กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณ ผศ.ดร. สิริพล อนันตวรสกุล ประธานกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ สำหรับความดูแลเอาใจใส่ทั้งด้านการเรียน การดำเนินชีวิต และคำปรึกษาในการทำวิทยานิพนธ์อย่างดียิ่ง ตลอดจนการตรวจแก้ไขวิทยานิพนธ์จนกระทั่งเสร็จสมบูรณ์ และขอกราบขอบพระคุณ รศ.ดร. เทอดไทย วัฒนธรรม กรรมการที่ปรึกษาร่วม สำหรับคำปรึกษาและการชี้แนะแนวทางอันเป็นประโยชน์ในการค้นคว้าวิจัย และขอกราบขอบพระคุณประธานในการสอบปากเปล่าขั้นสุดท้าย รศ.ดร. สุนันท์ ลิ้มตระกูล และผู้ทรงคุณวุฒิจากภายนอก รศ.ดร. เหมือนเดือน พิศาลพงศ์ สำหรับคำแนะนำต่างๆ อันเป็นประโยชน์เกี่ยวกับงานวิจัยและการดำเนินชีวิต และกราบขอบพระคุณ ผศ.ดร.ประไพศรี สุทัศน์ ณ อยุธยา ผู้แทนบัณฑิตวิทยาลัย ที่ให้ความกรุณาตรวจแก้ไขวิทยานิพนธ์ให้สมบูรณ์ยิ่งขึ้น

งานวิจัยในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้รับทุนสนับสนุนจากโครงการพัฒนาบัณฑิตและวิจัยด้านวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (ADB)

ขอกราบขอบพระคุณอาจารย์ภาควิชาวิศวกรรมเคมีทุกท่าน ที่ได้อบรมสั่งสอนและมอบความรู้อันเป็นประโยชน์อย่างยิ่งในการนำไปใช้ประโยชน์ต่อไป และขอขอบคุณเจ้าหน้าที่ภาควิชาวิศวกรรมเคมีทุกท่าน ที่ได้ให้ความช่วยเหลือและให้คำแนะนำต่างๆ

ขอขอบคุณ คุณอุเทน นันทพูนทรัพย์ สำหรับความช่วยเหลือด้านการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์และการให้ความรู้ต่างๆ ด้านคอมพิวเตอร์อย่างดีมาโดยตลอด และขอขอบคุณเพื่อนๆ พี่ๆ และน้องๆ ปริญญาโทภาควิชาวิศวกรรมเคมีทุกคน สำหรับกำลังใจ การดูแลเอาใจใส่ และคำปรึกษาต่างๆ ตลอดจนความช่วยเหลือในทุกๆ เรื่องตลอดการศึกษา และขอขอบคุณ คุณณรงค์ จิรวงศ์บุญรอด สำหรับกำลังใจ ความช่วยเหลือทางด้านต่างๆ และคำปรึกษาในทุกๆ เรื่อง และด้วยความดีหรือประโยชน์อันใดเนื่องจากวิทยานิพนธ์เล่มนี้ ขอมอบแด่คุณพ่อสุรชัย และ คุณแม่ณัฏฐิกา กิตติธเนศวร และคณาจารย์ทุกท่านที่เมตตาอบรมสั่งสอน ให้คำแนะนำและให้กำลังใจผู้วิจัยมาโดยตลอด

ณัฐชีรา กิตติธเนศวร

เมษายน 2551

สารบาญ

หน้า

สารบาญ	(1)
สารบาญตาราง	(2)
สารบาญภาพ	(3)
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ	(7)
คำนำ	1
วัตถุประสงค์	3
การตรวจเอกสาร	6
อุปกรณ์และวิธีการ	25
ผลและวิจารณ์	32
สรุปและข้อเสนอแนะ	47
เอกสารและสิ่งอ้างอิง	49
ภาคผนวก	52
ประวัติการศึกษา และการทำงาน	59

สารบาญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดในโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรง จำลองโครงสร้างในปริภูมิ 2 มิติและ 3 มิติ	19
2	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดในโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว จำลองโครงสร้างในปริภูมิ 2 มิติ	20
3	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นกับจำนวนแขนของโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว จำลองโครงสร้างในปริภูมิ 3 มิติ	21
4	เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block เมื่อกำหนดให้สัดส่วนของจำนวนเซกเมนต์แต่ละข้างเท่ากัน และอัตราส่วนของค่า Stiffness ratio แตกต่างกัน	26
5	เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block เมื่อกำหนดให้อัตราส่วนของค่า Stiffness ratio เท่ากัน และสัดส่วนของจำนวนเซกเมนต์แต่ละข้างแตกต่างกัน	27
6	เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block	28
7	เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีการกระตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution	28
8	เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว	30

สารบาญภาพ

ภาพที่		หน้า
1	โครงสร้างของพอลิเมอร์ชนิดโฮโมพอลิเมอร์	6
2	โครงสร้างของพอลิเมอร์ชนิดโคพอลิเมอร์	7
3	โครงสร้างของพอลิเมอร์แบบเส้น	7
4	โครงสร้างของพอลิเมอร์แบบกิ่ง (ก) สายโซ่กิ่งยาว (ข) สายโซ่กิ่งรูปหวี และ (ค) สายโซ่กิ่งรูปดาว	8
5	โครงสร้างของพอลิเมอร์แบบร่างแห	8
6	ตัวอย่างผลที่ได้จากการวัดน้ำหนักโมเลกุลด้วยวิธี GPC แสดงการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์	10
7	การกระจายของน้ำหนักโมเลกุลและน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยของพอลิเมอร์ซึ่งแสดงโดยค่า $\overline{M}_w, \overline{M}_v$ และ $\overline{M}_n$	11
8	ลักษณะการกระตัวแบบ Flory Distribution (Flory, 1967)	12
9	การเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) สำหรับพอลิเมอร์สายโซ่ตรงอย่างง่าย (Simple linear polymer chain) ในปริภูมิ 3 มิติ	13
10	การเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self-avoiding walk, SAW) สำหรับพอลิเมอร์สายโซ่ตรงอย่างง่าย (Simple linear polymer chain) ในปริภูมิ 3 มิติ	14
11	ระยะทางเฉลี่ยที่วัดจากแต่ละเซกเมนต์มาถึงจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลพอลิเมอร์แบบสายโซ่ไม่เป็นอุดมคติ	15
12	ค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์แบบสายโซ่ไม่อุดมคติ	16
13	ตัวอย่างการเคลื่อนที่ของโมเลกุลพอลิเมอร์ในปริภูมิ 3 มิติเมื่อกำหนดให้ค่า Stiffness ratio เท่ากับ 1	17

สารบาญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
14	ตัวอย่างการจำลองโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 30 เซกเมนต์ และมีจำนวนแขน 3 แขน	24
15	ลักษณะการกระจายตัวตาม Flory distribution เมื่อมีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ	
16	10 (◇), 20 (□) และ 30 (△) เซกเมนต์	29
	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (●) และจากสมการที่ 15 (– – –) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างจากปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (■) และ	
17	จากสมการที่ 16 (– . –) กับค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบ B	33
	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (●) และจากสมการที่ 15 (– – –) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างจากปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (■) และ	
18	จากสมการที่ 16 (– . –) กับจำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบ A	35
	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (●) และจากสมการที่ 15 (– – –) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างจากปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (■) และ จากสมการที่ 16 (– . –) ของโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-	
19	block, Penta-block และ Hexa-block ที่ประกอบด้วยองค์ประกอบของ A และ B	36
	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (●) กับผลที่ได้จากสมการการคำนวณ (– – –) กับการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ (ก) 10 (ข) 20 และ (ค) 30 เซกเมนต์	38

สารบาญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
20	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (◇), 20 (□) และ 30 (△) เซกเมนต์และจากสมการในตารางที่ 1 (_ _ _) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (◆), 20 (■) และ 30 (▲) เซกเมนต์และจากสมการในตารางที่ 1 (_ . _) กับจำนวนเซกเมนต์ในโมเลกุลพอลิเมอร์	40
21	ผลเปรียบเทียบค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากผลการจำลอง (◆) และผลจากสมการที่ 9 (_ _ _) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านที่ได้จากผลการจำลอง (◇) และผลจากสมการที่ 11 (_ . _) ที่เฉลี่ยจากข้อมูลทั้งหมดที่ได้จากผลการจำลองและผลจากสมการการคำนวณ ที่จำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยของโมเลกุลพอลิเมอร์เท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ ตามลำดับ	41
22	ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์ เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (◇), 20 (□) และ 30 (△) เซกเมนต์	42
23	ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (◇), 20 (□) และ 30 (△) เซกเมนต์	43
24	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ซึ่งมีจำนวนแขน 2 (◆), 3 (■), 4 (▲), 5 (●) และ 6 (✕) แขนและจากสมการที่ 21 (_ _ _)	44
25	ความสัมพันธ์ระหว่างค่า g-factor จากการจำลองโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีจำนวนแขนเท่ากับ 2 (◆), 3 (■), 4 (▲), 5 (●) และ 6 (✕) แขน และจากสมการที่ 18 (_ _ _) กับจำนวนเซกเมนต์	45

สารบาญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
26	ความสัมพันธ์ระหว่างค่า g-factor ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo โมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวซึ่งมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 60 (◇), 120 (□), 180 (○), 240 (△) และ 300 (×) เซกเมนต์ และจากสมการที่ 18 กับจำนวนแขนของโมเลกุลพอลิเมอร์	46

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

f	=	จำนวนแขนของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว
i	=	จำนวนของหน่วยโครงสร้างในโมเลกุลพอลิเมอร์
L	=	ความยาวพันธะที่เชื่อมระหว่างเซกเมนต์
Mo	=	น้ำหนักโมเลกุลของมอนอเมอร์
$\overline{M}_n$	=	น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยตามจำนวน
$\overline{M}_v$	=	น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยตามความหนืด
$\overline{M}_w$	=	น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยตามน้ำหนัก
MW	=	น้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์
MWD	=	การกระจายของน้ำหนักโมเลกุล
N	=	จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดภายในโมเลกุลพอลิเมอร์
N_A	=	จำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบ A
N_B	=	จำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบ B
N_{step}	=	จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดภายในโมเลกุลพอลิเมอร์
N_{total}	=	จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดภายในโมเลกุลพอลิเมอร์
p	=	extent of reaction
r_i	=	เวกเตอร์ตำแหน่ง (x, y, z) หน่วยโครงสร้าง i ระหว่างเซกเมนต์ในปริภูมิ
r_{mean}	=	เวกเตอร์ตำแหน่งจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลพอลิเมอร์
r_0	=	เวกเตอร์ตำแหน่งเริ่มต้นของโมเลกุลพอลิเมอร์
r_N	=	เวกเตอร์ตำแหน่งสุดท้ายของโมเลกุลพอลิเมอร์
$\left\langle R_e^2 \right\rangle$	=	ค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์
$\left\langle R_g^2 \right\rangle$	=	ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์
RW	=	การเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยซ้อนทับตัวเอง
SAW	=	การเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง
w_i	=	สัดส่วนโดยน้ำหนักของพอลิเมอร์ที่มีจำนวนของหน่วยโครงสร้างเท่ากับ i
X_N	=	จำนวนของหน่วยโครงสร้างเฉลี่ยในโมเลกุลพอลิเมอร์

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ (ต่อ)

ϕ = อัตราส่วนของโอกาสที่โมเลกุลพอลิเมอร์จะเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดิมเมื่อเทียบกับทิศทางอื่น

ϕ_A = อัตราส่วนของโอกาสที่โมเลกุลพอลิเมอร์จะเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดิมเมื่อเทียบกับทิศทางอื่นขององค์ประกอบ A

ϕ_B = อัตราส่วนของโอกาสที่โมเลกุลพอลิเมอร์จะเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดิมเมื่อเทียบกับทิศทางอื่นขององค์ประกอบ B

● = Monomeric unit

—— = พันธะระหว่าง Monomeric unit