อดิศักดิ์ ทาขุลี : การเตรียม การพิสูจน์เอกลักษณ์ และการจำลองโมเลกุลของพอลิ(แลคติค แอซิค)/พอลิ(เอธิลีน ไกลคอล) บล็อกโคพอลิเมอร์ และบล็อกโคพอลิเมอร์ผสม (PREPARATION, CHARACTERIZATION AND MOLECULAR SIMULATION OF POLY(LACTIC ACID)/POLY(ETHYLENE GLYCOL) (PLA/PEG) BASED BLOCK COPOLYMER AND BLENDS) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.วิสิษฐ์ แววสูงเนิน, 254 หน้า.

พอลิ(แลคติค แอซิค) (PLA) เป็นวัสดุพอลิเมอร์ที่สามารถย่อยสลายเองได้ในธรรมชาติและไม่เป็นพิษต่อมนุษย์และสิ่งแวดล้อม ด้วยเหตุนี้ PLA จึงได้รับความสนใจเป็นอย่างมากในการนำไปใช้ประโยชน์ในช่วงทศวรรษที่ผ่านมา แต่อย่างไรก็ตามยังมีสมบัติทางกายภาพบางประการที่ยังเป็นข้อจำกัดในการนำ PLA ไปใช้งานตามต้องการ เช่น ความเปราะ ยืดหยุ่นได้น้อย จึงทำให้ต้องมีการแก้ไขคุณสมบัติด้อยของ PLA เช่น การผสมกับพอลิ(เอธิลีน ไกลคอล) (PEG) ซึ่งมีสมบัติเชิงวัสดุที่ยืดหยุ่นกว่า ซึ่งพบว่า PEG ช่วยลดข้อด้อยของ PLA ได้เป็นอย่างดี อย่างไรก็ตาม ระบบพอลิเมอร์ผสมของ PLA/PEG จะมีการแยกตัวของแต่ละองค์ประกอบออกจากกันเมื่อเวลาผ่านไป ซึ่งส่งผลให้พอลิเมอร์ผสมของ PLA/PEG มีสมบัติเชิงกลด้อยลง ดังนั้นการศึกษานี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อลดการแยกตัวของแต่ละองค์ประกอบในพอลิเมอร์ผสมโดยใช้บล็อกโคพอลิเมอร์ PLA-PEG-PLA เป็นสารเติมแต่งสำหรับ PLA ได้นำข้อมูลจากการวิเคราะห์เชิงความร้อนและวิทยากระแสของพอลิเมอร์ผสม PLA/PEG และ PLA/PLA-PEG-PLA ในการพิจารณาคุณสมบัติการเข้ากันได้ของแต่ละองค์ประกอบในพอลิเมอร์ผสม การศึกษานี้ยังได้ใช้วิธีการจำลองโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์ในระดับอะตอมและมีโซสเกลเพื่อสร้างความเข้าใจเชิงลึกในการอธิบายผลที่ได้จากการทดลอง นอกจากนี้เพื่อให้เกิดความเข้าใจลักษณะทางฟิสิกส์ของวัสดุพอลิเมอร์ที่มีหลายวัฏภาคจึงได้ศึกษาพอลิเมอร์ระบบผสมของพอลิเอธิลีนและพอลิโพรพิลีน (PE/PP) และ พอลิเอธิลีน นาโนคอมพอสิตด้วยวิธีการจำลองมอนติ คาร์โล โดยผลการศึกษาหลักที่ได้ในแต่ละส่วนสามารถสรุปได้ดังนี้

PLA-PEG-PLA มีประสิทธิภาพในการลดการแยกตัวของพอลิเมอร์ผสมกับ PLA ได้ดีกว่าการใช้ PEG ข้อมูลดังกล่าวนี้สอดคล้องเป็นอย่างดีกับผลการศึกษาแบบจำลองโมเลกุลทางคอมพิวเตอร์ทั้งเทคนิคพลวัตเชิงโมเลกุล (MD) และ พลวัตอนุภาคเชิงกระจาย (DPD)

