183238

โครงการวิจัยนี้เป็นการพัฒนาเทคนิคการจำลองแบบโมเลกุลสำหรับระบบพอลิเมอร์รูปแปรงโดยเป็นพื้นฐานสำคัญในการศึกษาสมบัติเชิงพื้นผิวของวัสดุพอลิเมอร์ในทางเทคโนโลยีนาโนโดยตรวจสอบความถูกต้องของผลที่ได้เทียบกับผลทำนายจากทฤษฎีสนามเฉลี่ย (mean-field theory) โดยได้ใช้เทคนิคมอนติคาร์โลที่พัฒนาขึ้นมาใหม่สำหรับแบบจำลองโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ปรับลดรายละเอียดลงในการศึกษาสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์ โครงรูปและการจัดเรียงโมเลกุลพอลิเมอร์รูปแปรงที่มีจุดปลายด้านหนึ่งยึดติดกับพื้นผิว ระบบที่ศึกษาในโครงการนี้จะเป็น polyethylene (PE) ที่มีความยาวสายโซ่ในระหว่าง C_{80} and C_{160} โดยมีความหนาแน่นของพื้นผิว 0.92 to 1.85 โมเลกุลต่อ nm^{-2} ผลการคำนวณ ได้แก่ การกระจายหน่วยมอนอเมอร์และจุดปลาย การจัดเรียงระดับพันธะ ตำแหน่งเฉลี่ยของมอนอเมอร์ มาเปรียบเทียบกับทฤษฎี self-consistent field (SCF) พบว่ามีความสอดคล้องกันพอควรโดยมีความแตกต่างกันมากบริเวณใกล้กับพื้นผิวกราฟและช่วงปลายของพื้นผิวพอลิเมอร์ ทำให้ได้ข้อสรุปถึงข้อจำกัดของวิธีทฤษฎีซึ่งไม่สามารถแทนพฤติกรรมของพอลิเมอร์จริงได้ทั้งหมด ดังนั้น การใช้ระเบียบวิธีการจำลองแบบโมเลกุลจะช่วยให้เข้าใจรายละเอียดของโครงสร้างนาโนนี้ได้ดีขึ้น

183238

This research is to develop a new computational molecular simulation technique to study polymer brushes vhich aim at a more understanding for the surface properties of these polymeric nanostructured materials. Comparisons vith mean-field theoretical prediction were also made. The thermodynamic, conformational and orientational properties f polymer melts grafted on a solid substrate were obtained from a novel Monte Carlo simulation of coarse-grained model f polyethylene (PE). The interface between a non-interacting hard surface and a bulk PE melt, with all chains of which re grafted on the plane, has been studied. Two different PE melts, of mean molecular length C_{80} and C_{160}, have been ıvestigated, at grafting densities ranging from 0.92 to 1.85 nm^{-2}. Profiles of monomer density and free end density, bond ·ientation, and average monomer position along a chain were studied. Quantitative measured in the simulations are :rived from the analytical self-consistent field (SCF) theory and compared with the simulation data. The conformational ıd orientational properties can be quite accurately described by the theory, with some discrepancies observed near the all and at the tail of the profile. Additional results concerning thermodynamic and surface energy of the brush are also esented.