

การศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีโครงสร้างซับซ้อน ด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo

A Study on Size and Shape of Polymer Molecules with Complex Topology using Monte Carlo Simulation

คำนำ

เนื่องจากการพัฒนาความรู้เกี่ยวกับพอลิเมอร์จำเป็นต้องศึกษาโครงสร้างและสมบัติของพอลิเมอร์ ดังนั้นเราจึงให้ความสนใจกับการศึกษาคุณลักษณะต่างๆ ของพอลิเมอร์ ไม่ว่าจะเป็นขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ ซึ่งเป็นคุณลักษณะพื้นฐานที่สำคัญ โดยเฉพาะอย่างยิ่งสำหรับการศึกษากำหนดคุณลักษณะของพอลิเมอร์ (Polymer characterization) ข้อมูลเกี่ยวกับขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์นั้นสามารถวัดได้จากการทดลอง และสามารถคำนวณได้หากทราบโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ (Polymer conformation)

จากความสนใจเกี่ยวกับการศึกษาคุณลักษณะต่างๆ ของพอลิเมอร์ วิธีการจำลองด้วยคอมพิวเตอร์จึงได้เข้ามามีบทบาทสำคัญในการออกแบบและทำนายสมบัติของพอลิเมอร์ ซึ่งการศึกษาเกี่ยวกับการจำลองโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์ในงานวิจัยก่อนหน้านี้เป็นการจำลองโครงสร้างโมเลกุลโซโพลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีหน่วยโครงสร้างเพียงชนิดเดียวด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (Pattanasak, 2007) และยังไม่มีการศึกษาถึงการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ภายในโมเลกุลพอลิเมอร์ และสำหรับการศึกษาโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีโครงสร้างซับซ้อนมากขึ้น ตัวอย่างเช่น การศึกษาคุณลักษณะของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวในปริภูมิ 3 มิติเป็นการจำลองโครงสร้างด้วยวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random Walk, RW) (Anantawaraskul, 2005)

ด้วยสาเหตุดังกล่าว โครงการวิจัยนี้จึงให้ความสนใจในการศึกษาการจำลองคุณลักษณะของโมเลกุลพอลิเมอร์ด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo โดยศึกษาคุณลักษณะขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีความซับซ้อนของโครงสร้างมากขึ้นทั้งหมด 3 กรณี คือ (1) โมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงแบบบล็อกชนิดต่างๆ (2) โมเลกุลโซโพลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของ

จำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution และ (3) โมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวที่มีจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละแขนเท่ากัน โดยจำลองโครงสร้างในปริภูมิ 3 มิติ และใช้วิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self avoiding walk, SAW) ซึ่งตัวแปรที่แสดงถึงคุณลักษณะขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่งานวิจัยนี้ใช้ศึกษาได้แก่ ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชัน (Mean square radius of gyration, $\langle R_g^2 \rangle$) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน (Mean square end-to-end distance, $\langle R_e^2 \rangle$) ของโมเลกุลพอลิเมอร์ โดยในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้จะประกอบด้วยส่วนต่างๆ ที่ใช้ในการศึกษาได้แก่ ทฤษฎีพื้นฐานและทฤษฎีที่เกี่ยวข้องในการจำลองโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์ โดยแบ่งพิจารณาเป็นหัวข้อดังนี้ (1) การจำแนกชนิดของพอลิเมอร์ (2) น้ำหนักโมเลกุลและการกระจายตัวของน้ำหนักโมเลกุลพอลิเมอร์ และ (3) การจำลองโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ งานวิจัยที่เกี่ยวข้องในการศึกษาการจำลองโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์ซึ่งได้แก่ งานวิจัยเกี่ยวกับการจำลองโครงสร้างโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรงและโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo อุปกรณ์และวิธีการที่ใช้ในการจำลองโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์ จะกล่าวถึงอุปกรณ์ ขั้นตอนและสมมติฐานต่างๆ ที่งานวิจัยนี้ใช้ศึกษา และในที่สุดท้ายจะกล่าวถึงผลและวิจารณ์ผลการจำลองโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์ทั้ง 3 กรณีที่ได้กล่าวมาแล้วข้างต้น โดยจะวิเคราะห์และเปรียบเทียบผลที่ได้จากการจำลองโครงสร้างด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo กับผลที่ได้จากทฤษฎีต่างๆ ที่ใช้ในการอ้างอิงเพื่อตรวจสอบความถูกต้อง

วัตถุประสงค์

เพื่อศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีโครงสร้างซับซ้อน โดยแบ่งวัตถุประสงค์การศึกษาเป็น 3 กลุ่มดังนี้

1. สำหรับการศึกษาโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีการกระจายตัวของหน่วยโครงสร้าง พิจารณาถึงโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block โดยศึกษาผลกระทบของลักษณะการกระจายตัวของหน่วยโครงสร้างที่มีต่อขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์
2. สำหรับการศึกษาโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution พิจารณาถึงโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรง โดยศึกษาผลกระทบของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยที่มีต่อลักษณะการกระจายตัวของขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์
3. สำหรับการศึกษาโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีรูปร่างซับซ้อน พิจารณาถึงโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละแขนเท่ากัน (Uniform Star polymer) โดยศึกษาผลกระทบของจำนวนแขนและจำนวนเซกเมนต์ที่มีต่อขนาดและรูปร่างโมเลกุล

ขอบเขตงานวิจัย

ขอบเขตการวิจัยของการศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีโครงสร้างซับซ้อนขึ้น โดยจำลองโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์ด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ด้วยวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self avoiding walk, SAW) โดยจำลองโครงสร้างในปริภูมิ 3 มิติ แบ่งเป็น 3 กลุ่มดังนี้

1. การศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block โดยกำหนดให้โคพอลิเมอร์แต่ละชนิดประกอบด้วยองค์ประกอบของ A และองค์ประกอบของ B ซึ่งแบ่งพิจารณาการสร้างแบบจำลองเป็น 3 กรณี ดังนี้

1.1 แบบจำลองโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block ซึ่งมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด (N_{total}) เท่ากับ 100 เซกเมนต์ และแบ่งออกเป็น 2 ข้าง โดยกำหนดให้จำนวนเซกเมนต์เท่ากันทั้ง 2 ข้าง ($N_A:N_B$) เท่ากันข้างละ 50 เซกเมนต์ และอัตราส่วนของค่า Stiffness ratio 2 ข้าง ($\phi_A:\phi_B$) แตกต่างกันคือ 1:1, 1:2, 1:3, 1:5 และ 1:10

1.2 แบบจำลองโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block ซึ่งมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด (N_{total}) เท่ากับ 100 เซกเมนต์ และแบ่งออกเป็น 2 ข้าง โดยอัตราส่วนของจำนวนเซกเมนต์ 2 ข้าง ($N_A:N_B$) แตกต่างกันคือ 20:80, 40:60, 60:40 และ 80:20 เซกเมนต์ และอัตราส่วนของค่า Stiffness ratio ($\phi_A:\phi_B$) คงที่เท่ากับ 1:10

1.3 แบบจำลองโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block โดยกำหนดให้จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด (N_{total}) สำหรับโมเลกุลโคพอลิเมอร์แต่ละชนิดเท่ากับ 120 เซกเมนต์ โดยแบ่งเป็นเซกเมนต์ขององค์ประกอบ A และ B อย่างละ 60 เซกเมนต์ในทุกกรณี ค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบ A (ϕ_A) เท่ากับ 1 และค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบ B (ϕ_B) เท่ากับ 10

2. การศึกษาโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution โดยสร้างแบบจำลองโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ โดยกำหนดให้แต่ละเซกเมนต์มีค่า Stiffness ratio เท่ากับ 1

3. การศึกษาโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว โดยสร้างแบบจำลองโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีจำนวนแขนเท่ากับ 2, 3, 4, 5 และ 6 แขน และมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 60, 120, 180, 240 และ 300 เซกเมนต์ โดยกำหนดให้ค่า Stiffness ratio ของแต่ละเซกเมนต์มีค่าเท่ากับ 1

การตรวจเอกสาร

ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

พอลิเมอร์ (Polymer) มาจากคำกรีกสองคำ คือ “polus” แปลว่าหลายหรือมาก และ “meros” แปลว่าหน่วยหรือส่วน (Fried, 1995) ดังนั้นพอลิเมอร์คือสารที่มีน้ำหนักโมเลกุลสูง โดยมีโครงสร้างทางเคมีที่ประกอบด้วยหน่วยย่อยซ้ำๆ ของโมเลกุลที่เรียกว่า “เมอร์” และหากเป็นโมเลกุลที่มี “เมอร์” เพียง 1 หน่วยก็จะเรียกว่า “มอนอเมอร์” (Monomer) ซึ่งเป็นสารตั้งต้นของพอลิเมอร์นั่นเอง

1. การจำแนกชนิดของพอลิเมอร์

1.1 จำแนกพอลิเมอร์ตามชนิดของมอนอเมอร์ที่เป็นองค์ประกอบ

เมื่อจำแนกพอลิเมอร์ตามชนิดของมอนอเมอร์ที่เป็นองค์ประกอบ สามารถจำแนกออกเป็น 2 ชนิด ได้แก่

1.1.1 โฮโมพอลิเมอร์ (Homopolymers) เกิดจากมอนอเมอร์ชนิดเดียวมาต่อกัน แสดงตัวอย่างโครงสร้างดังภาพที่ 1 โฮโมพอลิเมอร์มีทั้งโฮโมพอลิเมอร์ธรรมชาติและโฮโมพอลิเมอร์สังเคราะห์ ซึ่งโฮโมพอลิเมอร์ธรรมชาติ ได้แก่ เซลลูโลส (มอนอเมอร์ คือ กลูโคส) ยางธรรมชาติ (มอนอเมอร์ คือ ไอโซพรีน) ส่วนโฮโมพอลิเมอร์สังเคราะห์ ได้แก่ พอลิเอทิลีน (มอนอเมอร์ คือ เอทิลีน) พอลีสไตรีน (มอนอเมอร์ คือ สไตรีน) เช่น แป้ง พอลิเอทิลีน พอลิไวนิลคลอไรด์ เป็นต้น



ภาพที่ 1 โครงสร้างของโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์

1.1.2 โคพอลิเมอร์ (Copolymers) เกิดจากมอนอเมอร์มากกว่าหนึ่งชนิดมาทำปฏิกิริยากัน ภาพที่ 2 แสดงตัวอย่างโครงสร้างโมเลกุลโคพอลิเมอร์ โคพอลิเมอร์มีทั้งโคพอลิเมอร์ธรรมชาติและโคพอลิเมอร์สังเคราะห์ ซึ่งโคพอลิเมอร์ธรรมชาติ ได้แก่ พอลิเพปไทด์หรือ โปรตีน (มอนอเมอร์

คือ กรดอะมิโนชนิดต่างๆ) ส่วนโคพอลิเมอร์สังเคราะห์ ได้แก่ ไนลอน (มอนอเมอร์ คือ กรดอะดิปิกและเฮกซะเอทิลีนไดเอมีน) พอลิยูรีเทน (มอนอเมอร์ คือ 1,2-เอทิลีน ไดไอโซไซยาเนตและ1,2-เอทิลีนไกลคอล)

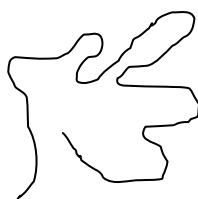


ภาพที่ 2 โครงสร้างของโมเลกุลโคพอลิเมอร์

1.2 จำแนกพอลิเมอร์ตามโครงสร้างของพอลิเมอร์

เมื่อจำแนกพอลิเมอร์ตามโครงสร้างของพอลิเมอร์ สามารถจำแนกออกเป็น 3 แบบได้แก่

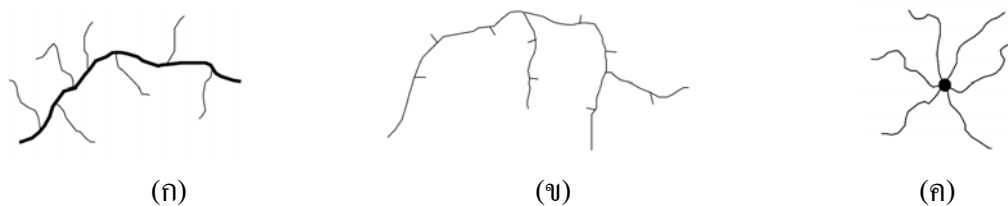
1.2.1 พอลิเมอร์แบบเส้น (Linear polymer) เป็นพอลิเมอร์ที่เกิดจากมอนอเมอร์สร้างพันธะโคเวเลนต์ยึดกันเป็นสายยาว ตัวอย่างโครงสร้างพอลิเมอร์แบบเส้นแสดงดังภาพที่ 3 พอลิเมอร์แบบเส้นนี้จะเรียงชิดกันมากกว่าโครงสร้างแบบอื่นๆ จึงมีความหนาแน่นและจุดหลอมเหลวสูง มีลักษณะแข็ง ขุ่นเหนียวกว่าโครงสร้างอื่นๆ ตัวอย่างเช่น พอลิไวนิลคลอไรด์ (PVC) พอลิสไตรีน (PS) พอลิเอทิลีนชนิดความหนาแน่นสูง (High density polyethylene, HDPE)



ภาพที่ 3 โครงสร้างของพอลิเมอร์แบบเส้น

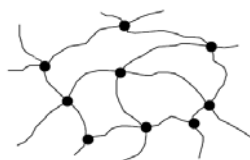
1.2.2 พอลิเมอร์แบบกิ่ง (Branched polymer) เป็นพอลิเมอร์ที่เกิดจากมอนอเมอร์ยึดกันแตกกิ่งก้านสาขา มีทั้งโซ่สั้นและโซ่ยาว กิ่งที่แตกจากพอลิเมอร์ของโซ่หลักทำให้ไม่สามารถจัดเรียงโซ่พอลิเมอร์ให้ชิดกันได้มาก จึงมีความหนาแน่นและจุดหลอมเหลวต่ำยืดหยุ่นได้ ความเหนียวต่ำ โครงสร้างเปลี่ยนรูปได้ง่ายเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ตัวอย่างเช่น พอลิเอทิลีนชนิดความหนาแน่นต่ำ (Low density polyethylene, LDPE) และชนิดความหนาแน่นต่ำเชิงเส้น (Linear low-density polyethylene, LLDPE) โดยพอลิเมอร์แบบสายโซ่กิ่งนี้ยังสามารถแบ่งรูปร่างได้อีกหลาย

ประเภท เช่น พอลิเมอร์แบบสายโซ่กิ่งสั้น (Short chain branched polymer) พอลิเมอร์แบบสายโซ่กิ่งยาว (Long chain branched polymer) พอลิเมอร์แบบสายโซ่กิ่งรูปหวี (Comb-Branched polymer) และพอลิเมอร์แบบสายโซ่กิ่งรูปดาว (Star polymer) (Rouault, 1996) แสดงตัวอย่างโครงสร้างพอลิเมอร์แบบกิ่งชนิดต่างๆ ดังภาพที่ 4



ภาพที่ 4 โครงสร้างของพอลิเมอร์แบบกิ่ง (ก) สายโซ่กิ่งยาว (ข) สายโซ่กิ่งรูปหวี และ (ค) สายโซ่กิ่งรูปดาว

1.2.3 พอลิเมอร์แบบร่างแห (Cross-linking polymer) เป็นพอลิเมอร์ที่เกิดจากมอนอเมอร์ต่อเชื่อมกันเป็นร่างแห แสดงตัวอย่างโครงสร้างดังภาพที่ 5 พอลิเมอร์แบบร่างแหมีความแข็งแรง ปรราะหักง่าย มีกิ่งสาขา เชื่อมโยงภายในโมเลกุลหรือกับโมเลกุลอื่นจนกลายเป็นร่างแห ตัวอย่างเช่น เบกาไลต์ เมลามีนใช้ทำถ้วยชาวม



ภาพที่ 5 โครงสร้างของพอลิเมอร์แบบร่างแห

2. น้ำหนักโมเลกุลและการกระจายตัวของน้ำหนักโมเลกุลพอลิเมอร์

เนื่องจากโดยทั่วไปน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์แต่ละโมเลกุลจะแตกต่างกัน และไม่สามารถให้เตรียมให้มีน้ำหนักเท่ากันทุกโมเลกุลได้ ดังนั้นน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์จึงเป็นค่าเฉลี่ย โดยจะสามารถคำนวณน้ำหนักโมเลกุลได้ ถ้าทราบจำนวนของมอนอเมอร์ในโมเลกุลพอลิเมอร์ ซึ่งเรียกว่า Degree of polymerization, DP (Ferdinand, 2003)

$$\text{Molecular Weight, MW} = \text{DP} \times \text{Mo} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \text{โดยที่ } \text{Mo} &= \text{น้ำหนักโมเลกุลของมอนอเมอร์} \\ \text{MW} &= \text{น้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์} \end{aligned}$$

Degree of polymerization ไม่ใช่ค่าคงที่ดังได้กล่าวแล้วข้างต้นและ Degree of polymerization มีลักษณะเป็น distribution ดังนั้น น้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์จึงเป็น distribution เช่นเดียวกัน ซึ่งเราสามารถคำนวณค่าน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยแบบต่างๆ ได้หากทราบรายละเอียดการกระจายตัวของน้ำหนักโมเลกุล (Sperling, 2001) น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยสามารถนิยามได้หลายแบบ ดังนี้

2.1 น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยตามจำนวน (Number averaged molecular weight, \bar{M}_n)

$$\bar{M}_n = \frac{\sum N_i M_i}{\sum N_i} = \frac{1}{\sum (w_i / M_i)} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \text{โดยที่ } N_i &= \text{จำนวนของ species } i \text{ ที่มีน้ำหนักโมเลกุล } M_i \\ w_i &= \text{weight fraction ของ species } i \\ &= \frac{N_i M_i}{\sum N_i M_i} \end{aligned}$$

2.2 น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยตามน้ำหนัก (Weight averaged molecular weight, \bar{M}_w)

$$\bar{M}_w = \sum w_i M_i \quad (3)$$

$$w_i = N_i M_i / \sum N_i M_i \quad (4)$$

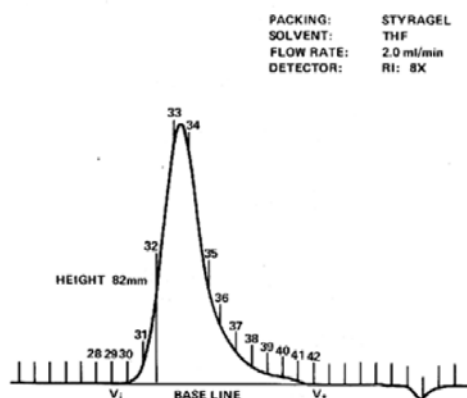
$$\bar{M}_w = \frac{\sum N_i M_i^2}{\sum N_i M_i} \quad (5)$$

อัตราส่วนระหว่าง $\bar{M}_w / \bar{M}_n \geq 1$ เสมอ ซึ่ง \bar{M}_w / \bar{M}_n ที่มีค่ามากกว่า 1 นี้เรียกว่า polydispersity หรือ การกระจายของน้ำหนักโมเลกุล (molecular weight distribution, MWD) และ ถ้าทุกโมเลกุลของพอลิเมอร์มีน้ำหนักเท่ากัน จะได้ว่า $\bar{M}_w / \bar{M}_n = 1$

2.3 น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยแบบอื่นๆ เช่น \bar{M}_v หรือ \bar{M}_z คือ น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยตามความหนืด (The Viscosity-Average Molecular Weight) คำนวณได้จากการวัดความหนืด ซึ่งเป็น empirical method และได้จากวิธี sedimentation equilibrium

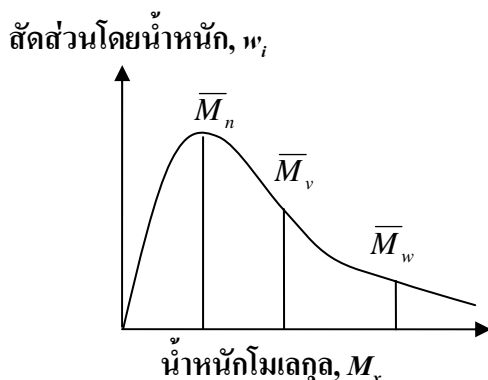
$$\bar{M}_z = \frac{\sum N_i M_i^3}{\sum N_i M_i^2} = \frac{\sum w_i M_i^2}{\sum w_i M_i} \quad (6)$$

อย่างไรก็ตาม น้ำหนักโมเลกุลที่นิยมใช้ คือ \bar{M}_w และ \bar{M}_n ซึ่งวัดได้จากสมบัติที่ขึ้นอยู่กับน้ำหนักและจำนวนโมเลกุลตามลำดับ ในปัจจุบันเทคนิคที่ใช้กันแพร่หลายสำหรับวัดน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์ คือ Gel Permeation Chromatography หรือ GPC (Michael, 2003) ซึ่งจะได้ทั้งข้อมูลของ \bar{M}_w และ \bar{M}_n ในขณะเดียวกัน ตัวอย่างของผลจาก GPC แสดงดังภาพที่ 6



ภาพที่ 6 ตัวอย่างผลการกระจายตัวของน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์ที่ได้จากวิธี GPC

โดยทั่วไปแล้วพบว่าพอลิเมอร์มีการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลและน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยที่ได้จากการคำนวณทั้ง 3 สมการข้างต้นมีค่าไม่เท่ากัน โดยค่า $\bar{M}_w > \bar{M}_v > \bar{M}_n$ ดังภาพที่ 7



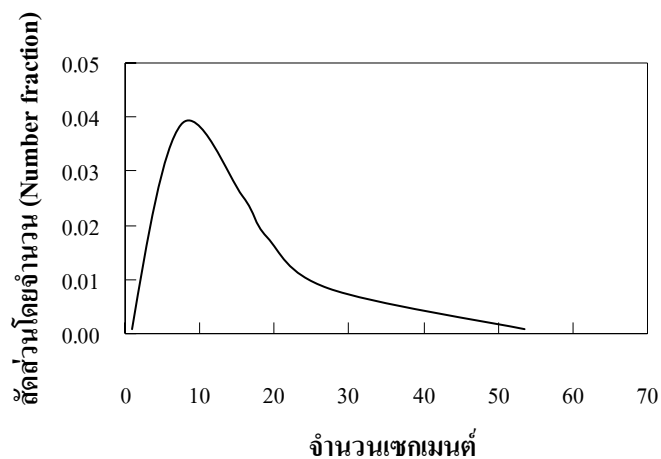
ภาพที่ 7 การกระจายของน้ำหนักโมเลกุลและน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยของพอลิเมอร์ซึ่งแสดงโดยค่า \bar{M}_w , \bar{M}_v และ \bar{M}_n

น้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์มีผลต่อสมบัติหลายๆ อย่างของพอลิเมอร์และเป็นสิ่งที่จำกัดการใช้งานพอลิเมอร์ หากน้ำหนักโมเลกุลยังไม่สูงมากพอ วัสดุนั้นจะไม่มีสมบัติเชิงกลเพียงพอที่จะสามารถใช้งานได้ วัสดุจะกลายเป็นของเหลวที่ไม่มีสมบัติเชิงกลเลย และนอกจากน้ำหนักโมเลกุลแล้ว ปัจจัยที่มีความสำคัญค่อนข้างมากอีกปัจจัยหนึ่ง คือ การกระจายของน้ำหนักโมเลกุล (Molecular weight distribution, MWD) (George, 1991) ซึ่งกำหนดโดย Polydispersity (\bar{M}_w / \bar{M}_n) ซึ่งถ้า $MWD = 1$ แสดงว่าพอลิเมอร์ทุกโมเลกุลมีมวลโมเลกุลเท่ากันหมดเรียกว่า Monodisperse แต่ในทางปฏิบัติแล้วพอลิเมอร์ที่ผลิตขึ้นโดยทั่วไปจะประกอบไปด้วยโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีมวลโมเลกุลแตกต่างกัน ดังนั้นระบบทั่วไปจะมี MWD สูงกว่า 1 เสมอและจะมีค่าเพิ่มมากขึ้นสำหรับพอลิเมอร์ที่มีการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลกว้างหรือแต่ละโมเลกุลมีขนาดต่างกันมาก โดยอาจอยู่ในช่วง 2-20 ซึ่งพอลิเมอร์ในกลุ่มนี้มีลักษณะที่เรียกว่า Polydisperse หรือในแต่ละโมเลกุลมีลำดับการจัดเรียงตำแหน่งของมอนอเมอร์ไม่แน่นอน จำนวนเซกเมนต์ของแต่ละโมเลกุลไม่เท่ากัน และน้ำหนักโมเลกุลต่างกัน เมื่อกล่าวถึงน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์จึงหมายถึงค่าเฉลี่ยของน้ำหนักโมเลกุลทั้งหมด ซึ่งในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจศึกษาระบบที่ใกล้เคียงกับทางปฏิบัติและ Flory distribution เป็นรูปแบบการกระจายตัวทางทฤษฎีของมวลโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้รับการยอมรับว่าสามารถอธิบายพอลิเมอร์ที่ผลิตได้จากปฏิกิริยาสังเคราะห์พอลิเมอร์โดยทั่วไปได้เป็นอย่างดี ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงเลือกศึกษาลักษณะการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ในโมเลกุลพอลิเมอร์ตาม Flory distribution และตัวอย่างลักษณะการกระจายตัวแสดงดังภาพที่ 8

สมการที่ใช้ในการศึกษาการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีลักษณะที่เรียกว่า Polydisperse ได้แก่

$$w_i = ip^{i-1}(1-p)^2 \quad (7)$$

โดยที่ w_i = สัดส่วนโดยน้ำหนักของพอลิเมอร์ที่มีจำนวนของเซกเมนต์เท่ากับ i
 i = จำนวนเซกเมนต์ในโมเลกุลพอลิเมอร์
 p = extent of reaction ซึ่งเท่ากับ $1-1/X_N$



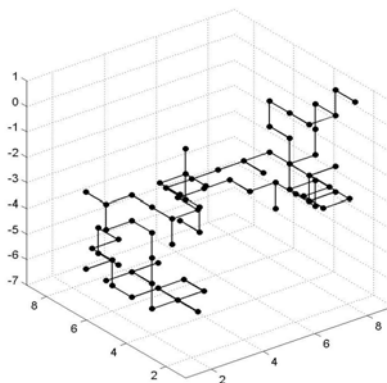
ภาพที่ 8 ลักษณะการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตามแบบ Flory Distribution (Flory, 1967)

3. การจำลองโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์

3.1 แบบจำลอง

3.1.1 วิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random walk, RW)

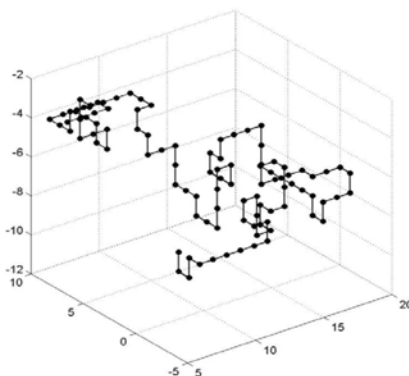
แบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเองใช้พิจารณาโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่อุดมคติ (Ideal chain) แสดงดังภาพที่ 9 ซึ่งสายโซ่อุดมคติเป็นการจำลองโมเลกุลของพอลิเมอร์อย่างง่ายที่สุด โดยถือว่ามอนอเมอร์ที่อยู่ภายในโมเลกุลของพอลิเมอร์ไม่มีแรงกระทำระหว่างกัน จะมีความอิสระในการเคลื่อนที่ภายในทำให้เกิดโครงสร้างการวางตัว (Conformation) ได้หลายรูปแบบ และสายโซ่อุดมคตินี้ใช้อธิบายโมเลกุลพอลิเมอร์ที่อยู่ในสภาวะพอลิเมอร์เหลว



ภาพที่ 9 ตัวอย่างโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่จำลองโดยแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) ในปริภูมิ 3 มิติ

3.1.2 วิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self-avoiding walk, SAW)

แบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง ใช้พิจารณาโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ที่ไม่เป็นอุดมคติ (Non-ideal chain) แสดงดังภาพที่ 10 ซึ่งสายโซ่ที่ไม่เป็นอุดมคติใช้อธิบายโมเลกุลพอลิเมอร์ในสารละลายเจือจางได้ดีกว่าสายโซ่อุดมคติ เนื่องจากในแบบจำลองของสายโซ่อุดมคติจะยอมให้สายโซ่พอลิเมอร์ย้ายกลับมาซ้อนทับตัวเองได้ซึ่งเป็นไปไม่ได้ในเชิงกายภาพ เพราะในแต่ละเซกเมนต์จะมีปริมาตรของตัวเองที่เรียกว่า Excluded volume (Traoka, 2002) จึงมีแบบจำลองที่นับผลของ Excluded volume เพิ่มขึ้นมา ซึ่งที่เซกเมนต์ใดๆ ภายในสายโซ่พอลิเมอร์จะไม่ซ้อนทับตัวเองเลยในแลตทิซสเปส และในงานวิจัยนี้มุ่งสนใจศึกษาวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง สำหรับสายโซ่ที่ไม่เป็นอุดมคติเป็นหลัก



ภาพที่ 10 ตัวอย่างโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่จำลองโดยแบบจำลอง การเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self-avoiding walk, SAW) ในปริภูมิ 3 มิติ

3.2 ตัวแปร

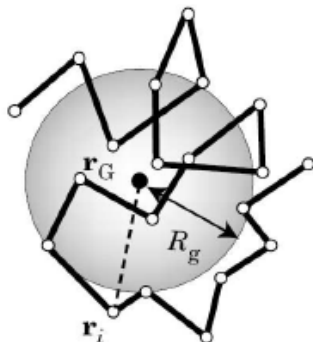
3.2.1 ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่น (Mean-square radius of gyration, $\langle R_g^2 \rangle$)

ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่น (Mean-square radius of gyration, $\langle R_g^2 \rangle$) คือ ระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่วัดจากแต่ละเซกเมนต์มาถึงจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลพอลิเมอร์ (Traoka, 2002) ซึ่งเป็นทางเลือกหนึ่งที่สามารถใช้ออกขนาดของพอลิเมอร์ได้ โดยสามารถแบ่งการคำนวณค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่น ได้เป็น 2 กรณี คือ กรณีใช้วิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง และกรณีใช้วิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีการซ้อนทับตัวเอง ซึ่งงานวิจัยนี้มุ่งสนใจศึกษากรณีใช้วิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีการซ้อนทับตัวเอง แสดงตัวอย่างดังภาพที่ 11

ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สำหรับวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีการซ้อนทับตัวเองสามารถคำนวณได้ดังสมการที่ 8

$$\langle R_g^2 \rangle = \frac{1}{(N+1)} \sum_{i=0}^N \langle (r_i - r_{mean})^2 \rangle \quad (8)$$

โดย r_i = เวกเตอร์ตำแหน่ง (x, y, z) หน่วยโครงสร้าง i ระหว่างเซกเมนต์ในปริภูมิ
 r_{mean} = ตำแหน่งจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลพอลิเมอร์
 N = จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด



ภาพที่ 11 ระยะทางเฉลี่ยที่วัดจากแต่ละเซกเมนต์มาถึงจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลพอลิเมอร์แบบสายโซ่ไม่เป็นอุดมคติ

ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่บอกถึงขนาดเฉลี่ยในกรณีศึกษาพอลิเมอร์ที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ (Polydisperse polymer) ซึ่งการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์เป็นไปตาม Flory distribution สามารถคำนวณได้จากสมการที่ 9

$$\langle R_g^2 \rangle = \sum (w_i \cdot \langle R_g^2 \rangle_i) \quad (9)$$

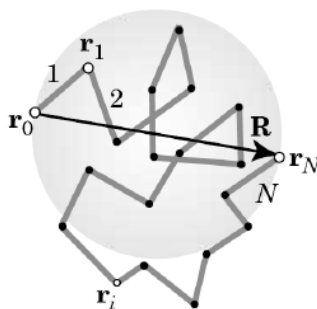
3.2.2 ค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน (Mean-square end-to-end vector, $\langle R_e^2 \rangle$)

ค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน (Mean-square end-to-end distance, $\langle R_e^2 \rangle$) เป็นอีกหนึ่งพารามิเตอร์ที่สามารถใช้ระบุขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์ได้ ทั้งนี้จำเป็นต้องพิจารณาเป็นค่าเฉลี่ยกำลังสองเนื่องจากค่าเฉลี่ยของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านจะมีค่าเท่ากับศูนย์หากพิจารณาเป็นเวกเตอร์ทิศทาง เพราะโอกาสในการเกิดขึ้นของค่าเฉลี่ยของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านที่เป็นค่าบวกและค่าลบมีค่าเท่ากัน ทำให้ค่าเฉลี่ยของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านจะหักล้างกันไป ดังนั้นเราพิจารณาคำนวณเป็นค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน หากต้องการทราบขนาดของพอลิเมอร์สามารถทำได้โดยการถอดรากที่สองของค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน ภาพที่ 12 แสดงตัวอย่างของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุล

ค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์สำหรับวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีกีดขวางตัวเองสามารถคำนวณได้ดังสมการที่ 10

$$\langle R_e^2 \rangle = \sum (r_N - r_0)^2 \quad (10)$$

โดยที่ r_0 = เวกเตอร์ตำแหน่งเริ่มต้นของโมเลกุลพอลิเมอร์
 r_N = เวกเตอร์ตำแหน่งสุดท้ายของโมเลกุลพอลิเมอร์



ภาพที่ 12 ระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์แบบสายโซ่ไม่อุดมคติ

ค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่บอกถึงขนาดเฉลี่ยในกรณีศึกษาพอลิเมอร์ที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ (Polydisperse polymer) ซึ่งการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์เป็นไปตาม Flory distribution สามารถคำนวณได้จากสมการที่ 11

$$\langle R_e^2 \rangle = \sum (w_i \cdot \langle R_e^2 \rangle_i) \quad (11)$$

ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์สำหรับโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ตรงสามารถคำนวณได้ดังสมการที่ 12

$$\langle R_g^2 \rangle = \frac{\langle R_e^2 \rangle}{6} \quad (12)$$

3.2.3 g-factor

g-factor (Sadayuki, 1999) คือ ค่าที่ใช้บอกกว่าขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์ใดๆ มีขนาดใหญ่หรือเล็กกว่าโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ตรงเป็นสัดส่วนเท่าไร ซึ่งค่า g-factor นิยามโดย

$$g - factor = \frac{\langle R_g^2 \rangle_{branch}}{\langle R_g^2 \rangle_{linear}} \quad (13)$$

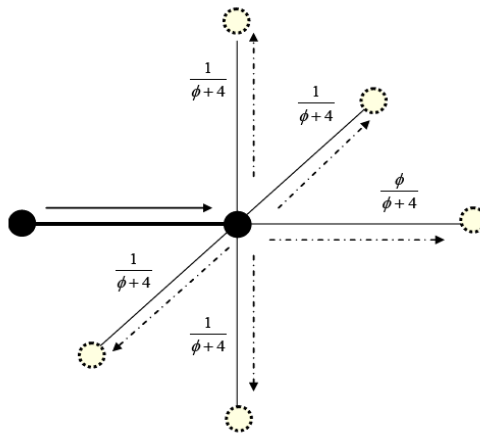
โดยที่ $\langle R_g^2 \rangle_{branch} =$ ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่ง
 $\langle R_g^2 \rangle_{linear} =$ ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ตรง

3.2.4 Stiffness ratio

Stiffness ratio คือ อัตราส่วนของโอกาสที่โมเลกุลพอลิเมอร์จะเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดิมเมื่อเทียบกับทิศทางอื่น (Pattanasak, 2007) สามารถนิยามโดยสมการที่ 14 ตัวอย่างการเคลื่อนที่ของโมเลกุลพอลิเมอร์ในปริภูมิ 3 มิติที่ถูกจำลองขึ้นเมื่อกำหนดให้ค่า Stiffness ratio เท่ากับ ϕ แสดงดังภาพที่ 13

$$\text{Stiffness ratio} = \frac{\phi}{\phi + 4} \quad (14)$$

โดยที่ $\phi =$ อัตราส่วนของโอกาสที่โมเลกุลพอลิเมอร์จะเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดิมเมื่อเทียบกับทิศทางอื่น



ภาพที่ 13 ตัวอย่างการเคลื่อนที่ของ โมเลกุลพอลิเมอร์ในปริภูมิ 3 มิติเมื่อกำหนดให้ค่า Stiffness ratio เท่ากับ ϕ

งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ศรินทร และ ภัทรกร (2548) ศึกษาเกี่ยวกับการจำลองคุณลักษณะโมเลกุลโซโพลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิดยืดหยุ่นและกึ่งยืดหยุ่น (Flexible and semi-flexible chains) โดยใช้เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และใช้การเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) และการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self avoiding walk, SAW) ซึ่งทำการจำลองในปริภูมิ 2 มิติและปริภูมิ 3 มิติ ผลจากการจำลองพบว่าเมื่อมวลโมเลกุลโพลิเมอร์เพิ่มขึ้น ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลโพลิเมอร์เพิ่มขึ้นด้วย และผลการจำลองมีค่าใกล้เคียงกับค่าทางทฤษฎี สำหรับการจำลองโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่ตรงแบบกึ่งยืดหยุ่น พบว่าเมื่อค่า Stiffness ratio เพิ่มขึ้น ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโพลิเมอร์เพิ่มขึ้นด้วยเมื่อมวลโมเลกุลเท่ากัน แม้ว่าจะจำลองในปริภูมิที่ต่างกัน ซึ่งค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านที่เพิ่มขึ้นแสดงให้เห็นสัดส่วนของขนาดโมเลกุลโพลิเมอร์ที่เพิ่มขึ้น

Pattanasak (2007) ได้ทำการศึกษาเกี่ยวกับการจำลองโครงสร้างการวางตัวและคุณลักษณะของโมเลกุลโซโพลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิดยืดหยุ่นและกึ่งยืดหยุ่น (Flexible and semi-flexible chains) โดยใช้เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self avoiding walk, SAW) โดยได้พิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลโพลิเมอร์เป็นฟังก์ชันกับจำนวนเซกเมนต์และค่า Stiffness ratio ดังสมการที่ 15 และ 16 ตามลำดับ

$$\langle R_g^2 \rangle^{0.5} = (0.0263\phi + 0.3922)N_{total}^{0.6} \quad (15)$$

$$\langle R_e^2 \rangle^{0.5} = (0.0698\phi + 0.9767)N_{total}^{0.6} \quad (16)$$

โดยที่ ϕ = อัตราส่วนของโอกาสที่โมเลกุลโพลิเมอร์จะเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดิมเมื่อเทียบกับทิศทางอื่น
 N_{total} = จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด

จากสมการความสัมพันธ์ดังกล่าว พบว่าค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์แปรผันตามค่า Stiffness ratio ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่าเมื่อโมเลกุลพอลิเมอร์มีจำนวนเซกเมนต์เท่ากัน ขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์จะใหญ่ขึ้นเมื่อค่า Stiffness ratio มากขึ้น ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจศึกษาคุณลักษณะ (ขนาดและรูปร่าง) ของพอลิเมอร์ที่มีโครงสร้างซับซ้อนขึ้น โดยพิจารณาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block โดยกำหนดให้โคพอลิเมอร์แต่ละชนิดมี A และ B เป็นองค์ประกอบ โดยที่หน่วยโครงสร้าง A และ B เป็นโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิดกึ่งยืดหยุ่น (เซกเมนต์ที่มีค่า Stiffness ratio ไม่เท่ากัน)

Anantawaraskul *et al.* (2005) ศึกษาเกี่ยวกับการจำลองคุณลักษณะของโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรง โดยใช้เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และใช้วิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) และการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self avoiding walk, SAW) ซึ่งทำการจำลองในปริภูมิ 2 มิติและปริภูมิ 3 มิติ ในการจำลองโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรง พบว่าสามารถหาความสัมพันธ์ระหว่างจำนวนเซกเมนต์และค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของพอลิเมอร์ได้ ดังตารางที่ 1

ตารางที่ 1 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดใน โมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรง จำลองโครงสร้างในปริภูมิ 2 มิติและ 3 มิติ

แบบจำลอง	$\langle R_g^2 \rangle$	$\langle R_c^2 \rangle$
2D-SAW	$(0.3312 N_{step}^{3/4})^2$	$(0.8839 N_{step}^{3/4})^2$
3D-SAW	$(0.4102 N_{step}^{3/5})^2$	$(1.0301 N_{step}^{3/5})^2$

โดยที่ N_{step} = จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด

ในงานวิจัยนี้จะนำความสัมพันธ์ดังกล่าวไปประยุกต์ใช้กับโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีจำนวนเซกเมนต์และโครงสร้างซับซ้อนมากขึ้น โดยทำการศึกษาเพิ่มเติมถึงผลกระทบของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยใน โมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีต่อคุณลักษณะ (ขนาดและรูปร่าง) และโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์ชนิดสายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม

Flory distribution (Ferdinand, 2003) โดยพิจารณาที่จำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยของโมเลกุลพอลิเมอร์เท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ ตามลำดับ

และในปีเดียวกัน Anantawaraskul *et al* (2005) ได้ศึกษาเกี่ยวกับการจำลองคุณลักษณะของโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว (Star polymer) ในสารละลาย โดยใช้เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และใช้วิธีการจำลองการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์เป็นการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการช้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) และการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ช้อนทับตัวเอง (Self avoiding walk, SAW) ซึ่งได้ทำการจำลองในปริภูมิ 2 มิติ จากการจำลองพบว่าค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวน้อยกว่าโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ตรงเมื่อนำหนักโมเลกุลเท่ากัน และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวลดลงเมื่อจำนวนแขนของพอลิเมอร์เพิ่มขึ้น แสดงผลการจำลองดังตารางที่ 2

ตารางที่ 2 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดใน โมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว จำลองโครงสร้างในปริภูมิ 2 มิติ

จำนวนแขน	$\langle R_g^2 \rangle$	$\langle R_e^2 \rangle$
2	$0.1097N_{step}^{1.5}$	$0.7813N_{step}^{1.5}$
3	$0.0771N_{step}^{1.5}$	$0.4431N_{step}^{1.5}$
4	$0.0571N_{step}^{1.5}$	$0.3229N_{step}^{1.5}$

โดยที่ N_{step} = จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด

Kazuhito Shida *et al.* (2005) ศึกษาเกี่ยวกับการหาค่า hydrodynamic factor 2 ตัวของพอลิเมอร์สายโซ่ตรง (Linear polymer) และสายโซ่กิ่งรูปดาว (Star polymer) ที่มีจำนวนแขน 3, 4, 6 และ 8 แขนตามลำดับ ซึ่งได้แก่ ค่าฟิ (ϕ) และค่าโรล (ρ) โดยทำการจำลองโครงสร้างในปริภูมิ 3 มิติ ภายใต้สภาวะ theta condition ด้วยเทคนิคการจำลอง Monte Carlo โดยใช้ Enrichment Algorithm และตัวแปรที่ใช้ในการศึกษาได้แก่ ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่น $\langle R_g^2 \rangle$, ค่า hydrodynamic radius, ค่า intrinsic viscosity (η) และค่า g factor และจากความสัมพันธ์ของคุณลักษณะเหล่านี้เอง

ทำให้สามารถคำนวณหาค่า hydrodynamic factor ทั้ง 2 ตัวได้ และจากการจำลองพบว่าค่าฟิ (ϕ) เพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนแขนของพอลิเมอร์มากขึ้น เนื่องจากน้ำหนักโมเลกุลพอลิเมอร์มากขึ้น แต่สายโมเลกุลสั้นลง ส่วนค่าโรล (ρ) ลดลงเมื่อจำนวนแขนของพอลิเมอร์มากขึ้น เนื่องจากพอลิเมอร์มีสายโมเลกุลสั้นลง และสามารถสรุปได้ว่าเมื่อจำนวนแขนของพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวเพิ่มขึ้น โมเลกุลพอลิเมอร์จะมีขนาดลดลง แสดงผลดังตารางที่ 3

ตารางที่ 3 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันกับจำนวนแขนของโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาว จำลองโครงสร้างในปริภูมิ 3 มิติ

จำนวนแขน	$\langle R_g^2 \rangle / N$
2	0.33
3	0.25
4	0.20
6	0.15
8	0.11

โดยที่ N = จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด

มนต์ชัย สารทอง (2548) ได้ทำการศึกษาเกี่ยวกับการจัดทำโปรแกรมเพื่อจำลองการวางตัวของสายพอลิเมอร์ โดยโปรแกรมหาดังกล่าวจะช่วยให้ผู้ที่ต้องการศึกษาเกี่ยวกับสมบัติของพอลิเมอร์สามารถนำโปรแกรมไปใช้จำลองรูปแบบการวางตัวของสายพอลิเมอร์ เพื่อใช้ในการทำนายสมบัติของพอลิเมอร์และเพิ่มความสะดวกและรวดเร็วในการศึกษาสมบัติต่างๆ ของพอลิเมอร์ โดยใช้วิธี Pivot Algorithm ในการจำลองรูปแบบการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์

Michael Rubinstein (2003) รายงานสรุปความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชัน $\langle R_g^2 \rangle$ กับจำนวนแขนของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาว ได้โดยดั่งสมการที่ 17

$$\langle R_g^2 \rangle_{RW} = \left(\frac{Nb^2}{6f} \right) \cdot \left(3 - \frac{2}{f} \right) \quad (17)$$

โดยที่ N = จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด
 b = กำหนดให้เท่ากับ 1
 f = จำนวนแขนของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว

และสามารถหาขนาดของโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวซึ่งบอกด้วยค่า g -factor ได้ดังสมการที่ 18

$$g - factor = \frac{\langle R_g^2 \rangle_{RW,branch}}{\langle R_g^2 \rangle_{RW,linear}} \quad (18)$$

โดยที่ $\langle R_g^2 \rangle_{RW,branch}$ = ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งซึ่งใช้วิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง

$\langle R_g^2 \rangle_{RW,linear}$ = ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่ตรงซึ่งใช้วิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง

ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยสนใจศึกษาเพิ่มเติมเกี่ยวกับการจำลองคุณลักษณะของพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว (Star polymer) ในสารละลาย โดยศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวซึ่งสามารถบอกด้วยค่า g -factor หรือ $\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch}$ และจากสมการที่ 17 ที่ได้กล่าวมาแล้วข้างต้น ผู้วิจัยจึงทดสอบสมมติฐานว่าค่า g -factor ที่ได้จากวิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเองมีค่าใกล้เคียงกับค่า g -factor ที่ได้จากวิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มี การซ้อนทับตัวเอง โดยเสนอสมการเพื่อทดสอบสมมติฐานดังนี้

$$g - factor = \frac{\langle R_g^2 \rangle_{RW,branch}}{\langle R_g^2 \rangle_{RW,linear}} = \frac{\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch}}{\langle R_g^2 \rangle_{SAW,linear}} \quad (19)$$

โดยที่ $\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch} =$ ค่าเฉลี่ยยกกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สาย
 โชกึ่งซึ่งใช้วิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีการ
 ซ้อนทับตัวเอง

$\langle R_g^2 \rangle_{SAW,linear} =$ ค่าเฉลี่ยยกกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์สาย
 โชตรงซึ่งใช้วิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่มีการ
 ซ้อนทับตัวเอง

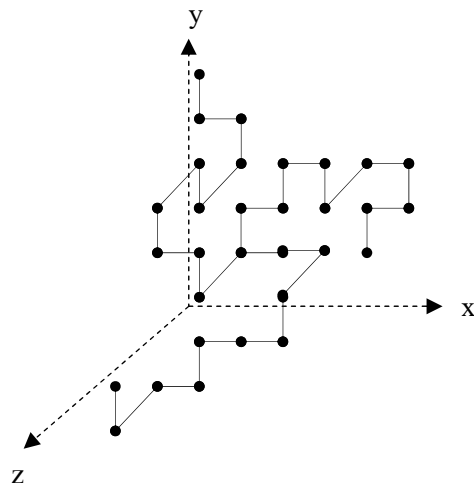
จากสมการที่ 19 สามารถประมาณเพื่อหาค่า $\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch}$ ได้ดังนี้

$$\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch} = \frac{\langle R_g^2 \rangle_{RW,branch}}{\langle R_g^2 \rangle_{RW,linear}} \cdot \langle R_g^2 \rangle_{SAW,linear} \quad (20)$$

และเมื่อนำความสัมพันธ์จากสมการที่ 17 มาใช้แทนค่าลงในสมการที่ 20 จะสามารถคำนวณหาค่า
 $\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch}$ ดังสมการที่ 21

$$\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch} = \left(\frac{3}{f} - \frac{2}{f^2} \right) \cdot \langle R_g^2 \rangle_{SAW,linear} \quad (21)$$

และงานวิจัยนี้ นำโปรแกรมที่ถูกต้องจัดทำขึ้น (มนต์ชัย, 2548) มาใช้ในการจำลองโครงสร้างโมเลกุล
 พอลิเมอร์สายโชกึ่งรูปดาว ซึ่งมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 60, 120, 180, 240 และ 300
 เซกเมนต์ และมีจำนวนแขนเท่ากับ 2, 3, 4, 5 และ 6 แขน ตามลำดับ เพื่อศึกษาถึงผลกระทบของ
 จำนวนเซกเมนต์และจำนวนแขนที่มีต่อขนาดและรูปร่างของโมเลกุลพอลิเมอร์ โดยแสดงตัวอย่าง
 การจำลองโมเลกุลพอลิเมอร์สายโชกึ่งรูปดาวที่มีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 30 เซกเมนต์ และ
 มีจำนวนแขน 3 แขน ดังภาพที่ 14



ภาพที่ 14 ตัวอย่างการจำลองโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 30 เซกเมนต์ และมีจำนวนแขน 3 แขน

อุปกรณ์และวิธีการ

อุปกรณ์

ฮาร์ดแวร์

เครื่องคอมพิวเตอร์ Intel Pentium 4, CPU 3.20 GHz, HD 3.20 GB, memory 1 GB

เครื่องคอมพิวเตอร์ Intel Pentium 4, CPU 2.80 GHz, HD 1.87 GB, memory 1 GB

เครื่องคอมพิวเตอร์ Intel Pentium, CPU Duo T2060, HD 120 GB, memory 512 MB

ซอฟต์แวร์

MATLAB 7.1

Microsoft Excel XP

Microsoft Windows XP

วิธีการ

เนื่องจากงานวิจัยนี้ใช้เทคนิคการจำลอง Monte Carlo (เป็นเทคนิคที่ใช้ในการประมาณค่าตัวแปรหรือสิ่งที่เราสนใจจากการใช้ความน่าจะเป็นเข้ามาช่วย โดยการประมาณค่าๆ หนึ่งเราจะใช้การสุ่มค่าหลายๆ ค่า ซึ่งค่าที่ได้หลังจากนำมาเฉลี่ยแล้วจะเข้าใกล้ค่าคงที่ค่าหนึ่ง ซึ่งในความจริงแล้วเรายังไม่สามารถสรุปได้ทีเดียวว่าค่าที่ได้นั้นเป็นค่าที่ถูกต้องแล้ว แต่อาศัยนิยามจากความน่าจะเป็นว่าน่าจะเป็นค่าที่ถูกต้องมากหรือน้อยตามจำนวนข้อมูลในการจำลอง (Alan, 1987) โดยวิธีนี้จะมีประโยชน์ในการหาคำตอบแบบเป็นตัวเลข) โดยวิธีการจำลองการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์เป็นการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self avoiding walk, SAW) ในปริภูมิ 3 มิติ โดยแบ่งวัตถุประสงค์ของการศึกษาออกเป็น 3 กลุ่ม และแต่ละกลุ่มมีวิธีการจำลองที่แตกต่างกันดังนี้

1. การศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block สำหรับการศึกษากลุ่มนี้ใช้ Dimerization Algorithm ซึ่งทำงานด้วยหลัก divide and conquer (การแบ่งข้อมูลออกเป็นส่วนย่อยๆ แล้วทำการพิจารณาจัดการกับข้อมูลเฉพาะในส่วนย่อยๆ นั้นซึ่ง Algorithm จะทำการจัดการกับตัวข้อมูลเฉพาะส่วน และจัดการแบ่งข้อมูลออกเป็นกลุ่มย่อยเรื่อยๆ ไปจนกว่าจะเสร็จกระบวนการ) ร่วมกับ Non-reversal Random Walk Algorithm (Sokal, 1995) ซึ่งถือว่าการจำลองการเคลื่อนที่แบบไม่ซ้อนทับตัวเองที่มี

ประสิทธิภาพสำหรับแต่ละส่วนของโมเลกุลที่มีความยาวไม่มากนัก และในแต่ละรอบการจำลองจะกำหนดให้สร้างแบบจำลองขึ้นมาทั้งหมด 100,000 รูปแบบ เพื่อหาค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์







สำหรับกรณีการศึกษาเฉพาะ โมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block วิธีการจำลองเริ่มจากกำหนดให้แต่ละบล็อกนั้นมีความยืดหยุ่นของเชกเมนต์ไม่เท่ากัน และแบ่งการศึกษาออกเป็น 2 กรณี กรณีแรกจะกำหนดให้มีจำนวนเชกเมนต์ทั้งหมด (N_{total}) เท่ากับ 100 เชกเมนต์ และแบ่งพิจารณาออกเป็น 2 ข้าง โดยกำหนดให้จำนวนเชกเมนต์เท่ากันทั้ง 2 ข้าง ($N_A:N_B$) เท่ากันข้างละ 50 เชกเมนต์ โดยกำหนดให้ค่า Stiffness ratio สำหรับเชกเมนต์ทั้ง 2 ข้าง ($\phi_A:\phi_B$) มีอัตราส่วนที่แตกต่างกันคือ 1:1, 1:2, 1:3, 1:5 และ 1:10 ซึ่งเงื่อนไขในการจำลองแสดงรายละเอียดดังตารางที่ 4

ตารางที่ 4 เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block เมื่อกำหนดให้สัดส่วนของจำนวนเชกเมนต์แต่ละข้างเท่ากัน และอัตราส่วนของค่า Stiffness ratio แตกต่างกัน

รูปแบบการวางตัว	โครงสร้างโมเลกุล	$N_A:N_B$	$\phi_A:\phi_B$
A-B		50:50	1:1
		50:50	1:2
		50:50	1:3
		50:50	1:5
		50:50	1:10

กรณีที่ 2 กำหนดให้จำนวนเชกเมนต์ทั้งหมด (N_{total}) เท่ากับ 100 เชกเมนต์ และแบ่งพิจารณาออกเป็น 2 ข้าง โดยกำหนดให้จำนวนเชกเมนต์ 2 ข้าง ($N_A:N_B$) แตกต่างกันเป็นอัตราส่วนดังนี้ คือ 20:80, 40:60, 60:40 และ 80:20 เชกเมนต์ และค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบ A (ϕ_A) เท่ากับ 1 และค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบ B (ϕ_B) เท่ากับ 10 โดยเงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองแสดงรายละเอียดดังตารางที่ 5

ตารางที่ 5 เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block เมื่อกำหนดให้อัตราส่วนของค่า Stiffness ratio เท่ากัน และสัดส่วนของจำนวนเซกเมนต์แต่ละข้างแตกต่างกัน

รูปแบบการวางตัว	โครงสร้างโมเลกุล	$N_A:N_B$	$\phi_A:\phi_B$
A-B		0:100	0:10
		20:80	1:10
		40:60	1:10
		60:40	1:10
		80:20	1:10
		100:0	1:0

และสำหรับการศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block กำหนดให้จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 120 เซกเมนต์เท่ากันทุกกรณี และกำหนดให้สัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ของแต่ละโมเลกุลของ Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block มี A และ B เป็นองค์ประกอบ โดยทุกองค์ประกอบของ A มีค่า Stiffness ratio เท่ากับ 1 และทุกองค์ประกอบของ B มีค่า Stiffness ratio เท่ากับ 10 และเงื่อนไขในการจำลองแสดงรายละเอียดดังตารางที่ 6

ตารางที่ 6 เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block

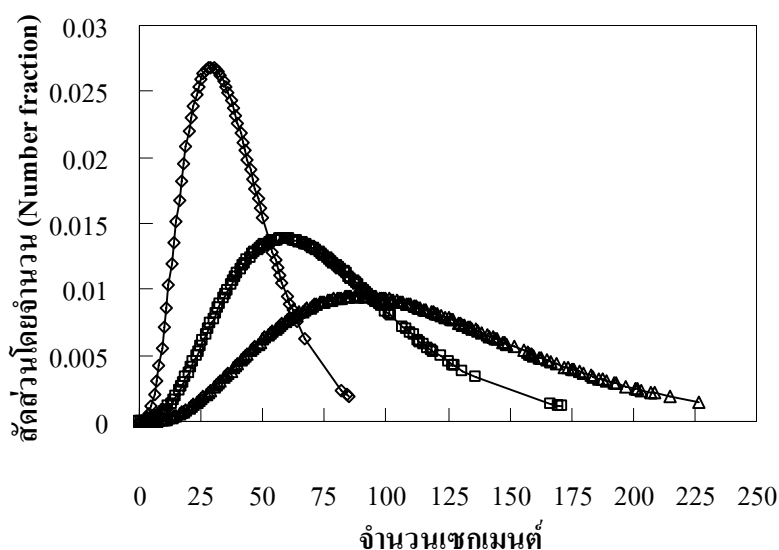
รูปแบบการวางตัว	โครงสร้างโมเลกุล	$N_A:N_B$	$\phi_A:\phi_B$
A-B		60:60	1:10
A-B-A		30:60:30	1:10:1
B-A-B		30:60:30	10:1:10
A-B-A-B		30:30:30:30	1:10:1:10
A-B-A-B-A		20:30:20:30:20	1:10:1:10:1
B-A-B-A-B		30:20:30:20:30	10:1:10:1:10
A-B-A-B-A-B		20:20:20:20:20:20	1:10:1:10:1:10

2. การศึกษาโมเลกุลไฮโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution ใช้ Dimerization Algorithm ร่วมกับ Non-reversal Random Walk Algorithm ในการจำลอง เพื่อหาค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์เช่นเดียวกับกลุ่มแรก โดยวิธีการจำลองในกรณีนี้เริ่มโดยการสุ่มตัวอย่างจำนวนเซกเมนต์จาก Flory distribution (สมการที่ 7) เป็นจำนวน 1,000 ค่า เพื่อเป็นตัวแทนของพอลิเมอร์ทั้งหมด และแต่ละจำนวนเซกเมนต์ที่ถูกสุ่มขึ้นมา 1,000 ค่านั้นนำมาทำการจำลองโครงสร้าง 50 ครั้งเพื่อหาขนาดเฉลี่ยและการกระจายตัวของขนาดของพอลิเมอร์ทั้งหมด โดยเงื่อนไขในการจำลองแสดงรายละเอียดดังตารางที่ 7

ตารางที่ 7 เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลไฮโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution

จำนวนเซกเมนต์เฉลี่ย	ϕ
10	1
20	1
30	1

และลักษณะการกระจายตัวตาม Flory distribution เมื่อมีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยแตกต่างกันในงานวิจัยนี้แสดงดังภาพที่ 15


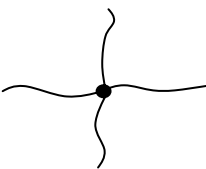
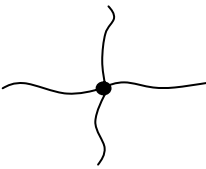
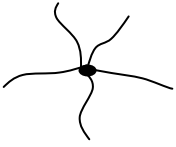


ภาพที่ 15 ลักษณะการกระจายตัวตาม Flory distribution เมื่อมีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (◇), 20 (□) และ 30 (△) เซกเมนต์

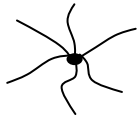
3. การศึกษาโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว วิธีการจำลองในกรณีนี้เริ่มโดยการกำหนดจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 120 เซกเมนต์ และจำนวนแขนของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวเท่ากับ 2, 3, 4, 5 และ 6 แขน โดยใช้ Pivot Algorithm ในการจำลอง ซึ่ง Pivot Algorithm (Neal, 1988) เป็น Algorithm สายโซ่มาร์คอฟสำหรับสุ่มตัวอย่างแบบพลวัตเพื่อลดเวลาในการสุ่มตัวอย่างลง ใช้สำหรับจำลองด้วยวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self-avoiding walk, SAW) โดยในแต่ละรอบการทำงาน จะสุ่มหาจุดหนึ่งบนเส้นทางเดินมาเป็น Pivot และนำจุดนั้นมาทำการหมุน สะท้อน หรือย้อนกลับ บนเส้นทางข้างหนึ่งของ Pivot นั้น ถ้าผลที่ได้ไม่มีจุดใดทับกัน ก็จะเป็นวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเองหรือถ้าไม่เป็นวิธีการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเองก็จะสุ่มหา Pivot ใหม่และทำแบบเดิมซ้ำอีกครั้ง จะสังเกตได้ว่าเส้นทางก่อนทำและหลังทำนั้นจะมีลักษณะที่คล้ายกัน แต่หากทำแบบนี้หลายๆ ครั้ง เราจะสามารถได้เส้นทางใหม่ที่ดูแล้วไม่ขึ้นกับเส้นทางเดิม (มนต์ชัย, 2549) โดยในแต่ละรอบการจำลอง จะกำหนดให้สร้างแบบจำลองขึ้นมาทั้งหมด 100,000 รูปแบบ เพื่อหาค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจ

เรขาคณิตของโมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว โดยเงื่อนไขในการจำลองแสดงรายละเอียดดังตารางที่ 8

ตารางที่ 8 เงื่อนไขที่ใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว

จำนวนแขน	จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด	จำนวนเซกเมนต์ต่อแขน	โครงสร้างโมเลกุล
2	60	30	
	120	60	
	180	90	
	240	120	
	300	150	
	60	20	
3	120	40	
	180	60	
	240	80	
	300	100	
	60	15	
	120	30	
4	180	45	
	240	60	
	300	75	
	60	12	
	120	24	
	180	36	
5	240	48	
	300	60	

ตารางที่ 8 (ต่อ)

จำนวนแขน	จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด	จำนวนเซกเมนต์ต่อแขน	โครงสร้างโมเลกุล
6	60	10	
	120	20	
	180	30	
	240	40	
	300	50	

ผลและวิจารณ์

1. กรณีศึกษาคุณลักษณะ (ขนาดและรูปร่าง) และโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีความซับซ้อนทางโครงสร้างมากขึ้นในแง่ของการพิจารณาถึงองค์ประกอบที่มากขึ้นภายในโมเลกุลพอลิเมอร์ ซึ่งได้แก่โมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block โดยกำหนดให้แต่ละบล็อกนั้นมีความยืดหยุ่นของเชกเมนต์ไม่เท่ากัน และพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างโมเลกุล (สัดส่วนของความยาวบล็อกและความแตกต่างระหว่างค่า Stiffness ratio ของทั้งสองบล็อก) และคุณลักษณะ (ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่น $\langle R_g^2 \rangle$ และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน $\langle R_e^2 \rangle$) ของโมเลกุลพอลิเมอร์ ซึ่งงานวิจัยก่อนหน้านี้ (Pattanasak, 2007) ได้หาความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์เป็นฟังก์ชันกับจำนวนเชกเมนต์และค่า Stiffness ratio ดังสมการที่ 15 และ 16 ซึ่งได้กล่าวมาแล้ว

$$\langle R_g^2 \rangle^{0.5} = (0.0263\phi + 0.3922) N_{total}^{0.6} \quad (15)$$

$$\langle R_e^2 \rangle^{0.5} = (0.0698\phi + 0.9767) N_{total}^{0.6} \quad (16)$$

และงานวิจัยนี้นำสมการดังกล่าวมาพัฒนาเพื่อใช้ศึกษาโมเลกุลโคพอลิเมอร์ที่มีองค์ประกอบภายในโมเลกุลมากขึ้น โดยมีสมมติฐานว่าองค์ประกอบภายในโมเลกุลโคพอลิเมอร์เกิดจากการนำโมเลกุลโฮโมพอลิเมอร์แต่ละตัวมาต่อกัน ซึ่งแสดงการประมาณเพื่อหาค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ดังสมการที่ 22 และ 23 ตามลำดับ

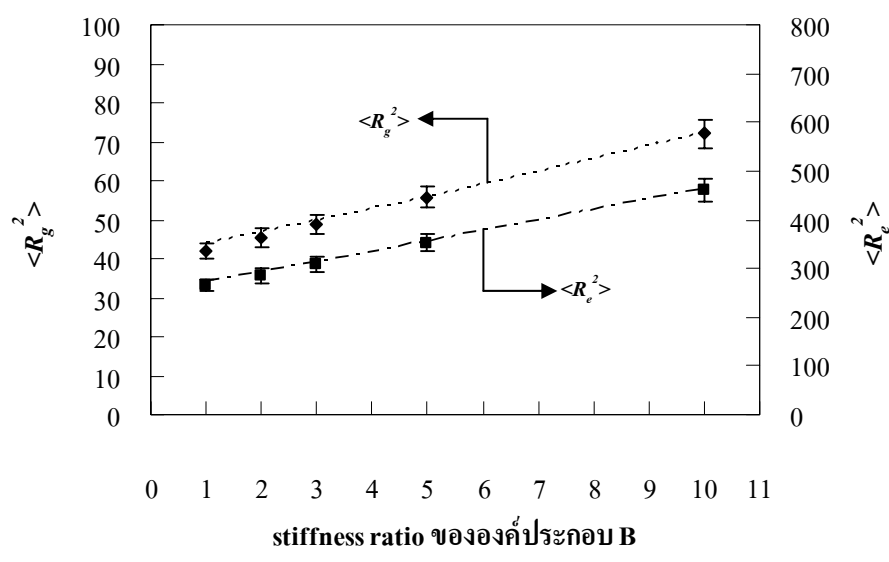
$$\langle R_g^2 \rangle = \left(\frac{N_A (0.0263\phi_A + 0.3922) + N_B (0.0263\phi_B + 0.3922)}{N_{total}} \cdot N_{total}^{0.6} \right)^2 \quad (22)$$

$$\langle R_e^2 \rangle = \left(\frac{N_A (0.0689\phi_A + 0.9767) + N_B (0.0689\phi_B + 0.9767)}{N_{total}} \cdot N_{total}^{0.6} \right)^2 \quad (23)$$

- โดยที่ N_A = จำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบ A
- N_B = จำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบ B
- N_{total} = จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดของโมเลกุลพอลิเมอร์
- ϕ_A = Stiffness ratio ขององค์ประกอบ A
- ϕ_B = Stiffness ratio ขององค์ประกอบ B

โดยในการศึกษาจะจำลองโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block โดยแบ่งการพิจารณาออกเป็น 2 กรณี กรณีที่ 1 จะกำหนดให้มีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด (N_{total}) เท่ากับ 100 เซกเมนต์ และแบ่งพิจารณาออกเป็น 2 ข้าง โดยกำหนดให้จำนวนเซกเมนต์เท่ากันทั้ง 2 ข้าง ($N_A:N_B$) ข้างละ 50 เซกเมนต์ และค่า Stiffness ratio สำหรับเซกเมนต์ทั้ง 2 ข้าง ($\phi_A:\phi_B$) มีอัตราส่วนที่แตกต่างกันดังนี้ คือ 1:1, 1:2, 1:3, 1:5 และ 1:10

เมื่อศึกษาผลของค่า Stiffness ratio ที่มีต่อขนาดของโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block ซึ่งบอกโดยค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่น $\langle R_g^2 \rangle$ และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน $\langle R_e^2 \rangle$ ของโมเลกุลพอลิเมอร์ (แสดงดังภาพที่ 16)

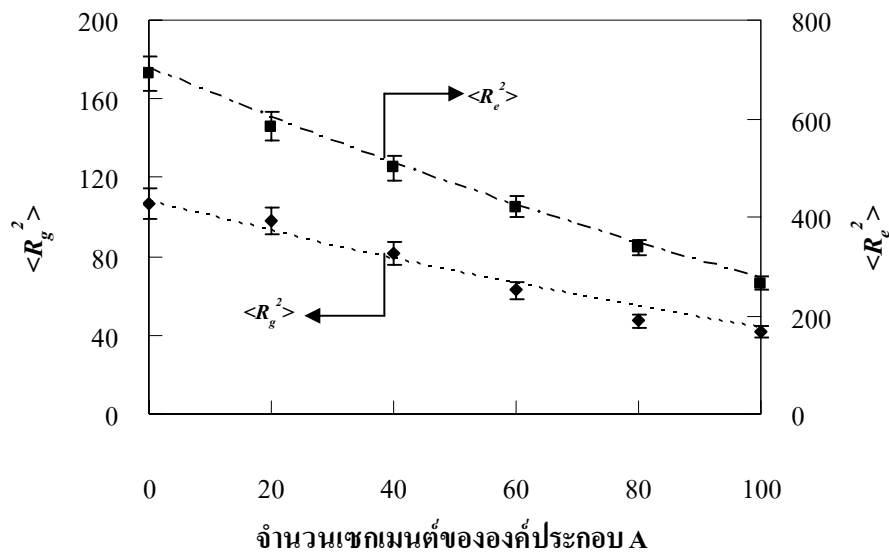


ภาพที่ 16 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (◆) และจากสมการที่ 22 (---) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างจากปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (■) และจากสมการที่ 23 (---) กับค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบ B

จากภาพที่ 16 พบว่าเมื่อค่า Stiffness ratio ของ โมเลกุล โคอพอลิเมอร์ชนิด Di-block ข้างที่มี B เป็นองค์ประกอบมีค่าเพิ่มขึ้นค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของ ระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์จะมีค่าเพิ่มขึ้น เนื่องจากเมื่อค่า Stiffness ratio เพิ่มขึ้นจะทำให้โมเลกุลของพอลิเมอร์มีขนาดใหญ่ขึ้น นอกจากนี้พบว่าค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ให้ผลใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากสมการทางคณิตศาสตร์ที่พัฒนาขึ้น

กรณีที่ 2 กำหนดให้มีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด 100 เซกเมนต์ และแบ่งพิจารณาออกเป็น 2 ข้าง โดยกำหนดให้จำนวนเซกเมนต์ 2 ข้าง ($N_A:N_B$) แตกต่างกันเป็นอัตราส่วนดังนี้ คือ 20:80, 40:60, 60:40, 80:20 เซกเมนต์ และค่า Stiffness ratio ของข้างที่มี A เป็นองค์ประกอบ (ϕ_A) เท่ากับ 1 และค่า Stiffness ratio ข้างที่มี B เป็นองค์ประกอบ (ϕ_B) เท่ากับ 10

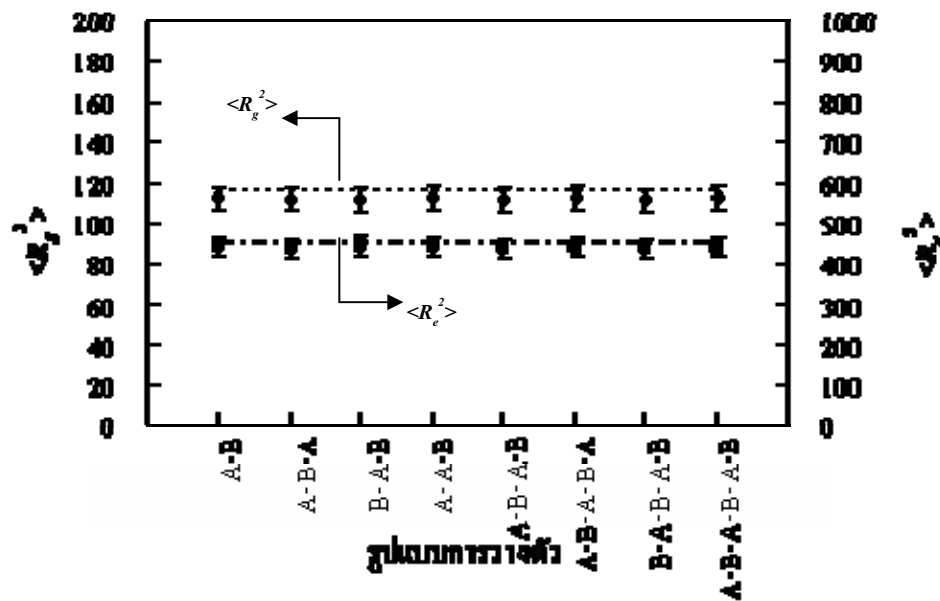
และเมื่อศึกษาผลของสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละบล็อกที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์สามารถแสดงได้ดังภาพที่ 17



ภาพที่ 17 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (◆) และจากสมการที่ 22 (---) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างจากปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (■) และจากสมการที่ 23 (---) กับจำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบ A

จากภาพที่ 17 พบว่าเมื่อค่าสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block ข้างที่มี A เป็นองค์ประกอบมีค่าเพิ่มขึ้น ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ลดลง เนื่องจากค่าสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block ข้างที่มี A เป็นองค์ประกอบเพิ่มขึ้นในขณะที่ค่า Stiffness ratio ยังคงเท่ากับ 1 เท่าเดิม เป็นผลให้โมเลกุลพอลิเมอร์มีขนาดเล็กลงเมื่อเทียบกับสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุล Di-block ข้างที่มี B เป็นองค์ประกอบซึ่งมีค่า Stiffness ratio เท่ากับ 10 ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ให้ผลใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากสมการทางคณิตศาสตร์ที่พัฒนาขึ้น

เมื่อเปรียบเทียบโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block พบว่าค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิดต่างๆ มีค่าใกล้เคียงกัน ดังภาพที่ 18

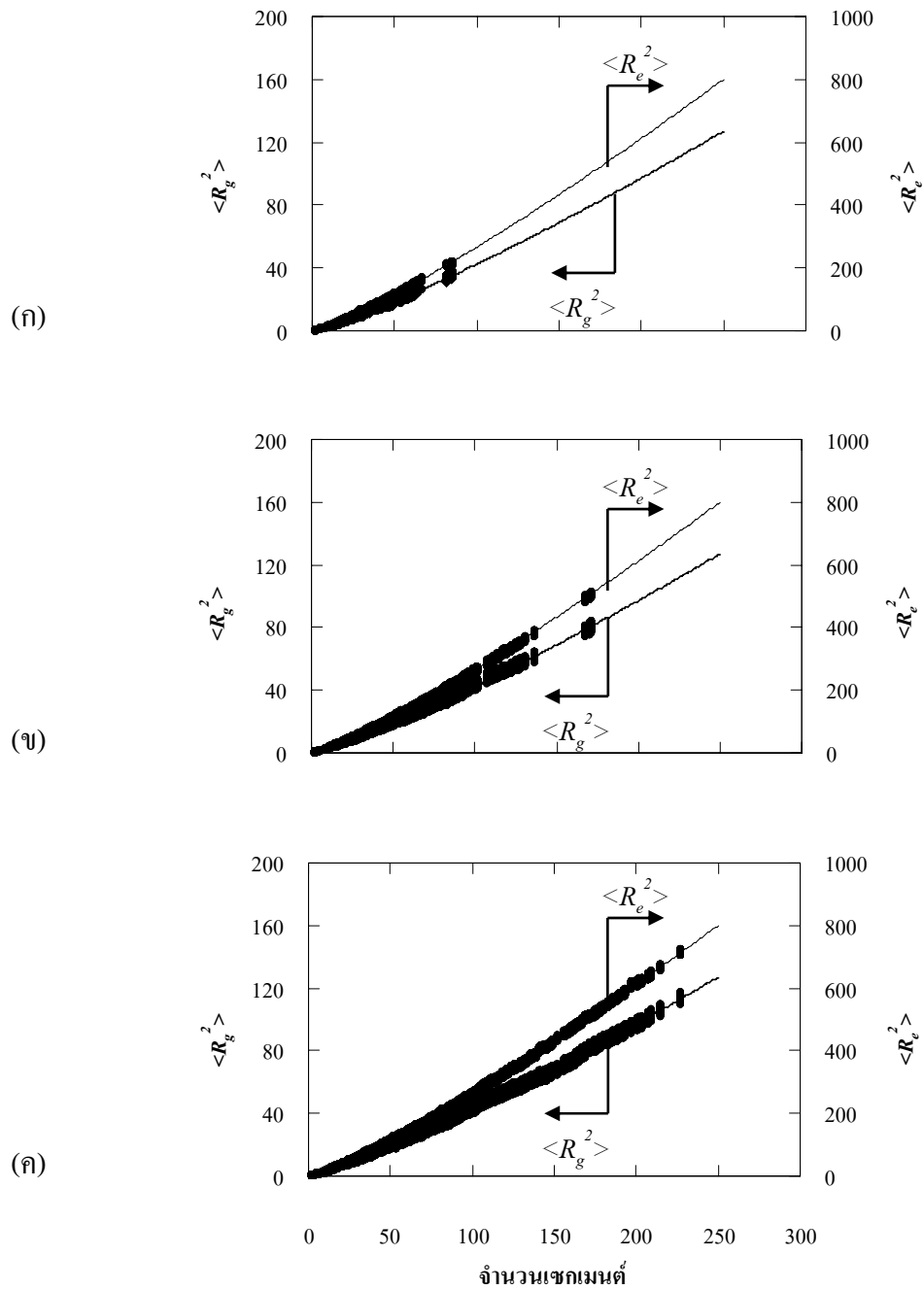


ภาพที่ 18 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (\blacklozenge) และจากสมการที่ 15 (---) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างจากปลายทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (\blacksquare) และจากสมการที่ 16 (---) ของโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block ที่ประกอบด้วยองค์ประกอบของ A และ B

ภาพที่ 18 พบว่าค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลโคพอลิเมอร์ที่ได้จากสมการที่พัฒนาขึ้นและจากการจำลองด้วยเทคนิค Monte Carlo ของโมเลกุลโคพอลิเมอร์แบบต่างๆ มีค่าใกล้เคียงกันทุกกรณี แสดงว่าขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์ขึ้นอยู่กับจำนวนรวมขององค์ประกอบ A และองค์ประกอบ B เท่านั้น โดยไม่ขึ้นกับลักษณะการกระจายตัวขององค์ประกอบ A และองค์ประกอบ B นั้นหมายความว่าเมื่อทราบองค์ประกอบโดยรวมภายในโมเลกุลโคพอลิเมอร์โดยไม่จำเป็นต้องคำนึงถึงลักษณะการเรียงตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ เราก็สามารถทราบถึงคุณลักษณะขนาดของโมเลกุลโคพอลิเมอร์นั้นได้โดยสามารถคำนวณได้โดยตรงจากสมการที่พัฒนาขึ้น ซึ่งทำให้การแก้ปัญหาเรื่องความซับซ้อนทางโครงสร้างในแง่ของการพิจารณาองค์ประกอบที่มากขึ้นภายในโมเลกุลโคพอลิเมอร์นั้นสะดวกมากขึ้น

2. กรณีศึกษาคุณลักษณะ (ขนาดและรูปร่าง) และโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีความซับซ้อนทางโครงสร้างมากขึ้นในแง่ของการพิจารณาถึงระบบซึ่งใกล้เคียงกับทางปฏิบัติ ซึ่งได้แก่การศึกษาถึงผลกระทบของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยในโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีต่อคุณลักษณะ (ขนาดและรูปร่าง) และโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลโซโมพอลิเมอร์ชนิดสายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution

ภาพที่ 19 แสดงการเปรียบเทียบผลการพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์กับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo กับผลที่ได้จากสมการการคำนวณ (ตารางที่ 1)



ภาพที่ 19 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo (■) กับผลที่ได้จากสมการการคำนวณ (---) กับการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ (ก) 10 (ข) 20 และ (ค) 30 เซกเมนต์

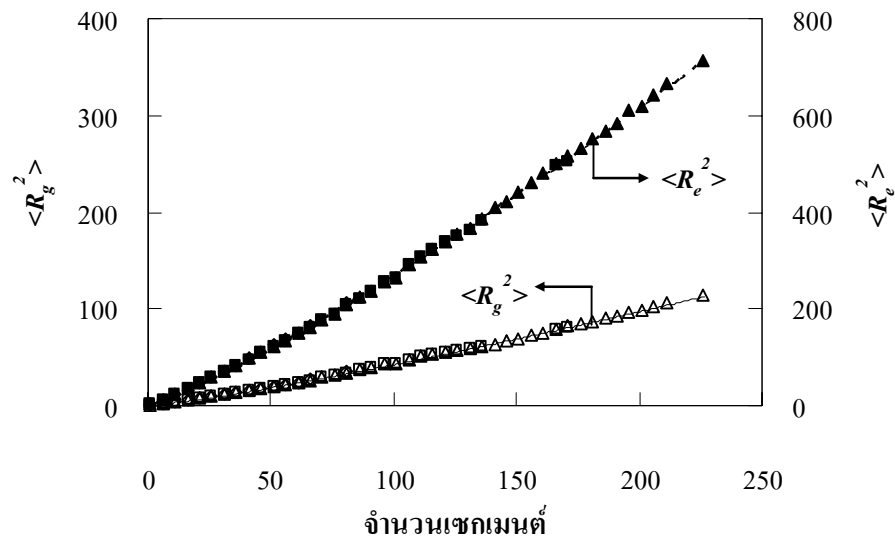
เมื่อเปรียบเทียบผลการพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยต่างๆ กับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo กับผลที่ได้จากสมการการคำนวณ (ตารางที่ 1) พบว่าความสัมพันธ์ดังกล่าวมีแนวโน้มของผลที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ไปในทิศทางเดียวกับผลที่ได้จากสมการการคำนวณ

ภาพที่ 19 เป็นการพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ ตามลำดับ กับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo กับผลที่ได้จากสมการการคำนวณ ซึ่งจากรูปพบว่าจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยในโมเลกุลพอลิเมอร์มีผลกระทบต่อการกระจายตัวของขนาดและรูปร่าง โดยการกระจายตัวของขนาดโมเลกุลพอลิเมอร์จะกว้างขึ้นเมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยในโมเลกุลพอลิเมอร์มากขึ้น

ตารางที่ 1 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดใน โมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรง จำลองโครงสร้างในปริภูมิ 2 มิติและ 3 มิติ

แบบจำลอง	$\langle R_g^2 \rangle$	$\langle R_e^2 \rangle$
2D-SAW	$(0.3312 N_{step}^{3/4})^2$	$(0.8839 N_{step}^{3/4})^2$
3D-SAW	$(0.4102 N_{step}^{3/5})^2$	$(1.0301 N_{step}^{3/5})^2$

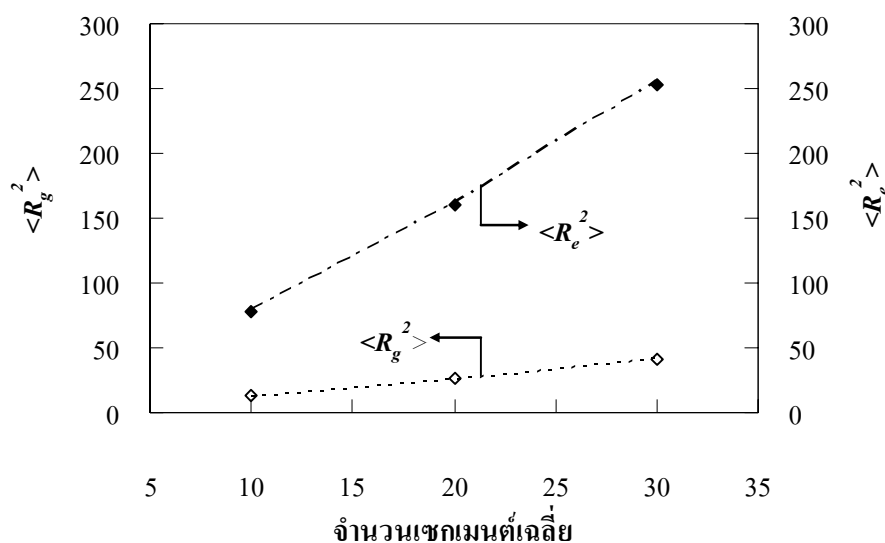
ความสัมพันธ์ระหว่างจำนวนเซกเมนต์ที่ถูกสุ่มขึ้นมา กับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านที่ผ่านการเฉลี่ยในแต่ละจำนวนเซกเมนต์ที่เท่ากันจากการจำลองและจากการสมการการคำนวณดังตารางที่ 1 แสดงผลดังภาพที่ 20



ภาพที่ 20 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (◇), 20 (□) และ 30 (△) เซกเมนต์ และจากสมการในตารางที่ 1 (---) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลาย ทั้งสองด้านที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (◆), 20 (■) และ 30 (▲) เซกเมนต์และจากสมการในตารางที่ 1 (---) กับจำนวนเซกเมนต์ในโมเลกุลพอลิเมอร์

จากผลการจำลองพบว่าทั้งค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลพอลิเมอร์มากขึ้น นั่นหมายความว่าโมเลกุลพอลิเมอร์มีขนาดใหญ่ขึ้นเมื่อมีจำนวนเซกเมนต์มากขึ้นนั่นเอง โดยความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ให้ผลสอดคล้องกับผลที่ได้จากสมการเป็นอย่างดี

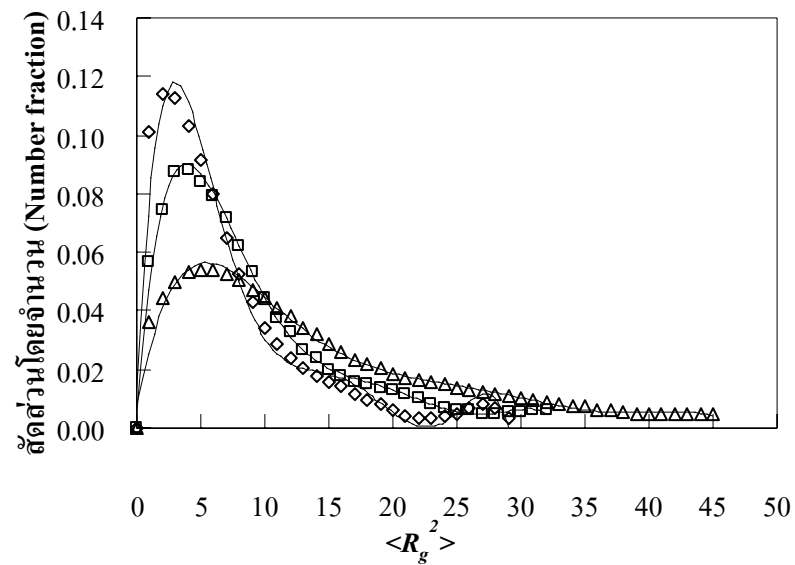
ผลของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยในโมเลกุลที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์โดยพิจารณาขนาดเฉลี่ยจากโมเลกุลพอลิเมอร์ทั้งหมดจากการจำลองและจากการสมการการคำนวณ (สมการที่ 9 และ 11) แสดงได้ดังภาพที่ 21



