

จิตติมา เขาว์ดำรงสกุล : การประยุกต์สเปกโตรสโกปีการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์และการจำลอง  
โมเลกุลเพื่อศึกษาโครงสร้างการจัดเรียงตัวของระบบพอลิเมอร์: โพลีเอทิลีนไทโอไซยาเนต  
อิเล็กโทรไลต์ (APPLICATION OF X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY AND  
MOLECULAR SIMULATION TO STUDY THE SOLVATION STRUCTURE OF  
POLYMER:KSCN ELECTROLYTES) อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วิศิษฐ์  
แววสูงเนิน, 199 หน้า.

วัตถุประสงค์ของวิทยานิพนธ์นี้คือการศึกษาผลของชนิดไฮดรอกไซด์พอลิเมอร์ที่มีต่อโครงสร้าง  
การจัดเรียงตัวของไอออน  $K^+$  ในสารประกอบเชิงซ้อน TET:KSCN PPG:KSCN และ PVA:KSCN  
ด้วยเทคนิคทางการทดลองและโมเลกูลาร์ไดนามิกส์ (MD) การจำลองด้วยเทคนิค MD โดยใช้  
COMPASS forcefield เพื่อคำนวณ Radial Distribution Function (RDF) และโครงสร้างระดับ  
อะตอมที่ 300 เคลวิน สมบัติทางโครงสร้างที่ได้จากการจำลองด้วยเทคนิค MD พบว่าสอดคล้องเป็น  
อย่างดีกับผลการศึกษาที่มีรายงานไว้แล้ว โครงสร้างการจัดเรียงตัวที่จำลองได้นำมาใช้คำนวณสเปก  
ตรัม MD-EXAFS สำหรับระบบ  $K^+$  ในน้ำ PVA TET และ PPG สเปกตรัม MD-EXAFS ที่คำนวณ  
ได้นำมาเปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ได้จากการทดลอง โดยการเปรียบเทียบสเปกตรัมดังกล่าวพบว่าส  
เปกตรัมจากการจำลองแบบโมเลกูลาร์ไดนามิกส์สอดคล้องกับสเปกตรัมที่ได้จากการทดลอง ดังนั้น  
สามารถเสนอได้ว่าการจำลองแบบโมเลกูลาร์ไดนามิกส์ด้วย empirical forcefield เป็นเทคนิคที่เป็น  
ประโยชน์ในการศึกษาโครงสร้างระดับอะตอมของสารละลายน้ำไอออนิก และสารประกอบที่เป็น  
ตัวแทนของพอลิเมอร์อิเล็กโทรไลต์

การศึกษาสมบัติเชิงโครงสร้าง และเชิงพลวัตของระบบ bidisperse พอลิเอทิลีนออกไซด์  
(PEO) ด้วยเทคนิค Monte Carlo (MC) โดยใช้แบบจำลองโมเลกุลพอลิเมอร์บนโครงผลึกที่มีเลขโค  
ออร์ดิเนชันสูงที่ 373 เคลวิน พบว่า PEO สอดคล้องกับ universal scaling law และการเติมสายโซ่  
ขนาดเล็กทำให้การเคลื่อนที่ของพอลิเมอร์เพิ่มขึ้น เนื่องจากสายโซ่ขนาดเล็กลatching จำกัดเชิงพลวัตที่  
มีต่อสายโซ่ขนาดใหญ่ ทำให้สายโซ่ขนาดใหญ่เคลื่อนที่และคลายตัวเร็วขึ้น

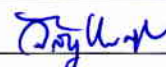
สาขาวิชาเคมี

ปีการศึกษา 2554

ลายมือชื่อนักศึกษา



ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา



ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม



JITTIMA CHAODAMRONGSAKUL : APPLICATION OF X-RAY  
ABSORPTION SPECTROSCOPY AND MOLECULAR SIMULATION TO  
STUDY THE SOLVATION STRUCTURE OF POLYMER:KSCN  
ELECTROLYTES THESIS ADVISOR : ASST. PROF. VISIT  
VAO-SOONGNERN, Ph.D. 199 PP.

POLYMER ELECTROLYTES/PEG/PPG/PVA/EXAFS/MOLECULAR  
DYNAMICS SIMULATIONS

The objective of this thesis is to study the effect of host polymer type on the solvation structure of  $K^+$  ion in Tetraglyme:KSCN (TET:KSCN), Poly(propylene glycol):KSCN (PPG:KSCN) and Poly(vinyl alcohol):KSCN (PVA:KSCN) complexes by experimental and Molecular Dynamics (MD) simulation technique. The MD simulations with COMPASS forcefield were used to calculate the Radial Distribution Function (RDF) and local atomistic structure at 300 K. Those structural properties obtained from the MD simulations are found to be in very good agreement with other previous work. The simulated solvation structures were used to compute the MD-EXAFS spectra for  $K^+$  ions in water, PVA, TET and PPG. MD-EXAFS spectra generated from MD simulations were then compared with the measured spectra. Comparison shows the consistence between the EXAFS spectra from MD simulations and those from the experiments. Thus, we suggest that MD simulation with empirical forcefield is a useful technique to study the local solvation structures of ionic aqueous solutions and model compounds representing polymer electrolytes.

The static and dynamics properties of bidisperse PEO were investigated by a Monte Carlo (MC) method of a coarse-grained polymer model on a high coordination lattice at 373 K. In all systems, PEO were satisfied with a universal scaling law. The results revealed that insertion of short chains (bidisperse) cause the mobility of the polymer chain to increase, due to the short chains reducing the dynamic constraint on the long chain and inducing the long chain to move and relax faster.



School of Chemistry

Academic Year 2011

Student's Signature J Ch

Advisor's Signature Sanit Sae

Co-Advisor's Signature Wanwan Khysun