

ณัฐชรีรา กิตติธเนศวร 2551: การศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มี
โครงสร้างซับซ้อนด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ปริญญาวิทยาศาสตร
มหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี) สาขาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: ผู้ช่วยศาสตราจารย์สิริพล อนันตวรสกุล,
Ph.D. 59 หน้า

งานวิจัยนี้ศึกษาขนาด รูปร่าง และโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์โดยใช้
เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ชนทับตัวเอง
ในปริภูมิ 3 มิติ โดยพิจารณาทั้งหมด 3 กรณี กรณีที่ 1 ศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด
Di-block และ Multi-block ซึ่งแต่ละบล็อกนั้นมีความยืดหยุ่นของเชกเมนต์ไม่เท่ากัน และได้
พัฒนาสมการทางคณิตศาสตร์เพื่ออธิบายความสัมพันธ์ของผลของโครงสร้างที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลัง
สองของรัศมีจอยเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของ โมเลกุลพอลิ
เมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ซึ่งจากผลการจำลองพบว่าสมการทางคณิตศาสตร์
ที่เสนอสามารถใช้อธิบายผลได้เป็นอย่างดี กรณีที่ 2 ศึกษาโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์ชนิดสายโซ่
ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเชกเมนต์ตาม Flory distribution จากการศึกษาพบว่า
ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดเฉลี่ยและจำนวนเชกเมนต์เฉลี่ยใน โมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิค
การจำลอง Monte Carlo มีค่าใกล้เคียงกับผลที่ได้จากทฤษฎี และผลจากเทคนิคการจำลอง Monte
Carlo พบว่าการกระจายตัวของขนาดโมเลกุลพอลิเมอร์จะกว้างขึ้นเมื่อจำนวนเชกเมนต์เฉลี่ยใน
โมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้น กรณีที่ 3 ศึกษาโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวซึ่งมีจำนวนเชกเมนต์
ทั้งหมดเท่ากับ 60, 120, 180, 240 และ 300 เชกเมนต์ และมีจำนวนแขนเท่ากับ 3, 4, 5, และ 6 แขน
จากผลการจำลองพบว่าขนาดของโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวมีค่ามากขึ้นเมื่อมี
จำนวนเชกเมนต์มากขึ้น แต่ขนาดของโมเลกุลมีค่าลดลงเมื่อมีจำนวนแขนมากขึ้น นอกจากนี้
พบว่าค่า g-factor ของพอลิเมอร์มีใกล้เคียงกันเมื่อรูปแบบโครงสร้างของโมเลกุลพอลิเมอร์
เหมือนกัน โดยไม่ขึ้นกับจำนวนเชกเมนต์แต่อย่างใด ค่า g-factor ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte
Carlo ด้วยแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีการชนทับตัวเองให้ผลใกล้เคียงกับค่า
g-factor ที่คำนวณได้จากแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการชนทับตัวเอง

ณัฐชรีรา กิตติธเนศวร
ลายมือชื่อนิสิต


ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

221 5 1 51