

ชินวุธ พิพัฒน์ภานุกุล : การศึกษานาโนคอมพอสิตพอลิแล็คไทด์/พอลิเอธิลีน ไกลคอล/
มอนต์มอริลโลไนต์ (STUDY OF POLYLACTIDE/POLY(ETHYLENE GLYCOL)/
MONTMORILLONITE NANOCOMPOSITE) อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วยศาสตราจารย์
ดร.วิศิษฐ์ แววสูงเนิน, 169 หน้า.

ได้ศึกษาโครงสร้างระดับอะตอมของแร่ดินมอนต์มอริลโลไนต์ที่แตกเปลี่ยนประจุด้วย K^+ โดยใช้เทคนิค EXAFS และ โมเลกุลาร์ไดนามิกส์ (MD) ที่ 300 เคลวิน โดยใช้ COMPASS forcefield งานวิจัยนี้เริ่มจากการนำเทคนิค MD มาศึกษาโครงสร้างของระบบ K^+ ในแร่ดินมอนต์มอริลโลไนต์ ระบบนี้เป็นระบบอย่างง่ายของการเกิด intercalation ของพอลิเมอร์ในมอนต์มอริลโลไนต์ พบว่า ข้อมูลเชิงโครงสร้างได้แก่ ระยะระหว่างคู่อะตอมและจำนวนอะตอมที่ล้อมไอออนสอดคล้องกับผล ที่มีรายงานไว้แล้ว นอกจากนี้ได้ใช้วิถีของอะตอมใน MD (MD trajectories) ร่วมกับการจำลองการ กระเจิงของอิเล็กตรอน (electron scattering simulation) สร้างสเปกตรัม EXAFS สเปกตรัมที่ได้จาก MD สอดคล้องกับสเปกตรัมที่ได้จากการทดลอง จากการศึกษา MD-EXAFS พบว่า K^+ จะเหนี่ยวนำ ให้นำเข้ามาล้อม พร้อมกับยึดอยู่ที่ผิวของมอนต์มอริลโลไนต์บริเวณช่อง tetrahedral ของชั้นซิลิเกต ทั้งนี้พบว่าอะตอมโพแทสเซียมจะถูกล้อมรอบด้วยอะตอมออกซิเจน 11 อะตอม มาจากโมเลกุลของ น้ำ 5 อะตอม และมาจากผิวของมอนต์มอริลโลไนต์ด้านละ 3 อะตอม

ต่อจากนั้นเป็นการศึกษาโดยการจำลองโมเลกุลทางคอมพิวเตอร์ โดยใช้เทคนิคพลวัตเชิง โมเลกุล เพื่อศึกษาระบบ PLA/MMT และ PLA/PEG/MMT พบว่าอันตรกิริยาระหว่างพื้นผิว MMT และพอลิเมอร์ของระบบ PLA/PEG/MMT มีค่าสูงกว่า PLA/MMT

สุดท้ายศึกษาการผสม PLA/PEG และนาโนคอมพอสิต PLA/MMT เตรียมแบบหลอมเหลว ในเครื่อง internal mixer หัวบดผสมแบบ counter-rotating roller rotor พบว่าเติม PEG 30% โดย น้ำหนักจะลด T_g ลงไปต่ำกว่าอุณหภูมิห้อง และลดค่า modulus ส่งผลต่อความสามารถในการยึด และแข็งเปราะแบบเทอร์โมพลาสติก นอกจากนั้นนาโนคอมพอสิต PLA/MMT ด้วยการผสม พบว่า PLA/MMT ที่ดัดแปลงด้วย PEG มีค่า tensile strength และ Young's modulus สูงกว่าระบบที่ไม่ ดัดแปลงด้วย PEG สมบัติเชิงกลและเชิงความร้อนของนาโนคอมพอสิต PLA ขึ้นกับการเปลี่ยน น้ำหนักโมเลกุลของ PEG ที่ใช้ดัดแปลง และปริมาณของ MMT ที่เติม

สาขาวิชาเคมี
ปีการศึกษา 2553

ลายมือชื่อนักศึกษา ชินวุธ พิพัฒน์ภานุกุล.
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา วิศิษฐ์ แววสูงเนิน
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม [ลายมือ]

CHINNAWUT PIPATPANUKUL : STUDY OF POLYLACTIDE/
POLY(ETHYLENE GLYCOL)/MONTMORILLONITE NANOCOMPOSITE
THESIS ADVISOR : ASST. PROF. VISIT VAO-SOONGNERN, Ph. D.
169 PP.

NANOCOMPOSITE/NANO-CLAY/PEG/PLA/EXAFS/MOLECULAR DYNAMICS
SIMULATIONS

The local atomistic structure of natural montmorillonite exchanged with K ions were investigated mainly by using Molecular Dynamics (MD) simulations with COMPASS forcefield at 300 K. Firstly, the solvation structure of K ion in montmorillonite as model complexes for the polymer intercalates in montmorillonite were determined. The structural properties *i.e.* pair distances and coordination numbers were in very good agreement with literatures. Moreover, MD trajectories were coupled to electrons scattering simulations to generate MD-EXAFS spectra. EXAFS spectra from MD simulations were consistent with those from experiments. MD-EXAFS results revealed that K ions were induced water solvation. The solvation shell of K ion of eleven oxygen atoms, there are five water molecules surround the K ion that coordinates with three oxygen atoms from each closest silicates tetrahedral sheet.

Next, atomistic model of PLA/MMT and PLA/PEG/MMT interfacial studies, it was evident from binding energy between PLA and MMT on PLA/PEG/MMT model is more than PLA/MMT model. The results from simulation indicate that; PEG were

were effectively enhance interfacial adhesion for PLA/MMT since the binding energies significantly increase with PEG addition

Finally, experiment of PLA/PEG blend and PLA/MMT nanocomposite were prepared with melt mixing used internal mixer counter-rotating roller rotor mixer. We found that addition of 30 wt% PEG to PLA of low stereoregularity decreased T_g from above ambient temperature to below ambient temperature and thereby decreased the modulus and increased the ductility of this relatively rigid, brittle thermoplastic. Moreover, PLA/MMT modified with PEG showed better strength more than PLA/MMT non-modified with PEG. The tensile strength and Young's modulus value of PLA-base nanocomposite varied depending on molecular weight of PEG modification and MMT content.

School of Chemistry

Academic Year 2010

Student's Signature Chinnawut Pipatpanukul

Advisor's Signature stint saor

Co-Advisor's Signature S. D.