ณัฐชีรา กิตติธเนศวร 2551: การศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีโครงสร้างซับซ้อนด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี) สาขาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: ผู้ช่วยศาสตราจารย์สิริพล อนันตวรสกุล, Ph.D. 59 หน้า

งานวิจัยนี้ศึกษาขนาด รูปร่าง และโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์โดยใช้เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเองในปริภูมิ 3 มิติ โดยพิจารณาทั้งหมด 3 กรณี กรณีที่ 1 ศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block และ Multi-block ซึ่งแต่ละบล็อกนั้นมีความยืดหยุ่นของเซกเมนต์ไม่เท่ากัน และได้พัฒนาสมการทางคณิตศาสตร์เพื่ออธิบายความสัมพันธ์ของผลของโครงสร้างที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ซึ่งจากผลการจำลองพบว่าสมการทางคณิตศาสตร์ที่เสนอสามารถใช้อธิบายผลได้เป็นอย่างดี กรณีที่ 2 ศึกษาโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์ชนิดสายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution จากการศึกษาพบว่าความสัมพันธ์ระหว่างขนาดเฉลี่ยและจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยในโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo มีค่าใกล้เคียงกับผลที่ได้จากทฤษฎี และผลจากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo พบว่าการกระจายตัวของขนาดโมเลกุลพอลิเมอร์จะกว้างขึ้นเมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยในโมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้น กรณีที่ 3 ศึกษาโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวซึ่งมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 60, 120, 180, 240 และ 300 เซกเมนต์ และมีจำนวนแขนเท่ากับ 3, 4, 5, และ 6 แขน จากผลการจำลองพบว่าขนาดของโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวมีค่ามากขึ้นเมื่อมีจำนวนเซกเมนต์มากขึ้น แต่ขนาดของโมเลกุลมีค่าลดลงเมื่อมีจำนวนแขนมากขึ้น นอกจากนี้พบว่าค่า g-factor ของพอลิเมอร์มีใกล้เคียงกันเมื่อรูปแบบโครงสร้างของโมเลกุลพอลิเมอร์เหมือนกันโดยไม่ขึ้นกับจำนวนเซกเมนต์แต่อย่างใด ค่า g-factor ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ด้วยแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีการซ้อนทับตัวเองให้ผลใกล้เคียงกับค่า g-factor ที่คำนวณได้จากแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง

_____ _____ ___ / ___ / ___

ลายมือชื่อนิสิต ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก