กนกพร เรืองศรี : การจำลองระดับโมเลกุลและการศึกษาเชิงทดลองเกี่ยวกับโครงสร้างและคุณสมบัติของอิเล็กโทรไลต์แบบพอลิเมอร์นาโนคอมโพสิต (MOLECULAR SIMULATION AND EXPERIMENTAL STUDIES ON STRUCTURES AND PROPERTIES OF POLYMER NANOCOMPOSITE ELECTROLYTE) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.วิสิษฐ์ แววสูงเนิน, 101 หน้า.

คำสำคัญ: การจำลองระดับโมเลกุล, การตกผลึก, นาโนฟิลเลอร์

วิทยานิพนธ์นี้มีการใช้ทั้งการจำลองระดับโมเลกุลและการทดลองเพื่อศึกษาปัญหาเกี่ยวกับปัจจัยสำคัญในการควบคุมการตกผลึกและการนำไอออนิกของอิเล็กโทรไลต์นาโนคอมโพสิตพอลิเมอร์ วิทยานิพนธ์นี้มีสี่ส่วน หัวข้อแรกคือการศึกษาเชิงทดลองเกี่ยวกับผลของการเติมนาโนฟิลเลอร์ต่อการตกผลึกและสัณฐานวิทยาของพอลิเอทิลีนออกไซด์ หรือ PEO ที่มีน้ำหนักโมเลกุลสูง โดยการเติมซิลิกานาโนฟิลเลอร์ลงในพอลิเมอร์ PEO ซิลิกานาโนฟิลเลอร์ที่เติมลงไปนั้นประกอบด้วยซิลิกาปกติที่ไม่มีการดัดแปลง (SiO_2), ซิลิกาที่เคลือบด้วยสารคู่ควบไซเลน (Sil-SiO_2), ซิลิกาดัดแปลงด้วยหมู่อะมิโน (A-SiO_2), โพลีฮีดรอลโอลิโกเมอริกซิลเซสควิออกเซน (POSS) และ มอนต์มอริลโลไนต์ (MMT) จากผลการทดลอง MMT สามารถทำหน้าที่เป็นสารหน่วงที่ดีในการตกผลึกของพอลิเมอร์ คาดว่าเป็นเพราะพอลิเมอร์สามารถเข้าไปแทรกตัวในชั้นของ MMT

ส่วนที่สองของวิทยานิพนธ์ มีการใช้การจำลองระดับโมเลกุลเพื่อศึกษาพฤติกรรมการตกผลึกของพอลิเอทิลีน (PE) แบบจำลองมอนติคาร์โลอย่างหยาบของ PE นาโนคอมโพสิตได้พัฒนาขึ้นเพื่อศึกษาผลกระทบของรูปร่างนาโนฟิลเลอร์ (ทรงกลม, แผ่น, แท่ง) เมื่อดูการตกผลึกของ PE พอลิเมอร์นาโนคอมโพสิตที่เติมนาโนฟิลเลอร์แบบแท่งและแบบแผ่นมีแนวโน้มที่จะกระตุ้นให้เกิดการก่อตัวของผลึกได้รวดเร็วและระเบียบมากขึ้นโดยเฉพาะอย่างยิ่งสำหรับนาโนฟิลเลอร์แบบแผ่น ในทางตรงกันข้าม PE นาโนคอมโพสิตที่ใส่นาโนฟิลเลอร์แบบทรงกลมจะมีการตกผลึกช้าลงและมีสัดส่วนความเป็นทรานส์ต่ำกว่า ซึ่งส่งผลให้โครงสร้างมีความเป็นระเบียบน้อยกว่า

นอกจากนี้การจำลองระดับโมเลกุลยังใช้เพื่อตรวจสอบพฤติกรรมของสายโซ่พอลิเมอร์ที่ถูกจำกัดอยู่ระหว่างกำแพงฟิลเลอร์แบบแผ่นทั้งหมดสองแผ่นซึ่งมีแรงดึงดูดระหว่างพื้นผิวกำแพงและพอลิเมอร์ที่แตกต่างกัน สำหรับฟิล์ม PE ที่มีแรงดึงดูดระหว่างผนังพอลิเมอร์กับผนังที่แข็งแกร่ง ความหนาแน่นในบริเวณกลางฟิล์มจะลดลง และพอลิเมอร์มีแนวโน้มที่จะเคลื่อนที่มาอยู่ใกล้กับพื้นผิวผนัง สำหรับคุณสมบัติไดนามิก พอลิเมอร์ในพื้นที่ด้านในมีความคล่องตัวของโซ่ค่อนข้างเร็วกว่าเนื่องจากมีความหนาแน่นต่ำกว่า ไดนามิกของพอลิเมอร์ลดลงอย่างมากจากการดึงดูดจากพื้นผิวผนัง

ส่วนสุดท้ายของวิทยานิพนธ์ มีการใช้การจำลองโมเลกุลแบบมัลติสเกลเพื่อศึกษาเกี่ยวกับโฮสต์พอลิเมอร์ชนิดใหม่ที่สามารถนำมาทำเป็นพอลิเมอร์อิเล็กโทรไลต์ พอลิเมอร์ดังกล่าวคือ พอลิโพรพิลีนออกไซด์ หรือ PPO เป็นพอลิเมอร์อสัณฐานและที่น่าสนใจเนื่องจากมีโครงสร้างคล้ายกับ PEO เป็น -[$CH_2CH(CH_3)O$]- เมื่อผสมเกลือ LiSCN และ KSCN ลงใน PPO โครงสร้างการละลายและไดนามิกของไอออนของอิเล็กโทรไลต์ PPO/LiSCN และ PPO/KSCN ได้รับการศึกษาโดยใช้การจำลองแบบทางพลวัตเชิงโมเลกุล ผลที่ได้แสดงให้เห็นว่าไอออน Li^+ แสดงการแพร่กระจายเร็วกว่า K^+ ในทางกลับกัน K^+ มีโครงสร้างการละลายที่จับกับออกซิเจนได้ดีกว่า Li^+

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชาเคมี
ปีการศึกษา 2566

ลายมือชื่อนักศึกษา กนกพร เรืองศรี
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

KANOKPORN RUEANGSRI : MOLECULAR SIMULATION AND EXPERIMENTAL STUDIES ON STRUCTURES AND PROPERTIES OF POLYMER NANOCOMPOSITE ELECTROLYTE THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. VISIT VAO-SOONGNERN, Ph.D. 101 PP.

Keyword: Molecular simulation, crystallization, nanofiller

Both molecular simulation and experiment were employed to study the fundamental factors to control the crystallization and ionic conductivity of polymer nanocomposite electrolytes. There are four parts in this thesis. The first topic is the experimental study on the effect of adding nanofillers on the crystallization and morphology of high molecular weight poly(ethylene oxide), PEO. Five types of silica-based nanofiller and PEO were studied including unmodified silica (SiO_2), silica treated with silane coupling agents (Sil-SiO_2), silica modified with amino groups (A-SiO_2), Polyhedral Oligomeric Silsesquioxane (POSS) and Montmorillonite (MMT). From the results, MMT can act as a good retarding agent for polymer crystallization assuming that intercalation occurs.

For the second part of the thesis, molecular simulation was employed to study the crystallization behavior of polyethylene (PE). A Monte Carlo simulation of coarse-grained models of PE nanocomposites was developed to study the effect of nanofiller shapes (nanosphere, nanoplate and nanostick) on polymer crystallization. PE nanocomposites filled with nanostick and nanoplate tend to induce earlier crystalline formation and have more ordered structures, especially nanocomposites with nanoplate filler. In contrast, PE nanocomposites filled with nanospheres exhibit slower crystallization with a lower amount of trans fraction and, as a result, form less ordered structures.

Next, molecular simulation was also used to investigate the behavior of dense polymer chains confined between two nanoplates with different polymer-surface interactions. For PE films with stronger polymer-wall interaction, densities in the bulk region are decreased and the chains tend to stay close to the wall surface. For dynamic properties, chains in the inner region have relatively faster chain mobility due to lower

density. Chain dynamic decreases significantly due to attractive interaction with the wall surface.

In the final part of the thesis, multiscale molecular simulation was used to create the amorphous structure of a new polymer host for electrolytes. Poly(propylene oxide), PPO, is a fully amorphous polymer with a repeating unit similar to PEO as $-[CH_2CH(CH_3)O]-$. Upon mixing LiSCN and KSCN salt with the PPO matrix, the solvation structures and ion dynamics of PPO-KSCN electrolytes were studied by molecular dynamic (MD) simulation of the fully atomistic models. Li^+ ions show faster diffusion than K^+. On the other hand, K^+ exhibits a stronger solvation structure than Li^+.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Chemistry
Academic Year 2023

Student's Signature กนกพร เรืองศรี
Advisor's Signature