



โครงการการเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์

เรื่อง

การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลของการดูดซับสารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซัคซิเนตบนท่อนาโนคาร์บอน

Molecular dynamics simulation for adsorption of sodium dioctyl sulfosuccinate surfactants on carbon nanotubes

โดย

นางสาวกิตติกา จิตรเอื้ออารีย์กุล รหัสนิสิต 5832906023

นางสาวพิชชาภา อุษามาลัยเวท รหัสนิสิต 5832948423

อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการ

อาจารย์ ดร. มนัสวี สุทธิพงษ์

โครงการการเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์ ปีการศึกษา 2561

ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของโครงการทางวิชาการที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR)

เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของโครงการทางวิชาการที่ส่งผ่านทางคณะที่สังกัด

The abstract and full text of senior projects in Chulalongkorn University Intellectual Repository(CUIR)
are the senior project authors' files submitted through the faculty.

การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลของการดูดซับสารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซักซิเนต
บนท่อนาโนคาร์บอน

นางสาวกิตาการ จิตรเอื้ออารีย์กุล
นางสาวพิชชาภา อุษามาลย์เวท

โครงการวิจัยนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2561

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Molecular dynamics simulation for adsorption of sodium dioctyl
sulfosuccinate surfactants on carbon nanotubes

Kitakarn Jitauaretikun

Phitchapa Ausamanwet

A Senior Project Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for
The Degree of Bachelor of Science Program in Chemical Technology
Department

Faculty of Science Chulalongkorn University

Academic Year 2018

Copyright of Chulalongkorn University

ชื่อโครงการ การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลของการดูดซับสารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟ-ซัคซิเนตบนท่อนาโนคาร์บอน

ชื่อนิติผู้ทำโครงการ นางสาวกิตติกา จิตรเอื้ออารีย์กุล 5832906023

นางสาวพิชชาภา อุษามาลย์เวท 5832948423

อาจารย์ที่ปรึกษา อ.ดร.มนัสวี สุทธิพงษ์

ภาควิชา เคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ปีการศึกษา 2561

บทคัดย่อ

การอัดสารลดแรงตึงผิว (surfactant flood) เป็นวิธีที่นิยมใช้กันทั่วไปในการเพิ่มปริมาณการผลิตน้ำมันดิบ โดยสารลดแรงตึงผิวจะช่วยลดแรงเกาะหรือแรงตึงผิว (surfactant tension) ระหว่างน้ำมันกับน้ำ รวมทั้งเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติความเปียก (wettability) ของหินกักเก็บทำให้สามารถผลิตน้ำมันในปริมาณที่มากขึ้น ทั้งนี้ปัญหาที่สำคัญของวิธีนี้คือสารลดแรงตึงผิวจะดูดซับบนพื้นผิวของชั้นหินเนื่องจากแรงดึงดูดระหว่างส่วนหัวที่มีขั้วของสารลดแรงตึงผิวกับพื้นผิวหิน ทำให้เกิดความไม่มีประสิทธิภาพในเชิงเศรษฐศาสตร์ ปัจจุบันมีการพัฒนาเทคนิคและเทคโนโลยีต่าง ๆ เพื่อลดการดูดซับสารลดแรงตึงผิวบนพื้นผิวหิน เช่น การใช้อนุภาคนาโนคาร์บอนเป็นตัวนำพาสารลดแรงตึงผิวไปยังแหล่งน้ำมัน ส่วนที่ไม่มีขั้วของสารลดแรงตึงผิวจะดูดซับบนอนุภาคนาโนคาร์บอนด้วยแรงไฮโดรโฟบิก (hydrophobic interaction) งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาพฤติกรรมของการดูดซับของสารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซัคซิเนต (sodium dioctyl sulfosuccinate หรือ Aerosol OT, AOT) บนท่อนาโนคาร์บอน (carbon nanotube) โดยใช้วิธีการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล (Molecular Dynamics, MD) โดยศึกษาท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6), (12,12) และ (20,20) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำและสูง ผลการจำลองพบว่าสารลดแรงตึงผิวปกคลุมท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) เป็นแบบชั้นเดียว (monolayer) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำและสูง ในขณะที่ท่อนาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และ (20,20) จะเป็นแบบหลายชั้น (multilayer) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง พลังงานของระบบมีแนวโน้มสูงขึ้นตามขนาดของท่อนาโนคาร์บอนและจำนวนของสารลดแรงตึงผิว จากผลการจำลองแสดงให้เห็นว่าสารลดแรงตึงผิว AOT สามารถดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนได้และสามารถใช้เป็นตัวเลือกในศึกษาและพัฒนาการประยุกต์ใช้ในการเพิ่มการผลิตน้ำมัน (enhanced oil recovery)

คำสำคัญ: การดูดซับ, สารลดแรงตึงผิว, ท่อนาโนคาร์บอน, พลวัตเชิงโมเลกุล

.....
 (นางสาวกิตติกา จิตรเอื้ออารีย์กุล) (นางสาวพิชชาภา อุษามาลย์เวท)

ภาควิชา เคมีเทคนิค

สาขาวิชา เคมีวิศวกรรม

.....
 (อ.ดร. มนัสวี สุทธิพงษ์)

Title Molecular dynamics simulation for adsorption of sodium dioctyl sulfosuccinate surfactants on carbon nanotubes

Student name Kitakarn Jitauaretikun 5832906023
Phitchapa Ausamanwet 5832948423

Advisor Dr. Manaswee Suttipong

**Department of Chemical Technology, Faculty of Science, Chulalongkorn University,
Academic Year 2018**

ABSTRACT

Surfactant flooding is a common technique used in enhanced oil recovery (EOR). Surfactants lower surface tension between water and oil and change wettability on a reservoir trap, thus increasing the amount of oil produced. However, in the flooding process, surfactants adsorb onto the rock surfaces leading to the loss of surfactants and economic inefficiencies. Recently, technique of conveying surfactants using carbonaceous nanoparticles such as carbon nanotubes (CNTs), fullerene and carbon blacks (CBs) has been developed to decrease the surfactant adsorption in which the surfactant tails adsorb on the nanoparticles via hydrophobic interaction. The present work aims to investigate the adsorption behavior of sodium dioctyl sulfosuccinate (Aerosol OT, AOT) surfactants on (CNTs) via Molecular Dynamics (MD) simulation at low and high surface coverages. The results show that (6,6) CNT is covered by a monolayer of AOT at high surface coverage likewise (6,6), (12,12), and (20,20) CNTs at low surface coverage. In case of AOT adsorbed on (12,12) and (20,20) CNTs at high surface coverage, the formation of micelles is found next to the nanotubes. The total energy depends on CNTs size and the number of surfactants adsorbed. AOT would be an appropriate surfactant used in surfactant flooding.

Keywords: Adsorption, Surfactant, Carbon nanotubes, Molecular Dynamics

.....
.....

(Kitakarn Jitauarekun)

(Phitchapa Ausamanwet)

Department of Chemical Technology

Major: Chemical Engineering

.....
.....

(Dr. Manaswee Suttipong)

กิตติกรรมประกาศ

โครงการวิจัยนี้เป็นส่วนหนึ่งของการเรียนการสอนในวิชา 2306499 SENIOR PROJECT ระดับปริญญาตรีเพื่อสร้างเสริมประสบการณ์ประจำปีการศึกษา 2561 ของภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย การดำเนินโครงการงานวิจัยนี้สามารถสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดีด้วยความอนุเคราะห์จากบุคคลหลายท่าน

ท่านแรกและผู้จัดทำขอขอบพระคุณคือ อาจารย์ ดร. มนัสวี สุทธิพงษ์ อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการวิจัย ที่คอยให้ความรู้ คำแนะนำ และแก้ไขข้อบกพร่องต่าง ๆ ด้วยความเอาใจใส่ทุกขั้นตอน เพื่อให้การทำวิจัยฉบับนี้ สมบูรณ์

ทางผู้จัดทำต้องขอขอบพระคุณนายณัฐพงษ์ ธนธนานนท์ และนางสาววิลาสินี หีบนาค ที่คอยให้ความช่วยเหลือในการให้คำแนะนำสำหรับการทำงาน

นอกจากนี้ผู้จัดทำขอขอบพระคุณ คุณขจรศักดิ์ ปิยักร ที่ให้ความช่วยเหลือในการใช้งานระบบคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูง (High Performance Computer, HPC)

และศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (National Electronics and Computer Technology Center, NECTEC) ที่ได้ให้ความอนุเคราะห์ชั่วโมงในการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูง

สุดท้ายนี้ ขอกราบขอบพระคุณบิดามารดาและครอบครัว และขอขอบคุณเพื่อน ๆ ที่เป็นกำลังใจและให้ความช่วยเหลือในเรื่องการเรียนตลอดมา

คณะผู้จัดทำ

สารบัญ

เรื่อง	หน้า
บทคัดย่อ	ก
ABSTRACT	ข
กิตติกรรมประกาศ	ค
สารบัญ	ง
สารบัญรูปภาพ	ฉ
สารบัญตาราง	ช
สารบัญแผนภูมิ	ซ
บทที่ 1	1
1.1 ที่มา และความสำคัญของโครงการ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์	2
1.3 ขอบเขตการศึกษา	3
1.4 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย	3
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	3
บทที่ 2	5
2.1 การเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบ	5
2.2 การอัดสารลดแรงตึงผิว (Surfactant flood)	7
2.3 สารลดแรงตึงผิว (Surfactants).....	8
2.4 สารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซักซิเนต (Sodium Dioctyl Sulfosuccinate, AOT) 10	10
2.5 ท่อนาโนคาร์บอน (Carbon nanotubes)	10
2.6 การดูดซับ (Adsorption)	12
2.7 พลวัตเชิงโมเลกุล (Molecular dynamics)	13
2.8 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	15

บทที่ 3.....	19
3.1 โปรแกรมที่ใช้ในการดำเนินงานวิจัย	19
3.2 แพคเกจซอฟต์แวร์.....	19
3.3 แบบจำลอง.....	20
3.4 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย	21
บทที่ 4.....	25
4.1 แบบจำลอง (Snapshot)	25
4.2 ความหนาแน่น 2 มิติ (2D density).....	29
4.3 รูปแบบความหนาแน่น (Density profile)	32
4.4 พลังงานรวมของระบบ (Total energy).....	36
บทที่ 5.....	38
5.1 สรุปผลการทดลอง	38
5.2 ข้อเสนอแนะ	38
ภาคผนวก	40
1 ตัวอย่างการคำนวณหาเส้นผ่านศูนย์กลางท่อนาโนคาร์บอน.....	40
2 ตัวอย่างการคำนวณหาพื้นที่ผิวท่อนาโนคาร์บอน	40
3 ตัวอย่างการคำนวณหาจำนวนสารลดแรงตึงผิว AOT.....	41
4 ตัวอย่างทำรูปแสดงแบบจำลอง.....	41
5 ตัวอย่างคำสั่งที่ใช้ทำความหนาแน่น 2 มิติ.....	41
6 ตัวอย่างคำสั่งที่ใช้ทำรูปแบบความหนาแน่น	42
7 ตัวอย่างคำสั่งที่ใช้ทำรูปแบบพลังงาน.....	48
เอกสารอ้างอิง	50

สารบัญรูปภาพ

เรื่อง	หน้า
รูปที่ 2.1 ประเภทของสารลดแรงตึงผิว.....	9
รูปที่ 2.2 สารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซึกซิเนต.....	10
รูปที่ 2.3 ประเภทของท่อนานาโนคาร์บอน.....	11
รูปที่ 2.4 การดูดซับของสารลดแรงตึงผิวบนชั้นหิน.....	12
รูปที่ 3.1 แสดงตัวอย่างแบบจำลอง.....	20
รูปที่ 3.2 แสดงการแบ่งช่วงในการคำนวณรูปแบบความหนาแน่น.....	23
รูปที่ 4.1 แสดงผลการจำลองการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนานาโนคาร์บอน ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำ.....	25
รูปที่ 4.2 แสดงผลการจำลองการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนานาโนคาร์บอน ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง.....	26
รูปที่ 4.3 แสดงความหนาแน่นของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนานาโนคาร์บอน ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำในรูปแบบ 2 มิติ.....	29
รูปที่ 4.4 แสดงความหนาแน่นของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนานาโนคาร์บอน ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงในรูปแบบ 2 มิติ.....	30
รูปที่ 4.5 แสดงรูปแบบความหนาแน่นของการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนานาโนคาร์บอน.....	32
รูปที่ 1 แสดงตัวอย่างทำรูปแสดงแบบจำลอง.....	41
รูปที่ 2 แสดงตัวอย่างทำความหนาแน่น 2 มิติ.....	42
รูปที่ 3 แสดงตัวอย่างการแปลงไฟล์ .xpm เป็น .eps.....	42
รูปที่ 4 แสดงตัวอย่างการแปลงไฟล์ .xtc เป็น .data.....	43
รูปที่ 5 แสดงตัวอย่างใช้คำสั่ง gmx energy.....	49
รูปที่ 6 แสดงตัวอย่างเลือกรูปแบบพลังงาน.....	49

สารบัญตาราง

เรื่อง	หน้า
ตารางที่ 3.1 แสดงเส้นผ่านศูนย์กลางและพื้นที่ผิวของท่อนาโนคาร์บอน และจำนวนสารลดแรงตึงผิว AOT ที่ค่าการปกคลุมพื้นที่ผิว.....	20
ตารางที่ 3.2 แสดงสูตรระบบแบบจำลอง.....	21

สารบัญแผนภูมิ

เรื่อง

หน้า

แผนภูมิที่ 4.1 แสดงพลังงานรวมที่เกิดจากการดูดซับในระบบที่สภาวะสมดุล.....	36
--	----

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มา และความสำคัญของโครงการ

น้ำมันเป็นพลังงานเชื้อเพลิงที่สำคัญและยังคงใช้เป็นแหล่งพลังงานหลักทั้งในภาคอุตสาหกรรมและการคมนาคม น้ำมันที่นำมาใช้นั้นมาจากการกลั่นน้ำมันดิบที่ได้จากหลุมปิโตรเลียม การขุดเจาะน้ำมันดิบจากหลุมปิโตรเลียมประกอบด้วยหลายกระบวนการ หนึ่งในกระบวนการที่สำคัญคือการใช้การเพิ่มการผลิตน้ำมัน (enhanced oil recovery, EOR) ซึ่งช่วยเพิ่มปริมาณการผลิตน้ำมันขึ้นมาจากหลุมปิโตรเลียมหลังจากที่ได้มีการผลิตตามธรรมชาติแล้ว

