

บทที่ 1

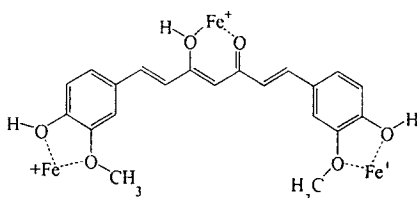
บทนำ

ความสำคัญและที่มาของการวิจัย

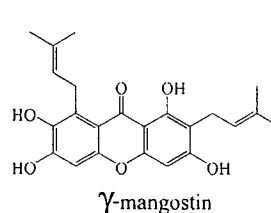
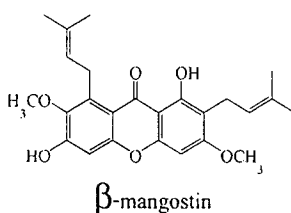
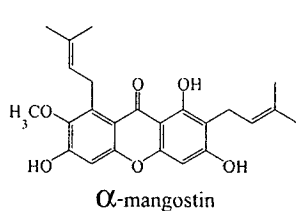
ปัจจุบันประเทศกำลังพัฒนามีอัตราการเจริญเติบโตทางเศรษฐกิจ และการพัฒนาทางอุตสาหกรรมสูง ส่งผลให้เกิดปัญหาทางด้านมลภาวะ ซึ่งมลภาวะส่วนใหญ่ที่เกิดขึ้นนั้นเกิดจากน้ำมีมนุษย์ มีสาเหตุจากโรงงานอุตสาหกรรมและบ้านเรือนที่อยู่อาศัย แหล่งน้ำเสียของโรงงานอุตสาหกรรม ซึ่งในการผลิตจะมีส่วนประกอบของโลหะหนักในกระบวนการชุบโลหะ เช่น ทองแดง นิกเกิล ตะกั่ว และเงิน เป็นต้น โดยเฉพาะทองแดงถือได้ว่าเป็นโลหะหนักที่มีใช้ในกระบวนการผลิตหลายชนิดผลิตภัณฑ์ในอุตสาหกรรม หากไม่มีการป้องกันอาจส่งผลกระทบต่อทั้งทางตรงและทางอ้อม เช่น การสูดดม การสัมผัส ซึ่งการบำบัดทำได้ลำบาก เนื่องจากน้ำเสียดังกล่าวมีปริมาณของโลหะหนัก ซึ่งไม่สามารถกำจัดได้หมดร้อยเปอร์เซ็นต์ ดังนั้นโลหะหนักบางส่วนจะหลุดออกมาในขณะที่ทำการปล่อยน้ำเสีย หากปล่อยลงแหล่งน้ำสาธารณะโดยไม่มีการบำบัด จะทำให้เกิดอันตรายต่อผู้อุปโภคบริโภคและทำให้ระบบนิเวศวิทยาเปลี่ยนแปลงไป เกิดเป็นผลเสียต่อสิ่งมีชีวิตที่อาศัยอยู่ในแหล่งน้ำทั้งทางตรงและทางอ้อม

การกำจัดโลหะหนักออกจากน้ำเสีย สามารถทำได้หลายวิธี เช่น การตกตะกอนโดยใช้สารเคมี การแยกโดยใช้กระแสไฟฟ้า การแยกด้วยแผ่นเมมเบรน (Membrane) การแลกเปลี่ยนไอออน การบำบัดทางชีวภาพ และการใช้สารดูดซับ เป็นต้น ซึ่งกรรมวิธีในการบำบัดบางวิธีต้องมีค่าใช้จ่ายที่ค่อนข้างสูง และต้องดำเนินการหลายขั้นตอน

การกำจัดโลหะหนักโดยการใช้สารดูดซับ ซึ่งเป็นวัสดุเหลือใช้จากธรรมชาติ จึงเป็นอีกทางเลือกหนึ่ง โดยสารผลิตภัณฑ์ธรรมชาติที่สามารถจับโลหะหนักได้มักจะมีหมู่ฟังก์ชันที่มีอิเล็กตรอนหนาแน่น เช่น หมู่คาร์บอนิล หรือ หมู่ฟีนอลิก อยู่ในโครงสร้าง สารผลิตภัณฑ์ธรรมชาติที่มีหมู่ฟังก์ชันดังกล่าวได้แก่ สารกลุ่มฟลาโวนอยด์ หรือ แทนนิน เป็นต้น ตัวอย่างเช่น การเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของ Curcumin กับ Fe^{2+} ดังแสดง



สารกลุ่มฟลาโวนอยด์ หรือ แทนนิน เป็นสารที่พบได้ในพืชหลายชนิด โดยสารเหล่านี้มีสมบัติในการช่วยป้องกันภัยจากแมลง เชื้อรา และแบคทีเรียให้กับพืช ตัวอย่างพืชที่มีองค์ประกอบของสารกลุ่มแทนนินปริมาณสูง เช่น มังคุด ซึ่งจะให้ผลผลิตเฉลี่ยประมาณ 30 - 50 กิโลกรัมต่อต้น หรือประมาณ 300 - 500 ผลต่อต้น มังคุด 1 กิโลกรัมจะให้เนื้อและเมล็ดประมาณ 3 - 4 ชีด นอกนั้นเป็นน้ำหนักของเปลือก (สมศักดิ์ วรรณศิริ. 2541 : 7 - 9) ความต้องการปลูกมังคุดมีมากเป็นอันดับสาม รองจากยางพารา และปาล์มน้ำมัน (วิทยา พรหมมี. 2541 : 1) มังคุดเป็นพืชที่ประเทศไทยสามารถมีผลผลิตได้ประมาณ 15,2104 ตัน/ปี ทั่วประเทศ (2550) และพบว่าผลมังคุด 1 กิโลกรัม มีเนื้อมังคุดเพียง 30% ส่วนที่เหลือเป็นเปลือกมังคุดเหลือทิ้งถึง 70% ซึ่งมีสารกลุ่ม ฟลาโวนอยด์และแทนนินเป็นองค์ประกอบหลัก โดยสารสำคัญที่พบมากในส่วนเปลือกผลมังคุด คือ สารแมงโกสติน (Mangostin) ซึ่งเป็นสารประเภทแซนโทน (Xanthone) แมงโกสตินที่พบในเปลือกผลมังคุดมี 3 ชนิดคือ แอลฟาแมงโกสติน (α -mangostin) เบต้าแมงโกสติน (β -mangostin) และ แกมมาแมงโกสติน (γ -mangostin)



จากโครงสร้างของสารทั้ง 3 ชนิด พบว่ามีหมู่คาร์บอนิล (carbonyl) หมู่ฟีนอลิก (phenolic) และ พันธะคู่ของแอลคีนซึ่งล้วนแต่เป็นบริเวณที่มีอิเล็กตรอนหนาแน่น อะตอมออกซิเจนเหล่านั้นสามารถเกิดคีเลต (chelated) หรือจับกับโลหะชนิด bivalent ได้ โดยเฉพาะการมีหมู่คาร์บอนิล ที่ตำแหน่ง C-9 และหมู่ไฮดรอกซิลที่ตำแหน่ง C-1 จะเกิดการคีเลตกับโลหะไอออนได้ดีโดยจะเกิดผ่านวงแหวน 6 เหลี่ยม นอกจากนี้ตำแหน่งของหมู่ไฮดรอกซิล (C-6) ที่อยู่ ortho- กับหมู่เมทอกซี (methoxy) และ ไฮดรอกซิล ใน แอลฟาแมงโกสติน เบต้าแมงโกสติน และ แกมมาแมงโกสติน ตามลำดับ ก็เป็นอีกตำแหน่งหนึ่งที่สามารถเกิดคีเลตกับโลหะไอออนได้ ทำให้สารแมงโกสตินจากเปลือกผลมังคุดน่าจะมีคุณสมบัติในการดูดซับ ดังนั้นในการทำนายความน่าจะเป็นเพื่อสร้างความเชื่อมั่นในการเกิดคีเลตระหว่างสารแมงโกสตินและไอออนทองแดง สามารถศึกษาทางทฤษฎีเคมีคำนวณหรือเคมีคอมพิวเตอร์ ซึ่งเป็นข้อมูลความเป็นไปได้พื้นฐานทางทฤษฎีเคมี ในการวางแผนการศึกษาความสามารถในการดูดซับโดยใช้แมงโกสตินในห้องปฏิบัติการทางวิทยาศาสตร์

เป็นแนวทางที่สามารถลดงบประมาณในการปฏิบัติการเคมี ลดขั้นตอน ประหยัดเวลา รวมทั้งลดการสิ้นเปลืองสารเคมีจำนวนมาก