ภาพที่ 21 ผลเปรียบเทียบค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากผลการจำลอง (◆) และผลจากสมการที่ 9 (---) และค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านที่ได้จากผลการจำลอง (◇) และผลจากสมการที่ 11 (---) ที่เฉลี่ยจากข้อมูลทั้งหมดที่ได้จากการจำลองและผลจากสมการการคำนวณ ที่จำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยของโมเลกุลพอลิเมอร์เท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ ตามลำดับ

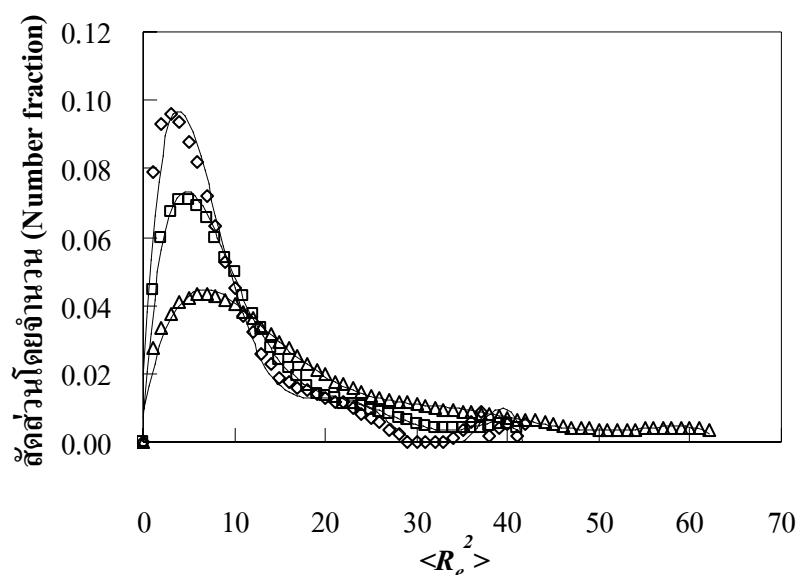
จากภาพที่ 21 ผลของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยในโมเลกุลที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้าน โดยพิจารณาขนาดเฉลี่ยจากโมเลกุลพอลิเมอร์ทั้งหมด พบว่าผลจากการจำลองที่ได้สอดคล้องกับผลที่ได้จากการสมการทางทฤษฎี กล่าวคือเมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยของโมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้นค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้นด้วย

ภาพที่ 22 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์ สำหรับพอลิเมอร์ที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution และมีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ ตามลำดับ



ภาพที่ 22 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์ เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (\diamond), 20 (\square) และ 30 (\triangle) เซกเมนต์

ภาพที่ 23 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ สำหรับพอลิเมอร์ที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution และมีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ ตามลำดับ



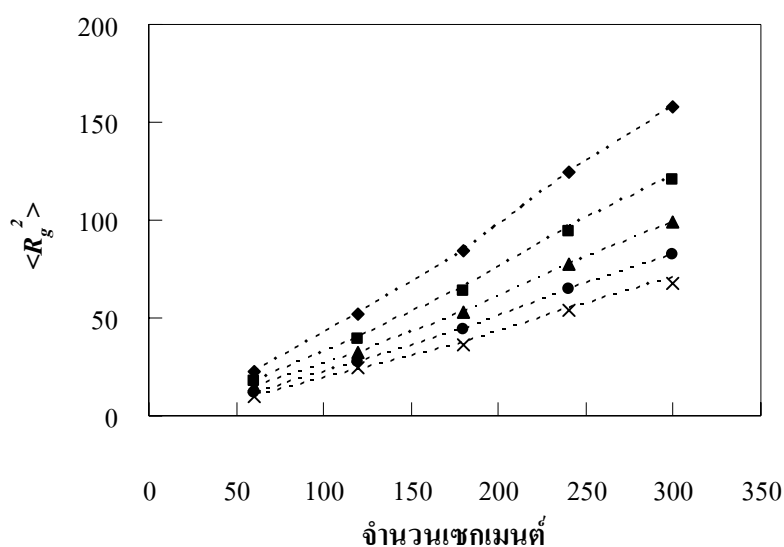
ภาพที่ 23 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ เมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10 (\diamond), 20 (\square) และ 30 (\triangle) เซกเมนต์

สำหรับกรณีศึกษาลักษณะการกระจายตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยเท่ากับ 10, 20 และ 30 เซกเมนต์ตาม Flory distribution พบว่าที่จำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยแตกต่างกันจะมีลักษณะการกระจายตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์แตกต่างกัน ภาพที่ 22 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของโมเลกุลพอลิเมอร์ และจากผลการจำลองพบว่าจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยใน โมเลกุลพอลิเมอร์มีผลกระทบต่อ การกระจายตัวของขนาดและรูปร่าง โดยการกระจายตัวของขนาดโมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยมากขึ้น และเมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโดยจำนวนกับค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ก็ให้ผลในทำนองเดียวกัน (ดังภาพที่ 23)

3. กรณีศึกษาคุณลักษณะ (ขนาดและรูปร่าง) และโครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีความซับซ้อนทางโครงสร้างมากขึ้นในแง่ของการพิจารณาถึงโมเลกุลโซโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวซึ่งมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 60, 120, 180, 240 และ 300 เซกเมนต์ โดยกำหนดให้ที่แต่ละจำนวนเซกเมนต์ที่แตกต่างกันมีจำนวนแขนเท่ากับ 2, 3, 4, 5, และ 6 แขน ตามลำดับ รวมทั้งเปรียบเทียบค่า g -factor ที่ได้จากวิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) ซึ่งสามารถหาค่าได้โดยตรงจากสมการของงานวิจัยก่อนหน้า

นี้ (สมการที่ 17) และจากผลการจำลองด้วยเทคนิค Monte Carlo ซึ่งใช้วิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง (Self-avoiding walk, SAW)

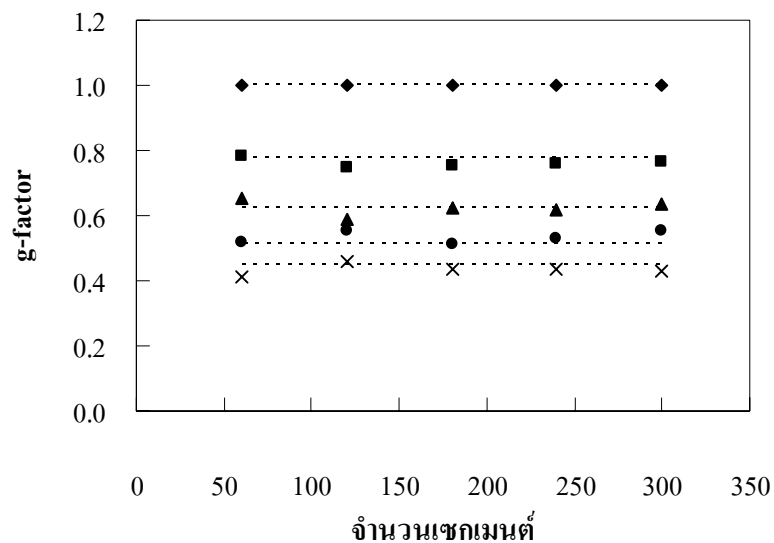
ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของ โมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวกับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด แสดงดังภาพที่ 24



ภาพที่ 24 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นของ โมเลกุลพอลิเมอร์กับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดของ โมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ซึ่งมีจำนวนแขน 2 (◆), 3 (■), 4 (▲), 5 (●) และ 6 (×) แขน และจากสมการที่ 21 (---)

จากภาพที่ 24 พบว่าค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นเพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนเซกเมนต์มากขึ้น และค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นที่ได้จากการใช้สมการคำนวณและจากการจำลองโดยวิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเองนั้นให้ผลใกล้เคียงกัน ซึ่งค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นสามารถใช้ในการอธิบายถึงขนาดและรูปร่างของ โมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวได้เป็นอย่างดี

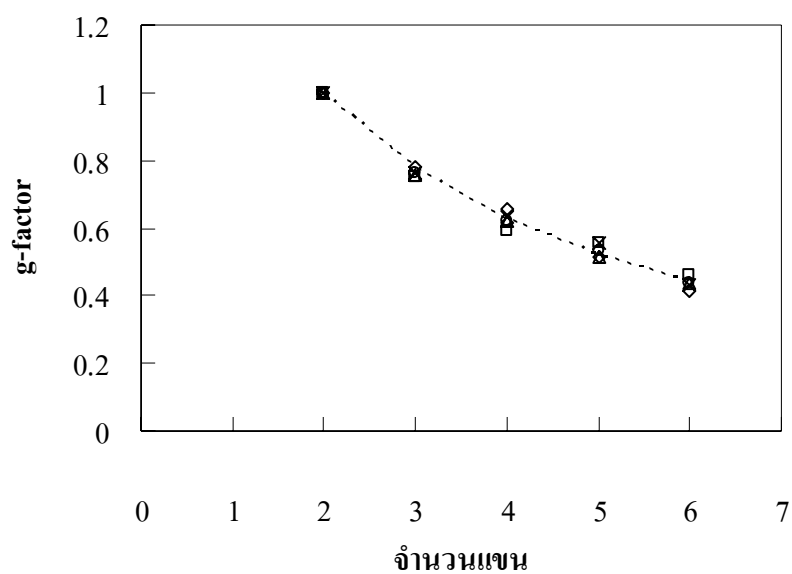
เมื่อทำการพิจารณาผลของค่า g-factor ที่มีต่อจำนวนจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดของ โมเลกุลพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว สามารถแสดงได้ดังภาพที่ 25



ภาพที่ 25 ความสัมพันธ์ระหว่างค่า g-factor จากการจำลองโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีจำนวนแขนเท่ากับ 2 (◆), 3 (■), 4 (▲), 5 (●) และ 6 (×) แขน และจากสมการที่ 18 (---) กับจำนวนเซกเมนต์

จากภาพที่ 25 พบว่าเมื่อจำนวนแขนของโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวเท่ากัน ค่า g-factor มีค่าใกล้เคียงกัน และเมื่อจำนวนแขนของโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวมากขึ้น ค่า g-factor ลดลง ซึ่งหมายถึงขนาดของโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีจำนวนแขนมากขึ้นมีขนาดลดลงนั่นเอง ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่าค่า g-factor ขึ้นกับจำนวนแขนของโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาว และไม่ขึ้นกับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดภายในโมเลกุล หรือกล่าวได้ว่าค่า g-factor จะใกล้เคียงกันเมื่อรูปแบบโครงสร้างของโมเลกุลโพลิเมอร์เหมือนกันนั่นเอง และนอกจากนั้นค่า g-factor ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ก็ให้ผลใกล้เคียงกับค่า g-factor ที่คำนวณได้จากกรณีวิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการช้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) ด้วย

ผลของจำนวนแขนของโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวที่มีต่อ ค่า g-factor แสดงดังภาพที่ 26 จากผลการเปรียบเทียบพบว่าค่า g-factor ที่ได้จากการใช้สมการคำนวณและจากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo โดยวิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ช้อนทับตัวเองนั้นให้ผลใกล้เคียงกัน ดังนั้นจึงสามารถใช้ค่า g-factor ของแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยช้อนทับตัวเองในการประมาณถึงขนาดและรูปร่างของโมเลกุลโพลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวในสารละลายได้เป็นอย่างดี



ภาพที่ 26 ความสัมพันธ์ระหว่างค่า g-factor ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo โมเลกุล โสโมพอลิเมอร์สายโซ่กิ่งรูปดาวซึ่งมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดเท่ากับ 60 (\diamond), 120 (\square), 180 (\circ), 240 (\triangle) และ 300 (\times) เซกเมนต์ และจากสมการที่ 18 กับจำนวนแขนของ โมเลกุลพอลิเมอร์

สรุปและข้อเสนอแนะ

สรุป

1. เมื่อศึกษาขนาด รูปร่าง และ โครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรง จากผลการจำลองโมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block พบว่าถ้ากำหนดให้สัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบภายในโมเลกุลโคพอลิเมอร์เท่ากัน และกำหนดให้ค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบใดองค์ประกอบหนึ่งมีค่าเพิ่มขึ้น ขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้นด้วย และถ้ากำหนดให้ค่า Stiffness ratio ขององค์ประกอบภายในโมเลกุลโคพอลิเมอร์เป็นอัตราส่วนที่เท่ากัน และกำหนดให้ค่าสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ขององค์ประกอบที่มีค่า Stiffness ratio น้อยกว่ามีค่าเพิ่มขึ้น ขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์จะลดลง และเมื่อเปรียบเทียบผลจากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo และผลจากสมการที่ได้พัฒนาขึ้น พบว่าสมการทางคณิตศาสตร์ที่พัฒนาขึ้นสามารถใช้อธิบายผลได้เป็นอย่างดี

จากการศึกษาในส่วนของการเปรียบเทียบ โมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block พบว่าขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์จะขึ้นอยู่กับจำนวนรวมขององค์ประกอบภายใน โมเลกุลโคพอลิเมอร์เท่านั้น โดยจะไม่ขึ้นกับลักษณะการกระจายตัวขององค์ประกอบภายในโมเลกุลพอลิเมอร์

2. เมื่อศึกษาขนาด รูปร่าง และ โครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์ที่มีการกระจายตัวตาม Flory distribution พบว่าการกระจายตัวของขนาดโมเลกุลพอลิเมอร์จะกว้างขึ้นเมื่อจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยใน โมเลกุลพอลิเมอร์เพิ่มขึ้น และเมื่อศึกษาถึงผลกระทบของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยที่มีต่อขนาดและ โครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลพอลิเมอร์ ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดเฉลี่ย และจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยใน โมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo มีค่าใกล้เคียงกับผลที่ได้จากทฤษฎี