การเพิ่มการผลิตน้ำมันหรือการผลิตขั้นตติยภูมิ (tertiary recovery) เป็นเทคนิคการผลิตน้ำมันดิบที่สำคัญอย่างหนึ่ง ซึ่งสามารถผลิตน้ำมันดิบได้ถึงร้อยละ 30 – 60 การเพิ่มการผลิตน้ำมันนั้นประกอบด้วยกระบวนการหลัก 3 กระบวนการ ได้แก่ การใช้สารเคมี การใช้ความร้อน และการรวมเป็นเนื้อเดียวกัน การใช้สารเคมี เช่น การอัดสารลดแรงตึงผิว (surfactant flood) เป็นวิธีที่นิยมใช้กันทั่วไปโดยสารลดแรงตึงผิวจะช่วยลดแรงเกาะหรือแรงตึงผิว (surfactant tension) ระหว่างน้ำมันกับน้ำ รวมทั้งเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติความเปียก (wettability) ของหินกักเก็บทำให้สามารถผลิตน้ำมันในปริมาณที่มากขึ้น ปัญหาที่สำคัญของวิธีนี้คือสารลดแรงตึงผิวสามารถที่จะดูดซับบนพื้นผิวของชั้นหินเนื่องจากแรงดึงดูดระหว่างส่วนหัวที่มีขั้วของสารลดแรงตึงผิวกับพื้นผิวหินด้วยแรงทางไฟฟ้าสถิต (electrostatic interaction) ทำให้เกิดความไม่มีประสิทธิภาพในเชิงเศรษฐศาสตร์ ปัจจุบันมีการพัฒนาเทคนิคและเทคโนโลยีต่าง ๆ เพื่อลดการดูดซับสารลดแรงตึงผิวบนพื้นผิวหิน เช่น การใช้อนุภาคนาโนคาร์บอน (carbonaceous nanoparticles) เป็นตัวนำพาสารลดแรงตึงผิวไปยังแหล่งน้ำมัน ส่วนที่ไม่มีขั้วของสารลดแรงตึงผิวจะดูดซับบนอนุภาคนาโนคาร์บอนด้วยแรงไฮโดรโฟบิก (hydrophobic interaction) เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของการดูดกลั่น้ำมันดิบและแก้ปัญหาดังกล่าวให้ดียิ่งขึ้น

ตัวอย่างเช่น การทดลองฉีดสารลดแรงตึงผิวที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังหลายชั้น (multi-wall carbon nanotubes, MWNTs) และผงเขม่าดำ (carbon black) ลงในทรายออกตาวาที่มีชั้นน้ำมันอยู่ด้านล่าง พบว่าสารลดแรงตึงผิวสามารถไปถึงชั้นน้ำมันด้านล่างมากขึ้น แนวโน้มการดูดซับบนทรายออกตาวา (ชั้นหิน) ลดลงส่งผลให้สามารถดูดกลับน้ำมันได้มากขึ้น [1] อย่างไรก็ตามยังการทดลองดังกล่าวยังไม่สามารถสรุปได้ว่าพฤติกรรมการดูดซับของสารลดแรงตึงผิวบนอนุภาคนาโนคาร์บอนมีลักษณะเป็นอย่างไร

ดังนั้นงานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิวที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอน (carbon nanotube) ด้วยวิธีการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล (molecular Dynamics, MD) โดยใช้สารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซัคซิเนต (sodium dioctyl sulfosuccinate หรือ Aerosol OT, AOT) และท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังชั้นเดียว (single-wall carbon nanotubes, SWNTs) ขนาด (6,6), (12,12) และ (20,20) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำและสูง เพื่อพิจารณาผลประกอบไปด้วยแบบจำลอง ความหนาแน่น 2 มิติ รูปแบบความหนาแน่น และพลังงานรวมของระบบ โดยผลการทดลองที่ได้ทำให้เกิดความเข้าใจในระดับโมเลกุลของการดูดซับดูดซับสารลดแรงตึงบนท่อนาโนคาร์บอน รวมทั้งพัฒนาองค์ความรู้ในการเพิ่มการผลิตน้ำมัน

1.2 วัตถุประสงค์

1.2.1 เพื่อศึกษาพฤติกรรมของสารลดแรงตึง AOT ที่ผิวสัมผัสระหว่างน้ำกับท่อนาโนคาร์บอนโดยสร้างแบบจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล

1.2.2 เพื่อศึกษาตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่อพฤติกรรมการดูดซับของสารลดแรงตึงผิวบนท่อนาโนคาร์บอน ดังนี้

- 1) ขนาดของท่อนาโนคาร์บอน ได้แก่ (6,6), (12,12) และ (20,20)
- 2) ค่าการปกคลุมพื้นผิวของสารลดแรงตึงผิวบนท่อคาร์บอน ได้แก่ ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำ (0.65-0.66 nm²/headgroup) และค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง (0.33 nm²/headgroup)

1.3 ขอบเขตการศึกษา

งานวิจัยนี้ศึกษาสารลดแรงตึงผิว AOT ที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังชั้นเดียว โดยใช้ซอฟต์แวร์ GROMACS package, version 5.0.4 ในระบบที่จำนวน ปริมาตร และอุณหภูมิคงที่ (NVT system) อุณหภูมิที่ใช้ในการศึกษา 300 เคลวิน ขนาดแบบจำลอง $10 \times 10 \times 7.133$ ลูกบาศก์นาโนเมตร โดยทำการจำลอง 6 ระบบ แบ่งออกเป็นค่าการปกคลุมพื้นผิวต่ำและสูงของท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) (12,12) และ (20,20) ใช้เวลาในการประมวลผล 100 นาโนวินาที

1.4 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

- 1.4.1 ศึกษางานวิจัยและการใช้โปรแกรมที่เกี่ยวข้อง
- 1.4.2 ติดตั้งโปรแกรมสำหรับสร้างแบบจำลองโมเลกุล และโปรแกรมสำหรับการคำนวณที่เกี่ยวข้อง
- 1.4.3 เตรียมแบบจำลอง และข้อมูลส่วนที่ใช้จำลองพลวัตเชิงโมเลกุล
- 1.4.4 ดำเนินการประมวลผลข้อมูล
- 1.4.5 ตรวจสอบข้อมูลที่ได้จากการประมวลผล และคำนวณคุณสมบัติที่เกี่ยวข้อง
- 1.4.6 รวบรวมข้อมูล วิเคราะห์ และสรุปผลการทดลอง
- 1.4.7 เขียนรายงานฉบับสมบูรณ์

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

- 1.5.1 ทราบถึงพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอน
- 1.5.2 สามารถเปรียบเทียบพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิว AOT กับสารลดแรงตึงผิวชนิดอื่น เช่น สารลดแรงตึงผิวโซเดียมโดเดซิลซัลเฟต (sodium dodecyl sulfate, SDS) สารลดแรงตึงผิวโซเดียมโดเดซิลเบนซีนซัลโฟเนต (sodium dodecylbenzenesulfonate, SDBS)

1.5.3 เป็นแนวทางในการสร้างสารลดแรงตึงผิวที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอน เพื่อใช้ในกระบวนการเพิ่ม
การผลิตน้ำมัน

บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 การเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบ

ปัจจุบันได้มีการใช้เทคนิคความรู้ทางด้านวิศวกรรมปิโตรเลียมและการใช้อุปกรณ์เทคโนโลยีต่าง ๆ มากมาย เพื่อนำน้ำมันดิบจากหลุมปิโตรเลียมออกมาใช้ประโยชน์ให้ได้มากที่สุด การผลิตน้ำมันดิบจากใต้ดินด้วยแรงดันตามธรรมชาตินั้นสามารถผลิตได้เพียงปริมาณน้อย โดยทั่วไปสามารถผลิตได้เพียงร้อยละ 5-15 ของน้ำมันดิบใต้ดินทั้งหมดเท่านั้น บางแหล่งก็ไม่สามารถผลิตได้ด้วยแรงดันตามธรรมชาติ จึงทำให้มีการพัฒนาเทคนิคการผลิตน้ำมันดิบ ที่มีประสิทธิภาพมากกว่าการผลิตตามธรรมชาติเพียงลำพัง โดยธรรมชาติน้ำมันดิบจะถูกกักเก็บสะสมตัวอยู่ตามรูพรุนของชั้นหิน หรือตามรอยแตกของชั้นหิน ในการผลิตน้ำมันดิบจากหินกักเก็บจำเป็นต้องใช้พลังงานผลักดันน้ำมันดิบออกมานั้นคือความดันในชั้นหินกักเก็บทั้งแบบพลังงานตามธรรมชาติ และพลังงานจากภายนอก แต่อย่างไรก็ตาม ด้วยข้อจำกัดเรื่องคุณสมบัติของหินและของไหลตามธรรมชาติ เช่น แรงตึงผิว ความเปียก ความหนืด ฯลฯ จึงทำให้ยังมีน้ำมันดิบบางส่วนค้างอยู่ในรูพรุนของชั้นหิน [2]

การผลิตน้ำมันดิบสามารถแบ่งออกเป็น 3 ขั้นตอนคือ การผลิตขั้นปฐมภูมิ (primary recovery) การผลิตขั้นทุติยภูมิ (secondary recovery) และการผลิตขั้นตติยภูมิ (tertiary recovery หรือ enhanced oil recovery) ซึ่งมีต้นทุนการผลิตที่สูงขึ้นตามลำดับ

2.1.1 การผลิตขั้นปฐมภูมิ (primary recovery) คือ การผลิตที่ใช้พลังงานตามธรรมชาติที่มีอยู่ในแหล่งกักเก็บ ทำให้เกิดการไหลของน้ำมันดิบจากแหล่งกักเก็บเข้ามาในหลุมผลิต ขบวนการผลิตแบบนี้เปอร์เซ็นต์ของน้ำมันดิบที่ผลิตได้ (เมื่อเทียบกับน้ำมันทั้งหมดที่มีในแหล่งกักเก็บ) จะขึ้นอยู่กับคุณสมบัติของหินกักเก็บ คุณสมบัติของน้ำมันดิบ และชนิดของพลังงานธรรมชาติที่มีอยู่ในแหล่งกักเก็บ เปอร์เซ็นต์ของน้ำมันดิบ ที่ผลิตได้โดยกระบวนการผลิตขั้นปฐมภูมิสำหรับน้ำมันดิบชนิดหนักมาก (extra heavy

crude oil) ชนิดหนัก (heavy crude) ชนิดหนักปานกลาง (medium crude) และชนิดเบา (light crude) มีค่าประมาณ ร้อยละ 1-5, ร้อยละ 1-10, ร้อยละ 5-30 และร้อยละ 10-40 ตามลำดับ ช่วงของเปอร์เซ็นต์แสดงถึงกลไกการผลิตในแหล่งกักเก็บที่ต่างกัน

2.1.2 การผลิตขั้นทุติยภูมิ (secondary recovery) คือ การผลิตที่มีการอัดน้ำหรือก๊าซเข้าไปในแหล่งกักเก็บ เพื่อให้ น้ำหรือก๊าซนี้ไปแทนที่น้ำมันดิบ ไหลน้ำมันดิบมาเข้าหลุมผลิต น้ำหรือก๊าซที่เข้าไปแทนที่น้ำมันนี้ไม่สามารถแทนที่น้ำมันได้หมด จะมีน้ำมันเหลืออยู่ในแหล่งกักเก็บหลังจากการผลิตขั้นทุติยภูมิได้สิ้นสุดลง ในการผลิตขั้นทุติยภูมินี้เปอร์เซ็นต์ของน้ำมันดิบที่ผลิตขึ้นมาได้ (เมื่อเทียบกับปริมาณน้ำมันดิบที่มีทั้งหมด) สำหรับน้ำมันชนิดหนัก ชนิดหนักปานกลาง และชนิดเบา มีค่าประมาณ ร้อยละ 5-10, ร้อยละ 5-15 และร้อยละ 10-25 ตามลำดับ

2.1.3 การผลิตขั้นตติยภูมิ (tertiary recovery หรือ Enhanced Oil Recovery, EOR) แบ่งเป็น 3 ชนิด คือ ชนิดที่ใช้กระบวนการความร้อน (thermal process) ชนิดที่ใช้กระบวนการผสมตัว (miscible process) และชนิดที่ใช้กระบวนการทางเคมี (chemical process) โดยชนิดแรกส่วนมากใช้กับแหล่งกักเก็บน้ำมันดิบชนิดหนัก และสองชนิดหลังใช้กับแหล่งกักเก็บน้ำมันดิบชนิดเบาและชนิดปานกลางแต่เนื่องจากค่าใช้จ่ายสูงและผลการทดลองใช้จริงไม่ได้ผลเป็นที่น่าพอใจ การใช้การผลิตขั้นตติยภูมิจึงไม่แพร่หลาย [3]

- การใช้ความร้อน เป็นวิธีที่นิยมใช้กับแหล่งน้ำมันดิบหนักพิเศษ และแหล่งทรายน้ำมันที่น้ำมันดิบมีความหนืดสูงมากจนมีสถานะกึ่งของแข็ง ความร้อนจะช่วยลดความหนืดของน้ำมันดิบลง จนทำให้น้ำมันดิบในแหล่งดังกล่าวไหล และสามารถไหลได้เหมือนน้ำมันดิบเบา วิธีการที่นิยมใช้ก็คืออัดน้ำร้อนหรืออัดไอน้ำความดันสูงที่อุณหภูมิ 200-300 องศาเซลเซียส ลงไปในชั้นหินกักเก็บในแหล่งน้ำมันดิบดังกล่าว
- การรวมเป็นเนื้อเดียวกัน เช่น การอัดก๊าซหรือของไหลด้วยสัดส่วนและความดันที่เหมาะสม ต่อการรวมเป็นเนื้อเดียวกันกับน้ำมันดิบ สามารถลดหรือกำจัดแรงตึงผิวระหว่างก๊าซหรือของไหล ที่

อัดลงไปกับน้ำมันดิบในชั้นหินรวมเป็นเนื้อเดียวกันได้ คล้ายกับกระบวนการใช้สารลดแรงตึงผิวทำให้สามารถลดปริมาณน้ำมันดิบที่เหลือค้างในชั้นหินกักเก็บ และผลิตน้ำมันดิบออกมาได้มากขึ้น จะแตกต่างกับชั้นหุตุยภูมิที่ของไหลที่อัดลงไปไม่ได้รวมเป็นเนื้อเดียวกันกับน้ำมันดิบ

- การใช้สารเคมี ก็เป็นอีกวิธีที่นิยมใช้กันทั่วไป เป็นการใส่สารเคมีปริมาณหนึ่งผสมกับน้ำที่ใช้อัดลงไป ในกระบวนการอัดน้ำหรืออัดก๊าซ เพื่อช่วยให้มีประสิทธิภาพในการผลิตมากขึ้น เช่น การอัดพอลิเมอร์ (Polymer flood) เพิ่มความหนืดของน้ำที่เราอัดลงไป แทนที่น้ำมันดิบในชั้นหินกักเก็บ ทำให้สามารถกวาดน้ำมันดิบได้ดีขึ้น หรือการอัดสารลดแรงตึงผิว (Surfactant flood) เพื่อลดแรงตึงผิวระหว่างของไหลที่อัดลงไปกับน้ำมันดิบในชั้นหินกักเก็บทำให้มีน้ำมันดิบเหลือค้างในชั้นหินกักเก็บน้อยลง และเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติความเปียกของหินอีกด้วย [3]

2.2 การอัดสารลดแรงตึงผิว (Surfactant flood)

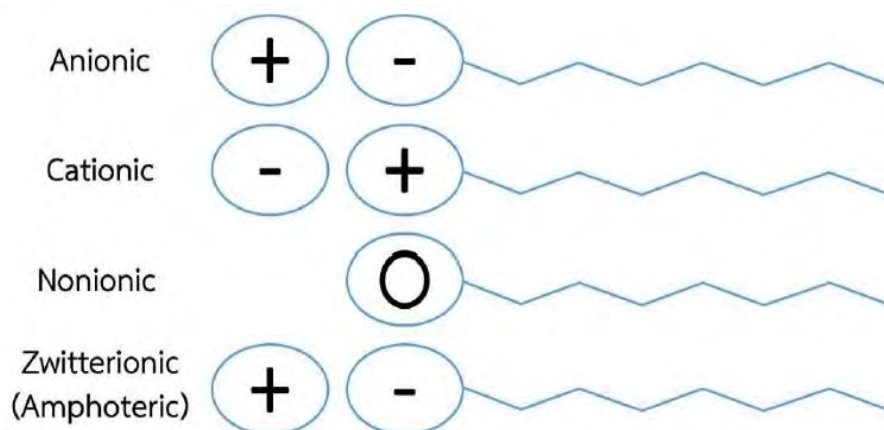
การอัดสารลดแรงตึงผิวเป็นหนึ่งในวิธีการเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบโดยการฉีดสารลดแรงตึงผิวกับน้ำลงไป ในหลุมปิโตรเลียม สารลดแรงตึงผิวสามารถลดแรงตึงผิว (interfacial tension, IFT) ระหว่างน้ำกับน้ำมัน ทำให้น้ำมันที่ยังติดอยู่ระหว่างชั้นหินในหลุมปิโตรเลียม สามารถรวมกับน้ำและไหลออกมาในรูปของอิมัลชันได้ เป็นการเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบที่มีประสิทธิภาพมากกว่าการผลิตน้ำมันดิบชั้นปฐมภูมิและชั้นหุตุยภูมิ [4] แม้ว่าวิธีนี้จะเป็นที่นิยมใช้กันอย่างแพร่หลาย แต่การฉีดสารลดแรงตึงผิวมีค่าใช้จ่ายที่สูง ส่งผลให้เกิดความไม่มีประสิทธิภาพในทางเศรษฐศาสตร์ อย่างไรก็ตามวิธีการฉีดสารลดแรงตึงผิวไม่เหมาะสมกับสถานะของหลุมปิโตรเลียมบางสถานะ เช่น สถานะของหลุมปิโตรเลียมที่มีอุณหภูมิและความลึกมากกว่า 200 องศาฟาเรนไฮต์ และ 9,000 ฟุต ตามลำดับ สำหรับแหล่งกักเก็บหรือหลุมปิโตรเลียมที่เป็นแนวหินทรายควรเลือกใช้สารลดแรงตึงผิวประจุลบ เพื่อลดการสูญเสียสารลดแรงตึงผิวไปในชั้นหินระหว่างทางก่อนถึงหลุมปิโตรเลียม นอกจากนี้การอัดสารลดแรงตึงผิวเหมาะสำหรับใช้เพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบชนิดเบาและชนิดหนักปานกลาง ดังนั้นค่าแรงโน้มถ่วงและความหนืดของน้ำมันจึงจำกัดอยู่ในช่วงที่มากกว่า 20 °API และต่ำกว่า 35 cP ตามลำดับ และมี

เกณฑ์อื่น ๆ ที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของการอัดสารลดแรงตึงผิว เช่น ลักษณะของดินหรือชั้นหินในหลุมปิโตรเลียม, สารประกอบคลอไรด์ในน้ำที่มีความเข้มข้นมากกว่า 20,000 ppm และปริมาณแคลเซียมไอออน (Ca^{2+}) กับแมกนีเซียมไอออน (Mg^{2+}) ที่สูงกว่า 500 ppm [5]

2.3 สารลดแรงตึงผิว (Surfactants)

สารลดแรงตึงผิวเป็นสารพวกโมเลกุลแอมฟิฟิลิก (amphiphilic molecules) ที่มีลักษณะโมเลกุลประกอบด้วย 2 ส่วน คือ ส่วนที่ไม่มีขั้ว ซึ่งไม่รวมกับน้ำแต่สามารถละลายกับน้ำมันได้ดี โดยเป็นสายโซ่ของไฮโดรคาร์บอน เรียกว่า ไฮโดรโฟบิก (hydrophobic) และส่วนที่มีขั้วสามารถรวมกับน้ำได้ดี ซึ่งอาจมีประจุหรือไม่มีก็ได้ เรียกว่า ไฮโดรฟิลิก (hydrophilic) สารลดแรงตึงผิวเป็นสารประกอบที่ทำให้แรงตึงผิวของของเหลวลดลง ช่วยให้การกระจายตัวของของเหลวดีขึ้น และช่วยลดแรงตึงผิวระหว่างของเหลวสองชนิดหรือระหว่างของเหลวกับของแข็ง [6]

สารลดแรงตึงผิวสามารถแบ่งเป็น 4 ชนิดได้ตามสภาพขั้วของโมเลกุล ได้แก่ สารลดแรงตึงผิวประจุบวก (cationic surfactant) เช่น Cetyltrimethyl ammonium bromide (CTAB) สารลดแรงตึงผิวประจุลบ (anionic surfactant) เช่น Sodium dodecyl sulphate (SDS) สารลดแรงตึงผิวประจุขั้วคู่ (zwitterionic surfactant) เช่น β -N-Alkylaminopropionic acids และสารลดแรงตึงผิวไม่มีประจุ (nonionic surfactant) เช่น Polyoxyethylene alcohol [7]

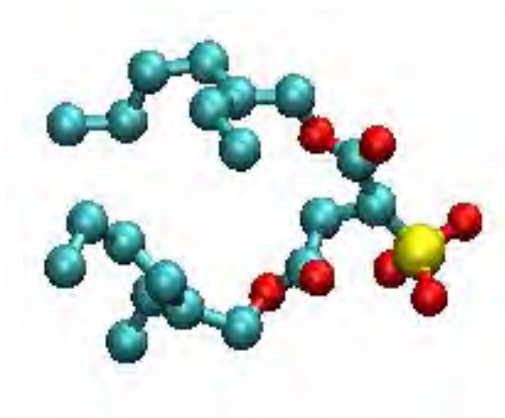


รูปที่ 2.1 แสดงประเภทของสารลดแรงตึงผิว [8]

สารลดแรงตึงผิวสามารถนำไปใช้ประโยชน์ได้อย่างหลากหลาย เช่น สารลดแรงตึงผิวเป็นส่วนประกอบในผลิตภัณฑ์ทำความสะอาด เช่น ผงซักฟอก สบู่ ยาสีฟัน ยาสระผม ครีมนวดผม และผลิตภัณฑ์ที่มีฟอง เป็นต้น สารลดแรงตึงผิวเป็นส่วนประกอบในเครื่องสำอางและครีมกันแดด สารลดแรงตึงผิวถูกนำมาใช้ในการทางการแพทย์ ผลิตภัณฑ์ สารลดแรงตึงผิวถูกนำมาใช้ในอุตสาหกรรม เช่น กระบวนการย้อมผ้า การเคลือบสีไม้หรือโลหะ การผลิตพลาสติก การทำหนังสือพิมพ์ การผลิตเนยเทียม เค้กและไอศกรีม เป็นต้น สารลดแรงตึงผิวถูกนำมาใช้ในการแก้ไขปัญหาสิ่งแวดล้อม เช่น บำบัดน้ำเสีย กำจัดมลพิษทางดิน ดูดซับของเสีย เป็นต้น สารลดแรงตึงผิวถูกนำมาใช้ในกระบวนการสกัดแยก เช่น การสกัดแยกแร่ การแยกน้ำมัน ออกจากน้ำ เป็นต้น

นอกเหนือจากนี้ สารลดแรงตึงผิวสามารถนำมาใช้ได้ในการกระบวนการ EOR โดยการฉีดอัดสารลดแรงตึงผิวเพื่อลดแรงตึงระหว่างผิวของน้ำและน้ำมันให้เข้าสู่สถานะแรงตึงผิวต่ำยิ่งยวด ที่สภาวะดังกล่าวน้ำมันสามารถไหลไปพร้อมกับน้ำในรูปแบบของอิมัลชัน ทำให้ผลิตน้ำมันได้ในปริมาณที่มากขึ้น [1]

2.4 สารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซัคซิเนต (Sodium Dioctyl Sulfosuccinate, AOT)



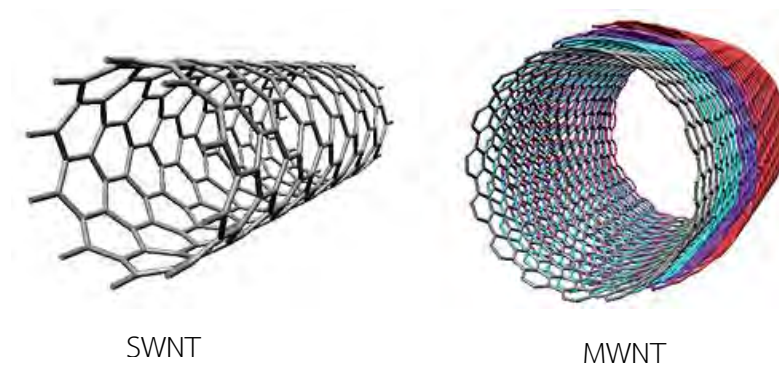
รูปที่ 2.2 แสดงสารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซัคซิเนต (AOT)

