ชุติมา เสพย์ธรรม : การศึกษาการดูดซับและส่วนที่เกี่ยวข้องของสีฟลาโวนอยด์จากแก่น แกแล (Maclura cochinchinensis (Lour.) Corner) ในการย้อมใหม (ADSORPTION AND RELATED STUDIES ON SOME FLAVONOID DYES FROM MACLURA COCHINCHINENSIS (LOUR.) CORNER AND SILK DYEING) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ คร.เสาวณีย์ รัตนพานี, 179 หน้า.

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาอันตรกิริยาระหว่างฟลาโวนอยค์ และอลูมิเนียมไอออน โดยเทคนิค ยูวี-วิสิเบิล สเปกโทรสโกปี รวมทั้งศึกษาจลนพลศาสตร์และอุณหพลศาสตร์ทางเคมีของการย้อมสี มอรินและสีสกัดจากแก่นแกแลบนเส้นใยไหม ในการทดลองได้ทำการหาปริมาณสัมพันธ์ของการ เกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างอลูมิเนียมไอออนและมอริน (M) และเคอซิติน (Q) ในสภาวะที่ พีเอช 4.5 และไม่มีการควบคุมพีเอช นอกจากนี้ยังได้ศึกษาการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่าง อลูมิเนียม (AI) และแกลเลียม (Ga) กับมอรินและเคอซิตินด้วยเทคนิคอิเลกโทรสเปรย์แมสสเปกโทร เมทรี จากการทดลองพบว่าองค์ประกอบหลักของสารประกอบเชิงซ้อน Al:M และ Al:Q เป็น 1:2 เมื่อทำการเติมอะเซทิลเซอรีนเมทิลเอสเทอร์ (Ser) ซึ่งเป็นองค์ประกอบในเส้นใหมลงไปใน สารประกอบเชิงซ้อน Al:M, Ga:M, Al:Q และ Ga:Q พบว่าอัตราส่วนของ Ser:Al:M และ Ser:Al:Q เป็น 1:1:1 และ 1:1:2 นอกจากนี้ยังได้คำนวณค่าความร้อนของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนโดย เปรียบเทียบระหว่างมีและไม่มีโมเลกุลของน้ำเป็นองค์ประกอบด้วยวิธีเซมิเอมพิริกัล PM3

นอกจากนี้งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาจลนพลศาสตร์และ ไอโซเทอร์มของการคูดซับ อลูมิเนียมบนไกโทซาน พบว่าความสามารถในการคูดซับขึ้นอยู่กับพีเอช ความเข้มข้นเริ่มต้นของ สารละลายอลูมิเนียม และอุณหภูมิ และพบว่าอัตราการคูดซับอลูมิเนียมบนไกโทซานจัดเป็น ปฏิกิริยาอันดับสองเสมือนโดยมีพลังงานก่อกัมมันต์  $(E_j)$  56.4 กิโลจูลต่อโมล แสดงให้เห็นว่าการ คูดซับอลูมิเนียมบนใคโทซานเป็นการคูดซับทางเคมี สำหรับการศึกษาทางอุณหพลศาสตร์พบว่า การคูดซับอลูมิเนียมบนใคโทซานเป็นการคูดซับแบบแลงเมียร์ ค่าเอนทัลปีของการคูดซับเท่ากับ -51.0 กิโลจูลต่อโมล และได้หาค่าพลังงานอิสระกิบส์  $(\Delta G^\circ)$  และค่าเอนโทรปีที่เปลี่ยนแปลงไป  $(\Delta S^\circ)$  ของการคูดซับอลูมิเนียมบนใคโทซานอีกด้วย

สาขาวิชาเคมี ปีการศึกษา 2549 ลายมือชื่อนักศึกษา ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม CHUTIMA SEPTHUM: ADSORPTION AND RELATED STUDIES ON SOME FLAVONOID DYES FROM *MACLURA COCHINCHINENSIS* (LOUR.) CORNER AND SILK DYEING. THESIS ADVISOR: ASSOC. PROF. SAOWANEE RATTANAPHANI, Ph.D. 179 PP.

## ADSORPTION/KINETICS/THERMODYNAMICS/MORIN/QUERCETIN/ ALUMINIUM/GALLIUM/N-ACETHYL SERINE METHYL ESTER

The interaction of flavonoids with metal ions and kinetics and thermodynamics of the adsorption of flavonoid and extracted dyes from heartwood *Maclura cochinchinensis* (Lour.) Corner onto silk were carried out in this research project. The formation of complexes between alum with morin (M) and quercetin (Q) in aqueous solution at pH 4.5 and without pH control have been studied by UV-visible spectroscopy. In addition, Al(III) and Ga(III) complexes formed by morin and quercetin in aqueous solution were investigated by means of electrospray mass spectrometry (ES-MS). In the full scan mass spectra, Al:M and Al:Q showed major 1:2 stoichiometric ratios. When (S)-N-acetylserine methyl ester (Ser), as a partial mimic of the serine residue in silk, was added to Al:M, Ga:M, Al:Q and Ga:Q complexes in aqueous solution, the mass spectra of Ser:Al:M and Ser:Al:Q showed 1:1:1 and 1:1:2 stoichiometric ratios. Calculated heats of formation of potential structures of the complexes, with and without bound water, were obtained using semiempirical PM3 calculations.

The adsorption kinetic and thermodynamic studies of alum-morin and alumextracted dye from *M. cochinchinensis* dyeing onto silk fibres indicated that the adsorption capacities are significantly affected by pH, the material to liquor ratio (MLR), the initial dye concentration, and temperature. The initial dye adsorption rates of alum-morin and alum-extracted dye on silk before equilibrium time was reached increased at higher dyeing temperature. The pseudo second-order kinetic model indicated for both alum-morin and alum-extracted dye dyeing of silk pH 4.0 with activation energies ( $E_a$ ) of 45.26 and 18.73 kJ/mol, respectively. The values of the enthalpy for the alum-morin and alum-extracted dye dyeing on silk at pH 4.0 were -31.29 and -14.16 kJ/mol, respectively. The experimental isotherm data were analyzed using the Langmuir and Freundlich equations. Additionally, adsorption-desorption of morin and alum-morin dyeing onto silk were investigated.

In addition, kinetics and isotherm of the adsorption of Al(III) from aqueous solutions onto chitosan was studied. It was found that the adsorption capacities depend on pH, initial concentration of Al(III) and temperature. The pseudo second-order kinetic model indicated for Al(III) adsorption on chitosan at pH 4.0 with activation energies ( $E_a$ ) of 56.4 kJ/mol. It is suggested that the overall rate of Al(III) ion adsorption is likely to be controlled by the chemical process. Equilibrium data fitted very well to the Langmuir model in the entire concentration range (5-40 mg/L). The enthalpy ( $\Delta H^{\circ}$ ) of the adsorption is -51.0 kJ/mol. The free energy ( $\Delta G^{\circ}$ ) and entropy ( $\Delta S^{\circ}$ ) of the adsorption of Al(III) onto chitosan were also investigated.

School of Chemistry	Student's Signature
Academic Year 2006	Advisor's Signature
	Co-advisor's Signature
	Co-advisor's Signature