ดังนั้นจึงมีความจำเป็นอย่างมากในการนำศาสตร์ทางด้านเคมีคอมพิวเตอร์มาใช้ในการทำนาย ตรวจสอบประสิทธิภาพและความเป็นไปได้ในการกำจัดไอออนทองแดง โดยใช้สารแมงโกสตินทั้ง 3 ชนิด เพื่อเป็นข้อมูลในการออกแบบการทดลองในห้องปฏิบัติการเคมี ซึ่งเคมีคอมพิวเตอร์เป็นสาขาที่นำเอาความรู้ทางคณิตศาสตร์บริสุทธิ์ ฟิสิกส์พื้นฐาน และสถิติมาใช้อธิบายสิ่งที่เกิดขึ้นในระบบโมเลกุลทางเคมี โดยใช้คอมพิวเตอร์เป็นเครื่องมือในการคำนวณ อีกทั้งปัจจุบันเทคโนโลยีคลัสเตอร์คอมพิวติ้ง (Cluster Computing) เป็นการนำเครื่องคอมพิวเตอร์หลายๆ เครื่องมาเชื่อมรับกัน และมีระบบซอฟต์แวร์ให้เครื่องเหล่านี้ทำงานร่วมกันอย่างเป็นเอกภาพ โดยมีจุดประสงค์เพื่อรองรับปัญหาของระบบที่จะศึกษาทางการคำนวณมีขนาดใหญ่ ซึ่งเครื่องคอมพิวเตอร์เพียงเครื่องเดียวไม่สามารถรองรับได้ เทคโนโลยีคลัสเตอร์คอมพิวติ้งทำให้สามารถสร้างทรัพยากรการคำนวณประสิทธิภาพสูง โดยใช้อุปกรณ์ที่มีจำหน่ายทั่วไปมาแทนที่เครื่องคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงที่มีราคาแพง แต่การสร้างระบบคลัสเตอร์คอมพิวติ้งสามารถสร้างโดยใช้ทุนไม่สูงมาก แต่มีประสิทธิภาพในการทำงานสูงมาก

วัตถุประสงค์ของการวิจัย

- เพื่อศึกษาแนวทางการใช้วิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์คำนวณอันตรกิริยาของไอออนทองแดงในรูปแบบที่ละลายน้ำ บนโครงสร้างของแมงโกสติน 3 ชนิด คือแอลฟาแมงโกสติน (α -mangostin) เบต้าแมงโกสติน (β -mangostin) และแกมมาแมงโกสติน (γ -mangostin)
- เพื่อสกัดแยกสารแมงโกสตินจากเปลือกมังคุดทั้ง 3 ชนิด คือ แอลฟาแมงโกสติน เบต้าแมงโก-สติน และแกมมาแมงโกสติน
- เพื่อศึกษาความสามารถในการดูดซับไอออนทองแดง ด้วยสารสกัดแมงโกสติน หรือเปลือกมังคุด

ขอบเขตของการวิจัย

- ศึกษากระบวนการดูดซับไอออนทองแดงที่สามารถละลายน้ำบนโครงสร้างของเมงโกสทิน 3 ชนิด คือแอลฟาเมงโกสทิน เบต้าเมงโกสทิน และแกมมาเมงโกสทิน ใช้การคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ แบบ HF/6-31G(d,p) และ B3LYP/6-31G(d,p)
- ศึกษาวิธีการสกัดสารเมงโกสทินทั้ง 3 ชนิด จากเปลือกมังคุด และเปรียบเทียบความสามารถของสารสกัดเมงโกสทินทั้ง 3 ชนิด
- ศึกษาประสิทธิภาพการดูดซับไอออนทองแดง ด้วยเปลือกมังคุด โดยเครื่องอะตอมมิก แอปซอร์พชันสเปกโตรมิเตอร์

ประโยชน์ที่ได้รับจากการวิจัย

- ใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานในการศึกษา และการประยุกต์ใช้วัสดุธรรมชาติ และวัสดุท้องถิ่นอื่นๆ ในการกำจัดโลหะหนักของหน่วยงานที่เกี่ยวข้องการดูแลผลกระทบของโลหะหนักต่อสิ่งแวดล้อม
- สามารถนำเอาความรู้ทางด้านคอมพิวเตอร์มาประยุกต์ใช้ในการแก้ปัญหาระบบทางเคมี ซึ่งสามารถสร้างความเชื่อมั่นของความเป็นไปได้ของระบบที่ทำการศึกษา ก่อนทำการปฏิบัติการจริง
- สามารถช่วยลดงบประมาณ และเวลาในการศึกษา ทดลองในห้องปฏิบัติการจริง
- ใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานในการศึกษาและการประยุกต์ใช้สารสกัดเมงโกสทิน หรือเปลือกมังคุด และวัสดุรองในท้องถิ่นอื่นๆ ในการกำจัดโลหะหนัก ของหน่วยงานที่เกี่ยวข้องการดูแลผลกระทบของโลหะหนักต่อสิ่งแวดล้อม
- สามารถนำเอาความรู้ที่ได้มาประยุกต์เป็นเทคนิคการออกแบบอุปกรณ์ที่ใช้ในการแก้ปัญหาการปนเปื้อนของโลหะหนักในสิ่งแวดล้อม