สารลดแรงตึงผิวโซเดียมไดออกทิลซัลโฟซัคซิเนต มีอีกชื่อหนึ่งว่า ซัลโฟบิวเทนไดโอกซิกแอซิด 1,4-บิส (2-เอทิลเฮกซิล) เอสเตอร์โซเดียมซอลต์ (sulphobutane dioic acid 1,4-bis (2-ethylhexyl) ester sodium salt) [9] จัดเป็นสารลดแรงตึงผิวประจุลบ (anionic surfactant) ประกอบด้วยส่วนหัวและหาง โดยหัวของสารลดแรงตึงผิวคือหมู่ซัลเฟต (SO_4) ส่วนหางเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนทั้ง 2 ทาง โครงสร้างโมเลกุลมีความกะทัดรัดสูง

2.5 ท่อนาโนคาร์บอน (Carbon nanotubes)

ท่อนาโนคาร์บอนคือวัสดุสังเคราะห์โครงสร้างนาโนรูปทรงกระบอกมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางอยู่ในระดับนาโนเมตร เมื่อเปรียบเทียบกับเส้นผมของมนุษย์พบว่ามีความเล็กกว่าถึง 50,000 เท่า ลักษณะการจัดเรียงอะตอมของคาร์บอนเป็นแบบแผ่นกราฟีนเชื่อมโยงเป็นตาข่ายที่มีรูรูปหกเหลี่ยมและม้วนตัวเข้าหากันเป็นทรงกระบอก ลักษณะทางโครงสร้างของแผ่นกราฟีนเกิดจากการยึดเกาะกันของอะตอมคาร์บอน ทั้งนี้ อิเล็กตรอนสามารถเกิดการโคจรผสมกันของอิเล็กตรอนในชั้น s และชั้น p เกิด sp^2 hybridization โดยมี 3

อิเล็กตรอนใน sp^2 โคจรอยู่ในระนาบโครงสร้างของคาร์บอน มีพันธะแบบซิกมา ($\sigma - bonds$) และมี 1 อิเล็กตรอนในวงโคจร $2p_z$ ในพันธะแบบพาย ($\pi - bonds$) [10] ท่อนาโนคาร์บอนเป็นโมเลกุลไม่มีขั้ว สามารถดึงดูดกันด้วยแรงแวนเดอร์วาลส์ (Van der Waals Forces) โดยสามารถสังเคราะห์โครงสร้างของท่อให้มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางอยู่ในช่วง 0.4–4.0 นาโนเมตร และมีความยาวได้ถึง 10 ไมโครเมตร การสังเคราะห์อาจแบ่งได้ออกเป็น 2 ลักษณะ คือ ท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังชั้นเดียว (single-wall carbon nanotubes, SWNTs) และท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังหลายชั้น (multi-wall carbon nanotubes, MWNTs) [11]



รูปที่ 2.3 ประเภทของท่อนาโนคาร์บอน [11]

ด้วยลักษณะโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนและพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอนที่มีความยาวเพียง 0.14 นาโนเมตร ทำให้ท่อนาโนคาร์บอนมีคุณสมบัติที่พิเศษที่โดดเด่นออกมามากมาย เช่น มีความแข็งแรงที่มากกว่าเพชรและแกรไฟต์ มีความแข็งแรงมากกว่าเหล็กกล้าถึง 10–100 เท่า รวมทั้งมีความยืดหยุ่นสูงถึง 1 TPa ในขณะที่เพชรมีค่าความยืดหยุ่นเป็น 1.2 TPa จึงพบว่าทั้งสองมีค่าต่างกันเล็กน้อย นอกจากสมบัติทางกลที่ดีแล้วท่อนาโนคาร์บอน สามารถทนความร้อนได้สูงถึง 2,800 °C ที่สภาวะสูญญากาศ และมีความสามารถในการนำความร้อนได้ดีกว่าเพชร อีกทั้งมีความสามารถในการนำไฟฟ้าที่ดี มีค่าความจุการนำไฟฟ้าสูงกว่าทองแดงถึง 1,000

เท่า สมบัติที่ดีเหล่านี้ทำให้ท่อนาโนคาร์บอนได้รับความนิยมในวงกว้างทั้งในด้านอุตสาหกรรม สุขภาพ และพลังงาน

ด้วยคุณสมบัติของท่อนาโนคาร์บอนที่มีพื้นที่ผิวสูงและมีแรงดึงดูดกับสารลดแรงตึงผิว ทำให้ท่อนาโนคาร์บอนเป็นวัสดุที่น่าสนใจ งานวิจัยนี้ใช้ท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังชั้นเดียวเป็นวัสดุสำหรับดูดซับสารลดแรงตึงผิว AOT

2.6 การดูดซับ (Adsorption)

การดูดซับเป็นกระบวนการที่เกี่ยวข้องกับการสะสมตัวของสารหรือความเข้มข้นของสารที่บริเวณพื้นผิวหรือระหว่างผิวหน้า (interface) กระบวนการนี้สามารถเกิดที่บริเวณผิวสัมผัสระหว่าง 2 ภาวะใดๆ เช่น ของเหลวกับของเหลว ก๊าซกับของเหลว ก๊าซกับของแข็ง หรือของเหลวกับของแข็ง โดยโมเลกุลหรือคอลลอยด์ที่ถูกดูดซับเรียกว่า สารถูกดูดซับ (adsorbate) ส่วนสารที่ทำหน้าที่ดูดซับเรียกว่า สารดูดซับ (adsorbent) ชนิดของกระบวนการดูดซับจะพิจารณาจากแรงยึดเหนี่ยวระหว่างโมเลกุลที่ถูกดูดซับกับผิวของสารดูดซับ ถ้าแรงยึดเหนี่ยวเป็นแรงแวนเดอร์วาลส์ (Van der Waals forces) จะเป็นการดูดซับทางกายภาพ (physical adsorption) แต่ถ้าแรงยึดเหนี่ยวทำให้เกิดพันธะเคมีระหว่างโมเลกุลที่ถูกดูดซับกับผิวของสารดูดซับจะเรียกว่า การดูดซับทางเคมี (chemical adsorption) [12]



รูปที่ 2.4 การดูดซับของสารลดแรงตึงผิวบนชั้นหิน [13]

สำหรับวิธีการอัดสารลดแรงตึงผิวเพื่อเพิ่มผลผลิตน้ำมัน สารลดแรงตึงผิวมีแนวโน้มถูกดูดซับบนชั้นหินระหว่างทางก่อนไปถึงหลุมปิโตรเลียม ทำให้มีสารลดแรงตึงผิวลงไปในหลุมปิโตรเลียมน้อยและดูกลับน้ำมันดิบได้น้อย ส่งผลให้ไม่มีประสิทธิภาพทางเศรษฐศาสตร์ เพื่อแก้ปัญหาเหล่านี้นักวิทยาศาสตร์ได้ทดลองการทดลองฉีดสารลดแรงตึงผิวที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังหลายชั้นลงไปในระบบจำลองหลุมปิโตรเลียมที่มีทรายออกตาวาและน้ำมันไอโซพาร์ พบว่าสารลดแรงตึงผิวมีแนวโน้มถูกดูดซับบนทรายออกตาวาลดลง ทำให้ลดการสูญเสียสารลดแรงตึงผิวที่ถูกดูดซับบนชั้นหินก่อนไปถึงหลุมปิโตรเลียมได้ [1]

2.7 พลวัตเชิงโมเลกุล (Molecular dynamics) [14]

2.7.1 สมการการเคลื่อนที่และพลังงานศักย์ (Equations of motion and potential energy)

พลวัตเชิงโมเลกุลเป็นเทคนิคที่ได้รับความนิยมอย่างแพร่หลายในการศึกษาโครงสร้าง (structure), พลวัต (dynamics) และเทอร์โมไดนามิกส์ (thermodynamics) ของระบบในระดับโมเลกุล แนวคิดพื้นฐานของวิธีนี้อาศัยการแก้สมการการเคลื่อนที่ของอะตอมที่มีปฏิสัมพันธ์กันและสามารถคำนวณสมบัติต่าง ๆ ของระบบได้ โดยสมการการเคลื่อนที่เป็นไปตามสมการของนิวตัน (Newton's equation of motion)

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, m_i \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i$$

เมื่อ \vec{r}_i คือ ตำแหน่งของอะตอม, \vec{v}_i คือ ความเร็วที่อะตอมใช้ในการเคลื่อนที่, m_i คือ มวลของอะตอม และ \vec{F}_i คือแรงของอะตอม

2.7.2 แรงของอะตอม

สำหรับระบบที่มีอะตอม n อะตอม แรงของระบบประกอบด้วยผลรวมพลังงานศักย์ของระบบ

$$\vec{F}_i = -\nabla_{\vec{r}_i} U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$$

และสามารถหาพลังงานศักย์ได้จากการรวมแรงระหว่างพันธะของอะตอม (Intramolecular force) และแรงที่ไม่ได้เกิดจากการสร้างพันธะระหว่างอะตอม

- แรงระหว่างพันธะของอะตอม (bond interaction) ได้แก่ พันธะโควาเลนต์ (Covalent bond)
- แรงที่ไม่ได้เกิดจากการสร้างพันธะระหว่างอะตอม (non-bond interaction) ได้แก่ แรงแวนเดอร์วาลส์ (Van der waal) และแรงไฟฟ้าสถิตย์ (electrostatic)

พลังงานศักย์รวมภายในระบบ (total intramolecular potential) สามารถคำนวณได้จาก

$$E_{total} = E_{bond} + E_{angle} + E_{dihedral} + E_{vdw} + E_Q$$

หรือ

$$\begin{aligned} U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) &= \sum_{bonds} \frac{a_i}{2} (r_i - r_{i0})^2 \\ &+ \sum_{angles} \frac{b_i}{2} (\theta_i - \theta_{i0})^2 + \sum_{torsions} \frac{c_i}{2} [1 \\ &+ \cos(n\omega_i - \gamma_i)] \\ &+ \sum_{atom\ pairs} 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \\ &+ \sum_{atom\ pairs} \frac{q_i q_j}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r_{ij}} \end{aligned}$$

โดย

$$\sum_{bonds} \frac{a_i}{2} (r_i - r_{i0})^2$$

แสดงพันธะโควาเลนต์ของโครงสร้างโมเลกุล เมื่อ \mathbf{r}_i และ \mathbf{r}_{i0} คือ ความยาวของพันธะ และความยาวของพันธะที่สมดุล ตามลำดับ a_i คือค่าคงที่แรง

$$\sum_{angles} \frac{b_i}{2} (\theta_i - \theta_{i0})^2$$

อธิบายมุมระหว่างพันธะที่กระทำระหว่างอะตอม โดยที่ θ_i และ θ_{i0} คือมุมที่ค่าสมดุล และ b_i คือค่าคงที่แรง

$$\sum_{torsions} \frac{c_i}{2} [1 + \cos(n\omega_i - \gamma_i)]$$

แสดงพลังงานศักย์ที่เกิดจากมุมของการบิดตัวของโมเลกุลซึ่งใช้ในการจำกัดการหมุนรอบตัวของโครงสร้างโมเลกุลที่ประกอบไปด้วยอะตอม 4 อะตอม โดยที่ c_i , ω_i , γ_i คือ ค่ามุม dihedral, มุม phase ตามลำดับ

$$\sum_{atom\ pairs} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{atom\ pairs} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_{ij}}$$

เป็นพจน์แรง van der Waals (vdW) และแรงระหว่างประจุ สามารถหาได้จากสมการเลนนาร์ด-โจนส์ (Lennard-Jones, LJ) โดยที่ ϵ_{ij} คือค่าที่น้อยที่สุดของพลังงานศักย์, σ_{ij} คือเส้นผ่านศูนย์กลางและ r_{ij} คือระยะทางระหว่างอะตอม i และอะตอม j

2.8 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

Vathanapanich และคณะ ได้ศึกษาการลดการดูดซับสารลดแรงตึงผิวด้วยสารอัลคาไลน์ในแหล่งกักเก็บคาร์บอน การดูดซับของสารลดแรงตึงผิวบนผิวหินสามารถทำให้ลดลงได้โดยใช้สารอัลคาไลน์ผสมกับสารลดแรงตึงผิว ผลการศึกษาพบว่า สามารถใช้สารโซเดียมคาร์บอเนต (sodium carbonate, Na_2CO_3) ซึ่งเป็นสารอัลคาไลน์ผสมกับโซเดียมโดเดซิลเบนซีนซัลโฟเนต (sodium dodecylbenzenesulfonate, SDBS) ที่

เป็นสารลดแรงตึงผิวประจุลบได้ในหินตัวอย่างโดโลไมต์ (dolomite) เนื่องจากโซเดียมคาร์บอเนตสามารถให้ประจุเพียงพอที่จะแย่งชิงและถูกดูดซับบนพื้นผิวของหินได้ดีกว่าสารลดแรงตึงผิว ในขณะที่เดียวกันประจุของอัลคาไลน์ประเภทนี้ยังไม่รุนแรงพอที่จะผลักให้โมเลกุลของสารลดแรงตึงผิวถูกดูดซับบนพื้นผิวหิน และจากการศึกษายังพบอีกว่าการย้อนกลับการดูดซับของสารลดแรงตึงผิวไม่ขึ้นกับปริมาณที่ถูกดูดซับ แต่ขึ้นกับความเข้มข้นของสารอัลคาไลน์และสารลดแรงตึงผิว [4]

Tummala และคณะ ได้ศึกษาพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิวชนิดประจุลบโซเดียมโดเดซิลซัลเฟต (sodium dodecyl sulfate, SDS) ที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังชั้นเดียว โดยมีตัวแปรที่สนใจศึกษา คือ ขนาดท่อนาโนคาร์บอนที่ต่างกัน ได้แก่ (6,6), (12,12) และ (20,20) และค่าการปกคลุมพื้นผิวของสารลดแรงตึงผิวที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอน โดยการสร้างแบบจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล จากแบบจำลอง (snapshot) พบว่า พฤติกรรมการดูดซับของสารลดแรงตึงผิวเป็นไปตามข้อมูลกราฟ (neutron scattering experimental data) และการดูดซับของสารลดแรงตึงผิวขึ้นกับตัวแปรทั้งสองตัวแปรที่ได้กล่าวไว้ข้างต้น นั่นคือ สารลดแรงตึงผิวจะดูดซับมากขึ้นเมื่อมีความเข้มข้นมากขึ้นและมีพื้นที่ผิวของท่อนาโนคาร์บอนที่มากขึ้น เพื่อเพิ่มความเข้าใจเกี่ยวกับส่วนหางและส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิวและโซเดียมไอออน จึงแสดงผลออกมาในรูปแบบของโปรไฟล์ความหนาแน่น (density profile) พบว่าส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิวชนิด SDS หนาแน่นบริเวณใกล้ท่อนาโนคาร์บอนทั้ง 3 ขนาดมากที่สุด ขณะเดียวกันส่วนหางของสารลดแรงตึงผิวชนิด SDS หนาแน่นบริเวณถัดออกมาจากส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิวแต่มีระยะห่างไม่มากนัก ส่วนโซเดียมไอออน หนาแน่นบริเวณถัดออกมาจากส่วนหัวและส่วนหางของสารลดแรงตึงผิว ซึ่งเป็นส่วนที่ไกลจากท่อนาโนคาร์บอนมากที่สุด [15]

