: High $\hat{\alpha}$ -cristobalite
 Sample Preparation: Synthesized by devitrifying pure vitreous silica at 1690 C
 Temperature of Data Collection: High temperature pattern, taken at 573 K
 Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Leadbetter, A. et al., Private Communication, (1975)
 Unit cell: Leadbetter, A. et al., Nature (London), Phys. Sci., **244**, 125, (1973)

Peak list

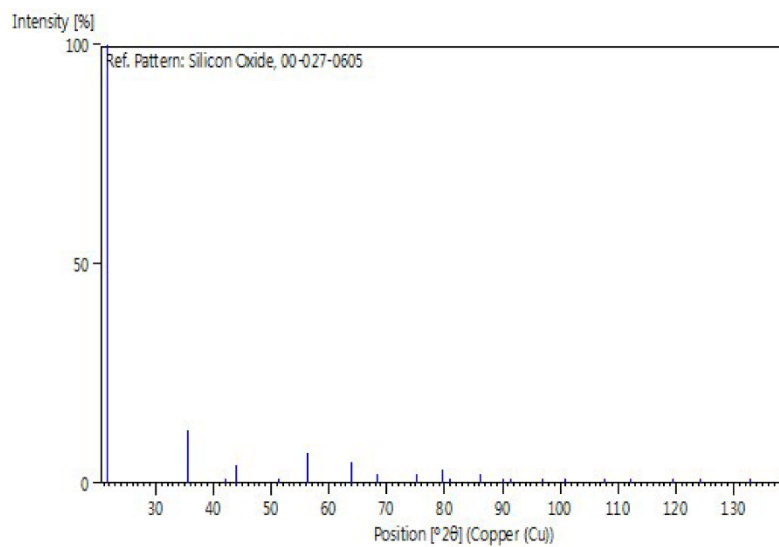
No.	h	k	l	d [Å]	2 θ [°]	I [%]
1	1	1	1	4.11000	21.605	100.0
2	2	2	0	2.51800	35.627	12.0
3	3	1	1	2.14900	42.009	1.0
4	2	2	2	2.05600	44.006	4.0
5	4	0	0	1.78200	51.223	1.0
6	3	3	1	1.63600	56.178	7.0
7	4	2	2	1.45500	63.932	5.0
8	5	1	1	1.37200	68.311	2.0
9	4	4	0	1.26100	75.304	2.0
10	5	3	1	1.20300	79.631	3.0
11	4	4	2	1.18800	80.842	1.0
12	6	2	0	1.12800	86.140	2.0
13	5	3	3	1.08800	90.144	1.0
14	6	2	2	1.07500	91.542	1.0
15	4	4	4	1.02900	96.937	1.0

Date: 22-Apr-16 Time: 4:32:14 PM

File: HighScore Plus - HTK_phase_375

User: Empyrean

16	5	5	1	0.99880	100.928	1.0
17	6	4	2	0.95320	107.825	1.0
18	7	3	1	0.92860	112.100	1.0
19	8	0	0	0.89150	119.548	1.0
20	7	3	3	0.87150	124.227	1.0
21	6	6	0	0.84050	132.833	1.0
22	7	5	1	0.82350	138.585	1.0

Stick Pattern

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นายธนวัฒน์ เพชรรัตนรังสี เกิดเมื่อวันที่ 29 ตุลาคม 2534 ได้สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมปลายจาก โรงเรียนสวนกุหลาบวิทยาลัย ระดับปริญญาตรีจากภาควิชาวิศวกรรมโลหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย และได้เข้ารับการศึกษาคือต่อในหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิตที่ภาควิชาวิศวกรรมโลหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อปี 2557