3. เมื่อศึกษาขนาด รูปร่าง และ โครงสร้างการวางตัวของโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาว พบว่าขนาดของโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวมีค่ามากขึ้นเมื่อโมเลกุลโซโม่พอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวมีจำนวนเซกเมนต์มากขึ้น ค่า g-factor ของพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาว มีค่าใกล้เคียงกันเมื่อรูปแบบ โครงสร้างของโมเลกุลพอลิเมอร์เหมือนกัน ซึ่งค่า g-factor ขึ้นกับจำนวน

แขนของโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาว แต่ไม่ขึ้นกับจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมดภายในโมเลกุล และนอกจากนั้นค่า g -factor ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo ก็ให้ผลใกล้เคียงกับค่า g -factor ที่คำนวณได้จากกรณีวิธีการจำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยมีการซ้อนทับตัวเอง (Random walk, RW) ด้วย

ข้อเสนอแนะ

1. การศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลโคพอลิเมอร์สายโซ่ตรงชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block ควรพัฒนาคำสั่งในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ให้สามารถจำลองโครงสร้างโมเลกุลโคพอลิเมอร์ที่มีองค์ประกอบมากกว่า 2 ชนิด
2. การศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่ตรงที่มีการกระจายตัวของจำนวนเซกเมนต์ตาม Flory distribution ควรพัฒนาคำสั่งในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สามารถดำเนินการภายใต้เงื่อนไขสำหรับโมเลกุลพอลิเมอร์ที่มีจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยของสายโซ่มากกว่า 30 เซกเมนต์
3. การศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวที่มีจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละแขนเท่ากัน ควรพัฒนาคำสั่งในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สามารถศึกษาโมเลกุลไฮโมพอลิเมอร์สายโซ่กึ่งรูปดาวที่มีจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละแขนแตกต่างกัน

เอกสารและสิ่งอ้างอิง

ศรินทร ศรีมันทยามาศ และ ภัทรกร เจริญกิจทวี. 2548. การจำลองโครงสร้างโมเลกุลพอลิเมอร์เชิงเส้นชนิดยืดหยุ่นและกึ่งยืดหยุ่นด้วยวิธีมอนติ-คาร์โล. วิทยานิพนธ์ปริญญาตรี, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

มนต์ชัย สารทอง. 2549. การสุ่มรอยเดินแบบไม่ทับตัวเอง. วิทยานิพนธ์ปริญญาตรี, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

Ferdinand, R., C. Claude, O. Christopher and A. Lyden. 2003. **Principles of Polymer Systems. 5th edition.** Taylor and Francis.

Flory, P.J. 1967. **Principle of Polymer Chemistry.** Cornell University Press, New York.

Fried, J.R. 1995. **Polymer Science and Technology.** Prentice Hall, New Jersey.

George, O. 1991. **Principles of Polymeriazation. 3rd edition.** John Wiley and Sons, Inc., New York.

Kazuhito, S. 2005. Hydrodynamic Factors for Linear and Star Polymers on Lattice under the Theta Condition. **Journal of Research in Tohoku University Japan.** 980-8578.

Madras, N. and Sokal, A.D. 1988. The Pivot Algorithm: a Highly Efficient Monte Carlo Method for the Self-Avoiding Walk. **Journal of Statistical Physics.** 50, 109-186.

Michael, R. and R.H. Colby. 2003. **Polymer Physics, 1st edition.** Published in the United States by Oxford University Press Inc., New York.

Pattanasak, V. 2007. **Monte Carlo of Linear Semi-Flexible Polymer Chains near an Impermeable Surface.** M.Eng.Thesis, Kasetsart University.

- Paopo, I., P. Rittiyong and S. Anantawaraskul. 2005. An Investigation on Characteristics of Linear Homopolymer Molecules Using Monte Carlo Simulation with Random Walks and Self-Avoiding Walks Models. **Journal of Research in Engineering and Technology**. 2: 104-113.
- Paopo, I., P. Rittiyong and S. Anantawaraskul. 2005. Monte Carlo Simulation of Comb and Star Polymers in Solution using Self-avoiding walk Model. **Journal of Research in Engineering and Technology**. 2: 191-201.
- Rouault, Y. and O.V.Borisov. 1996. Comb-Branched Polymers: Monte Carlo Simulation and Scaling. **Macromolecules Theory and Simulation**. 29: 2605-2611.
- Sadayuki, S and T. Hidetaka. 1999. Size Exclusion Chromatography of Branched Polymers: Star and Comb Polymers. **Macromolecules Theory and Simulation**. 8: 513-519.
- Sokal, A.D. 1987. Monte Carlo Simulation Methods for the Self-Avoiding Walk. **Journal of Statistical Physics**. 50: Nos.1/2.
- Sokal, A.D. 1995. **Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations in Polymer Sciences**. In Binder, K. edition. Oxford University Press, Oxford and New York.
- Sperling, L. H. 2001. **Introduction to Physical Polymer Science, 3rd edition**. John Wiley and Sons Inc., Canada.
- Traoka, I. 2002. **Polymer solutions: An introduction to physical properties**. John Wiley and Sons Inc., New York.
- Whittington, S.C. 1986. Lattice Models of Branched Polymers: Dimension of Uniform Stars. **Macromolecules Theory and Simulation**. 19: 1241-1245.

Zhou, Z. and Yan, D. 1997. Mean-Square Radius of Gyration of Polymer Chains.
Macromolecules Theory and Simulation. 6: 597-611.

ภาคผนวก

ข้อมูลการเปรียบเทียบผลของการศึกษาค่า Stiffness ratio ($\phi_A:\phi_B$) ที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo และจากสมการที่พัฒนาขึ้นแสดงดังตารางภาคผนวกที่ ก1

ตารางผนวกที่ 1 เปรียบเทียบค่ารัศมีไจเรชันและค่าระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo และจากสมการที่พัฒนาขึ้นเมื่อค่า Stiffness ratio แตกต่างกัน

$N_A:N_B$	$\phi_A:\phi_B$	$\langle R_g^2 \rangle$			$\langle R_c^2 \rangle$		
		สมการ ที่ 15	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด	สมการ ที่ 16	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด
50:50	1:1	43.9937	41.9796	4.5783	275.0923	265.4262	3.5138
50:50	1:2	46.8019	45.3206	3.1650	293.7465	285.4568	2.8221
50:50	1:3	49.6969	48.9923	1.4179	313.0126	308.8363	1.3342
50:50	1:5	55.7476	55.8472	0.1787	353.3805	352.2463	0.3210
50:50	1:10	72.3946	72.0565	0.4670	465.0085	459.5342	1.1773

ข้อมูลการเปรียบเทียบการศึกษาผลของสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละบล็อกที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo และจากสมการที่พัฒนาขึ้นแสดงดังตารางภาพผนวกที่ ก2

ตารางผนวกที่ 2 เปรียบเทียบค่ารัศมีไจเรชันและค่าระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo และจากสมการที่พัฒนาขึ้นเมื่อสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละบล็อกแตกต่างกัน

$N_A:N_B$	$\phi_A:\phi_B$	$\langle R_g^2 \rangle$			$\langle R_e^2 \rangle$		
		สมการ ที่ 15	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด	สมการ ที่ 16	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด
0:100	0:10	107.8320	106.7090	1.0415	704.4887	690.8887	1.9305
20:80	1:10	92.8126	98.0473	5.6401	602.7490	583.8470	3.1360
40:60	1:10	78.9191	81.6554	3.4672	508.9395	500.0682	1.7431
60:40	1:10	66.1515	62.6630	5.2735	423.0602	420.5884	0.5843
80:20	1:10	54.5097	47.2510	13.3162	345.1111	337.2827	2.2684
100:0	1:0	43.9937	41.9840	4.5682	275.0923	265.2076	3.5932

ข้อมูลการเปรียบเทียบการศึกษาผลของสัดส่วนจำนวนเซกเมนต์ในแต่ละบล็อกสำหรับ โมเลกุลโคพอลิเมอร์ชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block ที่มีต่อ ค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของ โมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จากเทคนิคการจำลอง Monte Carlo และจากสมการที่พัฒนาขึ้นแสดงดังตาราง ภาคผนวกที่ 3

ตารางผนวกที่ 3 ค่าเฉลี่ยกำลังสองของค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีไจเรชั่นและค่าเฉลี่ยกำลังสองของ ระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุล โคพอลิเมอร์ชนิด Di-block, Tri-block, Tetra-block, Penta-block และ Hexa-block

รูปแบบการวางตัว	$N_A:N_B$	$\langle R_g^2 \rangle$			$\langle R_e^2 \rangle$		
		สมการ ที่ 15	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด	สมการ ที่ 16	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด
A-B	60:60	90.0997	88.8948	1.3373	578.7332	562.1506	2.8653
A-B-A	30:60:30	90.0997	88.1171	2.2005	578.7332	560.4200	3.1644
B-A-B	30:60:30	90.0997	89.2014	0.9970	578.7332	558.8964	3.4276
A-A-B	30:30:60	90.0997	88.9855	1.2367	578.7332	562.8146	2.7506
A-B-A-B	30:30:30:30	90.0997	88.1929	2.1163	578.7332	558.5602	3.4857
A-B-A-B-A	20:30:20:30:20	90.0997	88.3397	1.9534	578.7332	564.3481	2.4856
B-A-B-A-B	20:30:20:30:20	90.0997	87.7890	2.5646	578.7332	556.7598	3.7968
A-B-A-B-A-B	20:20:20:20:20:20	90.0997	88.6123	1.6509	578.7332	562.5704	2.7928

ข้อมูลการเปรียบเทียบการศึกษาผลของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมี
 ใจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของ โมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จาก
 เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และจากสมการที่พัฒนาขึ้นแสดงดังตารางภาคผนวกที่ ก4

ตารางผนวกที่ 4 เปรียบเทียบค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมีใจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่าง
 ระหว่างปลายทั้งสองด้านของโมเลกุลพอลิเมอร์ที่เฉลี่ยจากข้อมูลทั้งหมดที่ได้จากผล
 การจำลองและผลจากสมการการคำนวณที่จำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยของ โมเลกุลพอลิ
 เมอร์เท่ากับ 10, 20 และ 30 ตามลำดับ

จำนวนเซกเมนต์เฉลี่ย	$\langle R_g^2 \rangle$			$\langle R_e^2 \rangle$		
	สมการ ที่ 9	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด	สมการ ที่ 11	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด
10	12.4985	12.5162	0.1419	78.8178	78.4826	0.4271
20	25.6907	26.0008	1.1928	162.0105	159.6423	1.4835
30	40.5938	40.8690	0.6734	255.9925	252.8926	1.2258

ข้อมูลการเปรียบเทียบการศึกษาผลของจำนวนเซกเมนต์เฉลี่ยที่มีต่อค่าเฉลี่ยกำลังสองของรัศมี
 ใจเรชันและค่าเฉลี่ยกำลังสองของระยะห่างระหว่างปลายทั้งสองด้านของ โมเลกุลพอลิเมอร์ที่ได้จาก
 เทคนิคการจำลอง Monte Carlo และจากสมการทางทฤษฎีแสดงดังตารางภาคผนวกที่ ก5

ตารางผนวกที่ 5 เปรียบเทียบค่า g-factor ที่ได้จากการใช้สมการคำนวณและจากการจำลองโดยวิธีการ
 จำลองการเคลื่อนที่แบบสุ่มโดยไม่ซ้อนทับตัวเอง โดยมีจำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด
 เท่ากับ 60, 120, 180 และ 240 และมีจำนวนแขนเท่ากับ 3, 4, 5 และ 6 แขนตามลำดับ

จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด	จำนวนแขน	$\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch}$			g-factor		
		สมการ ที่ 21	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด	สมการ ที่ 19	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด
60	2	22.7772	22.7772	0	1	1	0
	3	17.7156	17.8295	0.5001	0.7778	0.7828	0.6429
	4	14.2358	14.8932	2.8864	0.6250	0.6539	4.6183
	5	11.8441	11.7253	0.5218	0.5200	0.5148	1.0034
	6	10.1232	9.4387	3.0052	0.4444	0.4144	6.7617
120	2	52.3086	52.3086	0	1	1	0
	3	40.6845	39.2129	6.4607	0.7778	0.7496	3.6170
	4	32.6929	30.8077	8.2766	0.6250	0.5890	5.7663
	5	27.2005	29.0356	8.0569	0.5200	0.5551	6.7467
	6	23.2483	24.0910	3.6999	0.4444	0.4606	3.6249

ตารางผนวกที่ 5 (ต่อ)

จำนวนเซกเมนต์ทั้งหมด	จำนวนแขน	$\langle R_g^2 \rangle_{SAW,branch}$			g-factor		
		สมการ ที่ 21	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด	สมการ ที่ 19	Monte Carlo	% ความ ผิดพลาด
180	2	84.1800	84.1800	0	1	1	0
	3	65.4733	63.5033	8.6491	0.7778	0.7544	3.0089
	4	52.6125	52.4623	0.6594	0.6250	0.6232	0.2855
	5	43.7736	43.0584	3.1400	0.5200	0.5115	1.6339
	6	37.4133	36.7144	3.0686	0.4444	0.4361	1.8681
	2	124.2895	124.2895	0	1	1	3
240	3	96.6696	94.5241	9.4196	0.7999	0.7605	4.9258
	4	77.6809	77.0468	2.7841	0.6428	0.6199	3.5615
	5	64.6305	66.1300	6.5831	0.5348	0.5321	0.5119
	6	55.2398	54.3143	4.0632	0.4571	0.4370	4.3968
	2	157.9563	157.9563	0	1	1	0
	3	122.8549	120.7354	1.7252	0.7778	0.7644	1.7252
300	4	98.7227	99.9811	1.2747	0.6250	0.6330	1.2747
	5	82.1373	87.3312	6.3235	0.5200	0.5529	6.3235
	6	70.2028	68.0665	3.0430	0.4444	0.4309	3.0430

ประวัติการศึกษา และการทำงาน

ชื่อ –นามสกุล	ณัฐชรีรา กิตติชนเสวร
วัน เดือน ปี ที่เกิด	8 พฤศจิกายน 2526
สถานที่เกิด	อำเภอพญาไท จังหวัดกรุงเทพมหานคร
ประวัติการศึกษา	วศ.บ. (วิศวกรรมเคมี) มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์
ตำแหน่งหน้าที่การงานปัจจุบัน	นิสิตปริญญาโท ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
สถานที่ทำงานปัจจุบัน	-
ผลงานดีเด่นและรางวัลทางวิชาการ	-
ทุนการศึกษาที่ได้รับ	ได้รับทุนผู้ช่วยสอนประเภทที่ 3 จากโครงการพัฒนา บัณฑิตและวิจัยด้านวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (ADB)