ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์ การศึกษาโครงสร้างผลึกและการดัดแปรด้วยพลาสมาของสารประกอบจำลองไหม บอมบิกซ์ มอริ

ผู้เขียน นางสาววลีพรรณ แสงประเสริฐ

ปริญญา วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (เคมี)

คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ผศ.ดร.ปิยรัตน์ นิมมานพิภักดิ์ ประธานกรรมการ

รศ.ดร. ธีรวรรณ บุญวรรณ กรรมการ

ดร.วรรณจันทร์ แสงหิรัญ ลี กรรมการ

บทคัดย่อ

พลาสมาความดันต่ำได้ถูกนำมาใช้ในการปรับปรุงคุณสมบัติการไม่ชอบน้ำของไหมไทย ด้วยการศึกษาปฏิกิริยาที่เป็นไปได้ของสารประกอบจำลองไกลซีน-อะลานีน (GA) และอะลานีน-ไกลซีน(AG) ซึ่งผลึกเดี่ยวของแบบจำลองอย่างง่ายของไหมบอมบิกซ์ มอริ เตรียมได้ด้วยการใช้เทคนิคการระเหยตัวทำละลาย ศึกษาลักษณะพิเศษของผลึกที่ได้ด้วยกล้องจุลทรรศน์แบบโพลาไรซ์และเทคนิคเอกซเรย์ดิฟแฟรกชัน กลุ่มที่ว่างของ $P2_12_12_1$ สร้างขึ้นมาสำหรับ AG และ $P2_1$ สำหรับ GA ซึ่งโครงสร้างผลึกที่ได้จากการทดลองนี้ถูกนำมาใช้เป็นโครงสร้างเริ่มต้นสำหรับ การจำลองพลวัติเชิงโมเลกุล มอนติ คาร์โล และการคำนวณทางควอนตัมโดยใช้ทฤษฎี ฟังชันความหนาแน่น ที่ระดับ BHandHLYP นำมาใช้หากลไกที่เป็นไปได้ของไฮโดรเจน แอบสแตรกชัน ของฟลูออรีน แรดิคัล จากผลที่ได้พบว่าอะตอมไฮโดรเจนของสารประกอบจำลองไหมถูกดึงออก ณ ตำแหน่งหมู่เมธิล ในเรสิดิลของอะลานีน

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

Thesis Title Crystallographic Structural Studies and Plasma Modification of *Bombyx mori* Silk Model Compounds

Author Ms.Waleepan Sangprasert

Degree Master of Science (Chemistry)

Thesis Advisory Committee Asst.Prof.Dr. Piyarat Nimmanpipug Chairperson

Assoc.Prof.Dr.Dheerawan Boonyawan Member

Dr.Vannajan Sanghiran Lee Member

ABSTRACT

The low pressure plasma has been applied to improve hydrophobicity of Thai Silk. In this study, possible reactions were investigated through its model compounds i.e. Glycine-Alanine (GA) and Alanine-Glycine (AG). Single crystals of simplified model compounds of *Bombyx mori* silk were prepared using solvent evaporation method. The obtained crystals were characterized by polarizing microscopy and X-ray diffraction technique. The space group of $P2_12_12_1$ and $P2_1$ were found for AG and GA respectively. The experimentally obtained structures were used for calculation as initial structures. Molecular dynamic, Monte Carlo simulations and quantum calculation using density functional theory at BHandHLYP level were utilized to investigate possible hydrogen abstraction mechanisms of fluorine radical. The results indicate that hydrogen atom of silk model compounds mostly abstracted at methyl group of alanine residue.

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved