บทคัดย่อ

ในงานนี้ ได้ศึกษาความเข้ากันได้ของพอลิเมอร์ผสมระหว่างพอลิไวนิลแอลกอฮอล์ (poly(vinyl alcohol), PVA) กับพอลิอะไครลิกแอซิด (poly(acrylic acid), PAA) ในอัตราส่วนต่าง ๆ โดยใช้เทคนิคการจำลองแบบโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์เทคนิคโมเลกูลาร์ไดนามิกส์ ผลการคำนวณค่า Flory-Huggins interaction parameter (χ) ยืนยันว่าพอลิเมอร์ผสมระหว่าง PVA กับ PAA ผสมเข้ากันได้ในทุกอัตราส่วน จากนั้นได้เตรียมตัวอย่างพอลิเมอร์ไฮโดรเจลผสมระหว่าง PVA กับ PAA ในรูปแผ่นฟิล์มที่อัตราส่วนต่าง ๆ ซึ่งก่อเจลโดยวิธีการให้ความร้อน ผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค DSC ยืนยันว่าพอลิเมอร์ผสมระหว่าง PVA กับ PAA ผสมเข้ากันได้ทุกอัตราส่วนที่ศึกษาในงานวิจัยนี้ ผลจาก FT-IR แสดงให้เห็นว่ามีอันตรกิริยาระหว่าง PVA กับ PAA เกิดขึ้น จากนั้นศึกษาการบวมตัวของพอลิเมอร์ไฮโดรเจล ที่ pH = 7.4 โดยพบว่าจะมีการบวมตัวลดลงเมื่อปริมาณ PVA เพิ่มขึ้น นอกจากนั้นยังได้ศึกษาโครงสร้างไฮโรเจลที่เกิดจากการจับกันระหว่างแคลเซี่ยมไอออน (Ca^{2+}) กับพอลิเมอร์ PVA และ PAA โดยใช้เทคนิคการจำลองโมเลกุลาร์ไดนามิคก์ และเทคนิค Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS) Spectroscopy ผลการศึกษาพบว่ามีเพียงอะตอมของออกซิเจนเท่านั้นที่ล้อมรอบแคลเซี่ยมไอออน (Ca^{2+}) ของการล้อมรอบชั้นแรกสุด (first shell)

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

Abstract

In this work, the blend compatibility of poly(vinyl alcohol), PVA, with poly(acrylic acid), PAA, was studied over the wide range of compositions by Molecular Dynamic (MD) simulation. The Flory-Huggins interaction parameter (χ) of the blends computed using the atomistic simulation confirmed the blend compatibility for all compositions of PVA/PAA blend. The hydrogel films of PVA/PAA blend, with various compositions, were prepared by thermal treatment technique. DSC results were used to confirm the compatibility of PVA/PAA blends. FT-IR spectra were used to study the interaction between PVA and PAA. Swelling property of these polymer films at pH = 7.4 buffer solution was also studied. The swelling ratio was decreased with increasing PVA content. Molecular Dynamics simulation and the Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS) spectroscopy were employed to study polymer/ salt hydrogel for the atomistic solvation structure of calcium ion in poly(vinyl alcohol) and poly(acylic acid). The results suggest that only oxygen atoms can be located within the first shell of Ca^{2+} ion

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี