บทที่ 5
อภิปรายผล สรุปผล และข้อเสนอแนะ

อภิปราย และสรุปผลการวิจัย

การเกิดอันตรกิริยาของไอออนทองแดง บนโครงสร้างของสารแมงโกสติน ด้วยระเบียบวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

จากการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ ที่ระดับการคำนวณแบบ Hatree Fock และ Density Functional และใช้เบสิทเซตเป็น 6-31G (d,p) เพื่อสร้างความเชื่อมั่นทางทฤษฎีของการเกิดอัตรกิริยาของไอออนทองแดง ทั้งสองรูปแบบ คือ Cu^{2+} และ $CuSO_4$ บนโครงสร้างสารแมงโกสตินทั้งสามชนิด สามารถเกิดอันตรกิริยาระหว่างไอออนทองแดง ที่บริเวณของกลุ่ม 5-hydroxy-7-keto และกลุ่ม 1-hydroxy-6-methoxy บนโครงสร้างสารแมงโกสตินทุกชนิดของโครงสร้าง ซึ่งจะมีแรงในการเกิดอันตรกิริยาแตกต่างกัน เรียงตามลำดับจากมีแรงการเกิดอันตรกิริยามากไปหาน้อยดังนี้ β-mangostin > γ-mangostin > α-mangostin เนื่องจากการให้อิเล็กตรอนต่อไอออนทองแดงได้แตกต่างกัน ซึ่งแสดงให้เห็นว่าสารแมงโกสตินมีความสามารถในการดูดซับไอออนทองแดงชนิด Cu^{2+} และ $CuSO_4$ โดยไอออนทองแดงในรูปแบบ Cu_2^+ สามารถได้รับพลังงานการเกิดอันตรกิริยามากที่สุดเป็น -628.19 kcal/mol

การสกัดการสกัดสาร และการแยกสารสกัด α-mangostin, β-mangostin และ γ-mangostin

การสกัดสารแมงโกสตินจากเปลือกมังคุด ด้วยตัวทำละลายเมทานอล และแยกต่อด้วยวิธีทางโครมาโทกราฟี และพิสูจน์เอกลักษณ์ของแมงโกสตินที่แยกได้ ด้วยการเปรียบเทียบโครมาโทแกรมบนแผ่น TLC เทียบกับแมงโกสตินสารมาตรฐาน สามารถได้สารสกัดลักษณะของแข็งสีเหลือง ปริมาณ 0.36 g เป็นปริมาณน้อยมาก เมื่อเมื่อเปรียบเทียบกับการใช้เปลือกมังคุดเริ่มต้น 1,000 g ซึ่งไม่มีความเหมาะสม ในการนำไปศึกษาความสามารถในการดูดซับไอออนทองแดง จึงมีการประยุกต์ใช้เปลือกมังคุดเป็นวัสดุดูดซับแทน เนื่องจากคุณสมบัติของเปลือกมังคุดมีองค์ประกอบของสารแมงโกสตินอยู่ และเป็นวัสดุที่มีรูพรุนซึ่งหากสามารถดูดซับไอออนทองแดงได้ ก็สามารถนำไปประยุกต์ใช้เป็นวัสดุดูดซับที่เหมาะสมได้ เนื่องจากเป็นวัสดุเหลือทิ้งทางการเกษตร

การศึกษาปัจจัยที่มีผลต่อการดูดซับไอออนทองแดงในน้ำเสียสังเคราะห์ ด้วยเปลือกมังคุด ดังนี้

ปริมาณเปลือกมังคุด 2.50 กรัม เป็นปริมาณที่เหมาะสม ในการดูดซับไอออนทองแดงในน้ำเสียสังเคราะห์ ที่ความเข้มข้น 5 มิลลิกรัมต่อลิตร เวลาการดูดซับเป็น 120 นาที โดยมีประสิทธิภาพในการดูดซับได้ 72.50 % และเมื่อใช้ปริมาณที่มากขึ้น พบว่าประสิทธิภาพการดูดซับไม่มากขึ้น

ส่วนเวลาที่เหมาะสมในการดูดซับไอออนทองแดงในน้ำเสียสังเคราะห์ เป็นเวลา 90 นาที โดยปริมาณของไอออนทองแดง จะลดลงอย่างรวดเร็ว ในช่วงเริ่มต้นของเวลาสัมผัสประมาณ 10 นาทีแรก เพราะช่วงแรกพื้นที่ผิวบริเวณ Active Site ของวัสดุดูดซับยังมีพื้นที่อยู่มาก จึงสามารถดูดซับได้เร็ว อัตราการดูดซับในช่วงนี้จึงมากกว่าอัตราการคาย แต่เมื่อเวลาผ่านไปพื้นที่ผิวบริเวณ Active Site จะลดลงเพราะไอออนทองแดงเข้าไปเกาะลดลง อัตราการดูดซับจึงลดลง

การศึกษาไอโซเทอร์มของการดูดซับแบบแลงเมียร์ และแบบฟรุนดลิช (Freundlich Model)

จากการศึกษาปริมาณของเปลือกมังคุด และเวลาที่เหมาะสมในการดูดซับไอออนทองแดง แล้วนำมาศึกษาประสิทธิภาพการดูดซับที่ความเข้มข้นต่างๆ และวิเคราะห์ความสอดคล้องกับไอโซเทอร์มของการดูดซับแบบแลงเมียร์ และแบบฟรุนดลิชได้โดยการเขียนกราฟ และพิจารณาค่า R^2 ของไอโซเทอร์มการดูดซับไอออนทองแดงแบบแลงเมียร์ เท่ากับ 0.85 และ R^2 ของไอโซเทอร์มการดูดซับไอออนทองแดงแบบฟรุนดลิช เท่ากับ 0.96 ดังนั้นการดูดซับไอออนทองแดงด้วยเปลือกมังคุด มีความสอดคล้องกับไอโซเทอร์การดูดซับแบบพรุนดลิชมากกว่า นั่นคือการดูดซับดังกล่าวมีการดูดซับเป็นแบบต่อเนื่อง ไอออนทองแดงสามารถเกิดการดูดซับได้หลายชั้น (Multilayer) และสามารถเกิดการซ้อนทับของไอออนบนพื้นผิวของเปลือกมังคุดได้

ข้อเสนอแนะ

1. การศึกษาทางเคมีคอมพิวเตอร์ควรทำการศึกษา ในระบบที่มีขนาดใหญ่ขึ้น และมีจำนวนตัวถูกดูดซับหลายๆ อนุภาค ซึ่งต้องมีศักยภาพทางคอมพิวเตอร์ที่สูงมาก และต้องใช้เวลาในการศึกษามากกว่านี้
2. การประยุกต์ใช้เปลือกมังคุดในการดูดซับไอออนของโลหะชนิดอื่นๆ เพื่อให้เกิดมูลค่าในการใช้วัสดุเหลือทิ้งทางการเกษตรต่อไปในอนาคต
3. ศึกษาการนำเปลือกมังคุดหลังนำไปประยุกต์ใช้ในการดูดซับไอออนโลหะหนักในน้ำเสีย