

บทคัดย่อ

ศึกษาแนวทางการใช้วิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์คำนวณอันตรกิริยาระหว่างไอออนทองแดง (Cu^{2+} และ CuSO_4) บนโครงสร้างสารแมงโกสติน (β -mangostin, γ -mangostin และ α -mangostin) โดยการคำนวณพลังงานการดูดซับของระบบที่ระดับการคำนวณ Hatree Fock และ Density Functional และใช้เบสฟังก์ชันเป็น 6-31G (d,p) สำหรับระบบการดูดซับไอออนทองแดง พบว่าที่บริเวณอะตอมออกซิเจนของโครงสร้างสารแมงโกสตินทั้งสามรูปแบบ (5-hydroxy-7-keto และ กลุ่ม 1-hydroxy-6-methoxy) เป็นบริเวณที่มีความหนาแน่นของอิเล็กตรอนค่อนข้างสูง จึงสามารถเกิดอันตรกิริยากับไอออนของทองแดงได้ แสดงให้เห็นว่าสารแมงโกสตินสามารถดูดซับทองแดงทั้งสองชนิดได้ จึงทำการสกัดสารดังกล่าวจากเปลือกมังคุด โดยใช้ตัวทำละลายเมทานอล และแยกสารแมงโกสตินด้วยวิธีทางโครมาโทกราฟี และพิสูจน์เอกลักษณ์ของแมงโกสตินที่แยกได้ ด้วยการเปรียบเทียบโครมาโทแกรมบนแผ่น TLC เทียบกับแมงโกสตินสารมาตรฐาน ซึ่งได้สารสกัดในปริมาณที่น้อยมาก จึงใช้เปลือกมังคุดศึกษาประสิทธิภาพในการดูดซับ ซึ่งผลชี้ให้เห็นว่าสามารถประยุกต์ใช้เปลือกมังคุดในการบำบัดโลหะหนักในน้ำเสียก่อนปล่อยน้ำเสียสู่แหล่งน้ำสาธารณะได้

Abstract

The interaction of copper ions on mangostin structures (β -mangostin, γ -mangostin and α -mangostin) was investigated under computational chemistry method. The adsorption energy of these various copper form (Cu^{2+} and CuSO_4) on mangostin structures of which the structures are treated as the rigid molecules were determined at the HF/6-31G (d,p) and DFT/6-31G (d,p) theoretical level approached, respectively. The interaction is found to bound at density electron site (Oxygen atom) of mangostin structures. The results of these calculations show that the mangostin from can be used to adsorb copper ions. Thus such a mangostin extracted from the mangosteen peel by the solvent methanol. And separation by chromatographic methods, identification of mangostin isolates by comparing chromatographic gram on a TLC vs. mangostin standards. It found that the extracts of mangostin in very small quantities. Mangosteen peel is applied to study the efficiency of adsorption. The results suggest that the widespread use of the mangosteen peel to treat wastewater before discharge into the public water supply.