สำหรับระบบ PE/PP ที่มีของสเตอริโอของ PP ต่างกัน พบว่า ขนาดของโมเลกุล ความแข็ง (C_n) และการแพร่ (D) ของสายโซ่ PE ในพอลิเมอร์ผสมจะเปลี่ยนแปลงตามโครงสร้างสเตอริโอเคมีของ PP นอกจากนี้ยังพบว่าระบบ PE/*a*PP และ PE/*i*PP PE นั้นจะเข้ากันได้บางส่วนในขณะที่ระบบ PE/*s*PP จะไม่เข้ากันที่สภาวะหลอมเหลว

สำหรับการศึกษานาโนคอมพอสิตของ PE ที่มีการกระจายน้ำหนักโมเลกุลสองค่า พบว่าผลของการเติม PE สายสั้นลงไป จะรบกวนการเกิดโครงสร้างแบบสะพานระหว่างสายโซ่ยาวของ PE และอนุภาคนาโน นอกจากนี้สมบัติเชิงพลวัตของพอลิเอธิลีนสายโซ่ยาวจะเคลื่อนที่ช้าลงเมื่อบริเวณระหว่างอนุภาคนาโนแคบมากๆ

สาขาวิชาเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2556 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

ADISAK TAKHULEE : PREPARATION, CHARACTERIZATION AND MOLECULAR SIMULATION OF POLY(LACTIC ACID)/ POLY(ETHYLENE GLYCOL) (PLA/PEG) BASED BLOCK COPOLYMER AND BLENDS. THESIS ADVISOR: ASSOC. PROF. VISIT VAO-SOONGNERN, Ph.D. 254 PP.

POLY(LACTIC ACID)/POLY(ETHYLENE GLYCOL)/BLOCK COPOLYMER/ BLEND/COMPUTER SIMULATION

Poly(lactic acid) (PLA) is a bioplastics that is biodegradable in nature and non-toxic to human and environment. For this reason, there has been a great interest during the past decade to develop this material for various applications. According to its brittleness and low elongation at break, it is necessary to improve the properties of PLA for practical usage. Blending PLA with plasticizer such as polyethylene glycol (PEG) has been recognized as an effective method to toughen PLA. Unfortunately, PLA/PEG blends usually phase separate over time at room temperature. To solve the problem of phase separation of these blends, a triblock copolymer of PLA and PEG (PLA-PEG-PLA) was proposed as the plasticizer for PLA in this work. Thermal and rheological properties of PLA/PEG and PLA/PLA-PEG-PLA blends were used to determine the miscibility of these mixtures. Atomistic molecular dynamic and mesoscale simulations were also performed to validate experimental findings and gain more insight at an atomistic and nanoscale level of these materials. To extend an understanding of the physical characteristics of multiphase polymeric material, structure and dynamics of bidisperse polyethylene (PE) nanocomposites and

polyethylene/polypropylene (PE/PP) blends with different PP tacticity were investigated by Monte Carlo simulation of a coarse-grained polymer model. The key findings of this thesis can be summarized as followings.

PLA-PEG-PLA triblock copolymer is capable to reduce phase separation compared to blending PLA with bare PEG. This finding is in good agreement with the results obtained from molecular dynamics (MD) and dissipative particle dynamics (DPD) simulations.

For the PE/PP blend with different tacticity of PP chains, molecular dimensions, characteristic ratio (C_n) and self-diffusion coefficient (D) of PE chains in the blends are sensitive to the stereochemistry of PP component. In addition, the results suggest that PE/*a*PP and PE/*i*PP are partial miscible while PE/*s*PP is completely immiscible at the melt.

The presence of short PE chains in the polymer matrix of bidisperse PE nanocomposites leads to a reduction of the bridge conformation of long PE chains. Under the strong confinement, the mobility of the long chains in bidisperse nanocomposites was slower than those in monodisperse PE nanocomposite systems.

School of Chemistry Student's Signature _____

Academic Year 2013 Advisor's Signature _____