บทคัดย่อ

ได้ศึกษาโครงสร้าง อันตรกิริยา สมบัติทางความร้อนและการนำไฟฟ้าเชิงไอออนของสารอิเล็กโตรไลท์ระบบพอลิเมอร์นาโนคอมพอสิต โดยระบบที่สนใจในที่นี้คือพอลิเอทธิลีนออกไซด์/เกลือโซเดียมไทโอไซยาเนต/มอนต์โมริลโลไนต์ (PEO)8NaSCN/MMT เมื่อ PEO, NaSCN, MMT ทำหน้าที่เป็นพอลิเมอร์ตัวกลาง, ประจุไอออน และสารเติมแต่งอนินทรีย์ ตามลำดับ งานวิจัยนี้เริ่มจากการใช้เทคนิคการจำลองแบบโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์เพื่อศึกษาโครงรูปพอลิเมอร์โดยใช้ทฤษฎีไอโซเมอร์เชิงโครงรูป (RIS) ในการทำนายสมบัติเชิงโครงรูปของพอลิเมอร์ เช่น ขนาดของโมเลกุลพอลิเมอร์, ค่าไดโพลโมเมนต์ และสัมประสิทธิ์ที่ขึ้นกับอุณหภูมิได้สอดคล้องกับผลการทดลองเป็นอย่างดี และได้นำการจำลองด้วยคอมพิวเตอร์มาศึกษาระบบพอลิเมอร์อิเล็กโตรไลต์เพื่อศึกษาโครงสร้างระดับอะตอมของการจับกันระหว่างไอออนกับเกลือ

จากนั้นเป็นการศึกษาระบบอิเล็กโตรไลท์นาโนคอมพอสิต (PEO)8NaSCN/yMMT ซึ่งมีอัตราส่วนโมลาร์ของ PEO:NaSCN คงที่ที่ 8:1 และ y มีค่าตั้งแต่ร้อยละ 0 ถึง 20 โดยน้ำหนัก ได้ศึกษาผลของการเติมเกลือและดินเหนียวต่อโครงสร้างและสมบัติของวัสดุพอลิเมอร์อิเล็กโตรไลท์ โดยใช้เทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (XRD), ดิฟเฟอเรนเชียลสแกนนิงคาลอริมิเตอร์ (DSC), อินฟราเรด สเปกโทรสโกปี (FT-IR), และการวิเคราะห์การนำไฟฟ้าเชิงไอออน (Impedance Analyzer) จากผลของ DSC และ XRD พบว่าร้อยละความเป็นผลึกของพอลิเมอร์ลดลงเมื่อเติมดินเหนียวลงไป สำหรับการศึกษาการเกิดสารเชิงซ้อนระหว่างเกลือกับพอลิเมอร์นั้นพบว่าเกิดแถบการดูดกลืนรังสีอินฟราเรดใหม่ขึ้นซึ่งจะไม่พบใน PEO และยังพบว่าการสั่นของพันธะ C-O-C มีแถบที่กว้างขึ้นตามปริมาณของเกลือที่เติม ข้อมูลจาก FTIR ยังใช้ศึกษาการเกิดอันตรกิริยาแบบแข่งขันระหว่าง PEO/NaSCN และ PEO/MMT กล่าวคือเมื่อเติม MMT จะดูเหมือนทำให้มีการแตกตัวของเกลือเพิ่มขึ้นและเพิ่มจำนวนไอออนอิสระในระบบ ค่าการนำไฟฟ้าของ (PEO)8NaSCN/MMT มีค่าสูงกว่า (PEO)8NaSCN และมีค่าสูงสุดประมาณ 5 เท่า ที่ร้อยละของดินเหนียวประมาณ 15 ซึ่งเป็นจากการที่ดินเหนียวมีผลต่อการแตกตัวของเกลือ ในขณะที่ทำให้วัสดุมีความหนืดสูงขึ้น ดังนั้น จะมีปริมาณดินเหนียวที่เหมาะสมที่สุดค่าหนึ่งที่ทำให้มีค่าการนำไฟฟ้าสูงสุดอันเป็นผลมาจากการแข่งขันของปัจจัยทั้งสอง

Abstract

The structure, interaction, thermal behavior and ionic conductivity of polymer nanocomposite electrolytes were studied. The system of interest is (PEO)8NaSCN/MMT at various MMT content, where PEO (Polyethylene oxide), NaSCN (Sodium thiocyanate) and MMT (Montmorillonite) act as polymer hosts, ionic charge, and inorganic filler, respectively. This work starts from the computational molecular modeling of polymer conformation based on Rotational Isomeric State (RIS) model. These RIS models predict chain dimensions, dipole moments, and temperature coefficients in reasonably agreement with experiments.

Next, (PEO)8NaSCN/yMMT system, where the molar ratio of PEO:NaSCN is fixed at 8:1 and y varies from 0 to 20 wt% were investigated. X-Ray Diffraction (XRD), Differential Scanning Calorimeter (DSC), Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) and Impedance Analyzer were employed to investigate the effect of salt, clay and polymer filler on structures and properties of these materials. From DSC and XRD results, the percent of polymer crystallinity was decreased upon addition of clay. Complexation of salt to polymer was substantiated by an appearance of new bands not present in pure PEO and also broaden the C-O-C vibrations as the salt content increased. Competitive interaction between PEO/NaSCN and PEO/MMT can also be illustrated by FTIR data. Adding MMT seems to enhance salt dissociation and increase the carrier concentration. The magnitude of an ionic conductivity of (PEO)8NaSCN/MMT is highest at 15 %MMT as a result from a competitive interaction between ionic dissociation (MMT and NaSCN) and increased viscosity. Hence, optimized MMT content is needed to obtain the highest ionic conductivity for PEONaSCN/MMT electrolyte nanocomposite.