



วิธีการขอ Password

1. สำหรับการใช้งานครั้งแรก ผู้ใช้ต้องทำการสมัครเพื่อขอ Password ในการเข้าใช้ โดย คลิกที่ For Patron

ไปที่ เว็บไซต์สถาบันฯ --> ฐานข้อมูลงานวิจัย --> สถิติผลงานวิจัย --> วารสารนานาชาติฉบับเต็ม --> เลือก BL ที่ต้องการ --> คลิก For Patron

Copyright: [Book Promotion and Service Co., Ltd.](#)
For query, please send email to: library@slri.or.th

[For Patron](#)  **Click**



2. ผู้ใช้ต้องทำการขอรหัสผ่านใหม่ (Click here for New Password)

Current Database : **Research**


User Empowerment

Welcome to **BPS LIBRARY ONLINE**

Patron Login | Patron Audit | Account | Profile | On Loan Item | On Hold Item | [HELP](#)

Patron ID. (Patron ID):

Password (Password):

Do not have password or forgot your password [Click here for New Password](#)  **Click**

3. ผู้ใช้ทำการกรอกข้อมูลให้ครบถ้วน

Patron ID คือรหัสสมาชิกที่ห้องสมุดออกให้ (ชื่อภาษาอังกฤษตัวเล็ก)

E Mail คือ email ของสถาบันฯ ในการทำสมาชิกจากนั้นทางระบบจะทำการจัดส่ง Password ให้ทาง email ที่ได้แจ้งไว้

4. เมื่อผู้ใช้ได้รับ Password เรียบร้อยแล้ว ก็สามารถนำรหัสดังกล่าว มาทำการเข้าสู่ระบบ โดยจะปรากฏหน้าจอให้ทำการ Login หลังจากนั้นคุณสามารถเข้าสู่ระบบการตรวจสอบสถานะผ่านอินเทอร์เน็ต (User Empowerment) เรียบร้อยแล้ว

ขั้นตอนการแก้ไขประวัติส่วนตัว และรหัส (Profile)

1. เลือกที่เมนูคำสั่ง Profile จากนั้นจะปรากฏหน้าจอเกี่ยวกับข้อมูลส่วนตัวของผู้ใช้ขึ้นมา



2. คลิกที่ Edit Profile ถ้าต้องการที่จะเปลี่ยนข้อมูลส่วนตัวของผู้ใช้ หลังจากที่ได้เปลี่ยนแปลงข้อมูลเรียบร้อยแล้ว ให้คลิกที่ปุ่ม Save เพื่อการบันทึกคลิก Change Password หากต้องการเปลี่ยนรหัสผ่าน

3. หลังจากที่ได้เปลี่ยนรหัสผ่านเรียบร้อยแล้ว ให้คลิกที่ปุ่ม Submit หน้าจอจะปรากฏข้อความ Password changed successfully

วิธีดาวน์โหลดบทความฉบับเต็ม

ไปที่ เว็บไซต์สถาบันฯ --> ฐานข้อมูลงานวิจัย --> สถิติผลงานวิจัย --> วารสารนานาชาติฉบับเต็ม
--> เลือก BL --> เลือกบทความที่ต้องการ คลิกไปที่ Full text ใส่รหัสผ่าน เพื่อดาวน์โหลดบทความฉบับเต็ม

Card Screen	
Browse Search	Keyword Search
Expert Search	Card Screen
MARC Screen	Copy Menu
HELP	
Accession No.	SLRI 250
Code Id	JOUR 2013
Researcher	Chaodamrongsakul, J. Same Author (3)
Title/Researcher	A Combined Molecular Dynamic Simulation and X-ray Absorption Spectroscopy to Investigate the Atomistic Solvation Structure of Cation in Poly(vinyl alcohol):Potassium Thiocyanate (KSCN) Solid Electrolytes
Imprint	2013
Added Researcher	Klysubun, W. Same Author (49)
	Vao-soongnern, V. Same Author (4)
Host Item Entry	Journal of Non-Crystalline Solids 379 (Sep 2013): 21-26
URL Object	fulltext Password required Click
Location	●BL8: XAS

 ระบบ "ห้องสมุดอัตโนมัติ" 

Need Patron ID and Password to access object

Access object

Patron ID:



Password:

[Close](#)

ใส่รหัส

Journal of Non-Crystalline Solids 379 (2013) 21–26

Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

 **Journal of Non-Crystalline Solids** 

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jnoncrysol

บทความฉบับเต็ม

A combined molecular dynamic simulation and X-ray absorption spectroscopy to investigate the atomistic solvation structure of cation in poly(vinyl alcohol):potassium thiocyanate (KSCN) solid electrolytes

Jittima Chaodamrongsakul^a, Kesorn Merat^a, Wantana Klysubun^b, Visit Vao-soongnern^{a,*}

^a Laboratory of Computational and Applied Polymer Science (LCAPS), School of Chemistry, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Thailand
^b Synchrotron Light Research Institute (Public Organization), Nakhon Ratchasima, Thailand

ARTICLE INFO

Article history:
Received 5 May 2013
Received in revised form 26 July 2013
Available online xxx

Keywords:
KSCN;
Poly(vinyl alcohol);
EXAFS;
Molecular dynamic simulation and MD-EXAFS

ABSTRACT

Molecular dynamic (MD) simulation and extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectroscopy were combined to investigate the atomistic solvation structures of poly(Vinyl Alcohol):potassium thiocyanate (PVA:KSCN) solid electrolytes. The radial distribution functions (RDFs) calculated from MD simulation with COMPASS forcefield give structural parameters such as K⁺-O and K⁺-H distances, coordination numbers (N) and Debye-Waller factor (only from configurational disorder part). For PVA:KSCN (K⁺:O molar ratio = 1:20) system, the RDFs of the first solvation shell around K⁺ ions consist mainly of oxygen atoms from PVA chain with an average K⁺-O distance and coordination number (N) of 2.57 Å and 4.8 atoms, respectively. A direct comparison between MD-EXAFS and experimental EXAFS spectra gives an overall good agreement for both frequency and amplitude of the oscillations over the wide k range (2.0 < k < 11.0 Å⁻¹). Agreement in the frequencies of oscillations implies that the K⁺-O distances from experiment and simulation data are almost the same. However, the experimental EXAFS spectra have a broader peak compared to the MD-EXAFS spectra. The Debye-Waller factor determined from MD-EXAFS (0.0183 Å²) is smaller than that of the experimental spectra (0.0204 Å²).

© 2013 Elsevier B.V. All rights reserved.