Suttipong และคณะ ได้ศึกษาพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิวชนิดประจุลบโซเดียมโดเดซิลเบนซีนซัลโฟเนต (sodium dodecylbenzenesulfonate, SDBS) ที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนชนิดผนังชั้นเดียว ที่ขนาดต่างกัน ได้แก่ (6,6), (12,12) และ (20,20) ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาผลของโครงสร้างโมเลกุล SDBS ทั้งแบบโซ่ตรงและกิ่งต่อพฤติกรรมการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว โดยสร้างแบบจำลอง พลวัตเชิงโมเลกุล ผลการ

ทดลองพบว่า โครงสร้างโมเลกุลของสารลดแรงตึงผิวชนิด SDBS ทั้งโซ่ตรงและโซ่กิ่งมีผลต่อการดูดซับบนผิวของท่อคาร์บอนอย่างมากและขึ้นตรงกับขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของท่อคาร์บอนผนังเดี่ยว [17] และได้ศึกษาพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิวผสม ต่อเนื่องจากงานวิจัยข้างต้น โดยในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาการพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิว SDBS แบบผสม ระหว่างโซ่ตรงและโซ่กิ่งในปริมาณที่เท่ากันดูดซับบนท่อคาร์บอนเส้นผ่านศูนย์กลาง (6,6) และ (20,20) ผลการศึกษาพบว่า การดูดซับของสารลดแรงตึงผิวแบบผสมบนท่อคาร์บอน ไม่ได้ขึ้นกับขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางท่อคาร์บอน และยังอีกพบว่า สารลดแรงตึงผิว SDBS แบบผสมอาจจะส่งผลต่อการดูดซับและการกระจายตัวบนท่อคาร์บอน [14]

Chen และคณะได้ศึกษาการใช้อนุภาคนาโนคาร์บอน ได้แก่ ท่อคาร์บอนผนังหลายชั้น (multi-walled carbon nanotubes) และผงเขม่าดำ (carbon blacks) เป็นตัวพาสารลดแรงตึงผิว (surfactant) ในการเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบ โดยอาศัยคุณสมบัติของอนุภาคนาโนคาร์บอนที่มีพื้นที่ผิวสูงและมีแรงตึงดูดกับสารลดแรงตึงผิวทำให้สามารถพาสารลดแรงตึงผิวไปยังหลุมปิโตรเลียมได้ วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือประเมินความเป็นไปได้ของการใช้ตัวพาสารลดแรงตึงผิวในการเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบ โดยศึกษา (1) ความมีเสถียรภาพในการกระจายตัวของท่อคาร์บอน (MWNTs) และผงเขม่าดำ (CBs) และความสามารถในการแพร่ผ่านตัวกลาง (น้ำเกลือร้อยละ 3 โดยมวล ที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส) (2) การลดลงของการดูดซับสารลดแรงตึงผิวบนทรายออตตาวา (Ottawa sand) (3) การปลดปล่อยสารลดแรงตึงผิวไปยังรอยต่อระหว่างน้ำมันกับน้ำ (Oil-water interface) ด้วยการคำนวณพลังงานอิสระกิบส์ (Gibbs free energy) และ (4) ผลของการเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบ จากการทดลองพบว่า อนุภาคนาโนคาร์บอนสามารถใช้เป็นตัวพาสารลดแรงตึงผิวได้ การสูญเสียสารลดแรงตึงผิวจากการดูดซับในทรายออตตาวาลดลงเมื่อใช้อนุภาคนาโนคาร์บอนเป็นตัวพา จากการคำนวณพลังงานอิสระกิบส์พบว่าการปลดปล่อยของสารลดแรงตึงผิวที่ดูดซับบนท่อคาร์บอนไปยังรอยต่อระหว่างน้ำมันกับน้ำเกิดขึ้นได้เอง นอกจากนี้ยังพบว่าการใช้สารผสมระหว่างท่อคาร์บอนกับสารลดแรงตึงผิวช่วยเพิ่มผลผลิตน้ำมันดิบร้อยละ 4.6 เมื่อเปรียบเทียบกับระบบที่ใช้เฉพาะสารลดแรงตึงผิว [1]

Vu และคณะได้ศึกษาการใช้แบบจำลองเชิงพลวัตด้วยเทคนิค Dissipative Particle Dynamics (DPD) เพื่อศึกษาการใช้ท่อนาโนคาร์บอน (carbon nanotubes, CNTs) เป็นตัวพาสารลดแรงตึงผิว (Surfactant carrier) ไปยังผิวสัมผัสระหว่างน้ำมันกับน้ำ (Oil-water interface) โดยศึกษาผลของสารลดแรงตึงผิว 2 ชนิด ได้แก่ โซเดียมโดเดซิลซัลเฟต (sodium dodecyl sulfate, SDS) (ประจุลบ) และออกตะเอทิลีนไกลคอลโมโนโดเดซิลอีเทอร์ (octaethylene glycol monododecyl ether, C12E8) (ไม่มีประจุ) ต่อการดูดซับสารลดแรงตึงผิวบนพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนและการปลดปล่อยสารลดแรงตึงผิวที่ผิวสัมผัสระหว่างน้ำมันกับน้ำ ผลการจำลองพบว่าสารลดแรงตึงผิว SDS และ C12E8 ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนจำนวน 2.62 และ 2.43 โมเลกุลต่อตารางนาโนเมตร ตามลำดับ โดยปัจจัยที่ส่งผลต่อปริมาณการดูดซับคือ ผลของไฟฟ้าสถิตย์ (electrostatic effect) ระหว่างส่วนหัวที่มีขั้วของสารลดแรงตึงผิวประจุลบและผลของความเกะกะ (steric effect) ของสารลดแรงตึงผิวที่ไม่มีประจุ โมเลกุลของสารลดแรงตึงผิวสามารถปลดปล่อยจากท่อนาโนคาร์บอนและกระจายตัวที่ผิวสัมผัสระหว่างน้ำมันกับน้ำส่งผลให้แรงตึงผิวระหว่างน้ำมันกับน้ำ (oil-water interfacial tension) ลดลง เมื่อความเข้มข้นระหว่างผิวสัมผัสของสารลดแรงตึงผิว (surfactant interfacial concentration) มีค่าต่ำท่อนาโนคาร์บอนยังคงกระจายตัวที่ผิวสัมผัสระหว่างน้ำมันกับน้ำ เมื่อความเข้มข้นระหว่างผิวสัมผัสของสารลดแรงตึงผิวมีค่าเท่ากับความเข้มข้นวิกฤตของการเกิดไมเซลล์ (critical micelle concentration, CMC) ท่อนาโนคาร์บอนจะถูกผลักไปยังชั้นน้ำมัน ผลการจำลองนี้แสดงให้เห็นว่าท่อนาโนคาร์บอนหรืออนุภาคนาโนที่ไม่ชอบน้ำ (hydrophobic nanoparticles) สามารถใช้เป็นตัวเลือกในการพาสารลดแรงตึงผิวไปยังผิวสัมผัสระหว่างน้ำมันกับน้ำและประยุกต์ใช้ในการเพิ่มการผลิตน้ำมัน (Enhanced oil recovery) [17]

บทที่ 3

วิธีดำเนินงานวิจัย

3.1 โปรแกรมที่ใช้ในการดำเนินงานวิจัย

3.1.1 WinSCP

ใช้สำหรับถ่ายโอน คัดลอก อัปโหลด ดาวน์โหลดไฟล์ข้อมูลคอมพิวเตอร์ของผู้ใช้ไปยังเครื่องแม่ข่าย หรือเซิร์ฟเวอร์ (server)

3.1.2 PuTTY

ใช้ในการเชื่อมต่อและสั่งงานเซิร์ฟเวอร์

3.1.3 Visual Molecular Dynamics (VMD)

ใช้สำหรับดูโครงสร้างแบบจำลองโมเลกุล การแสดงผลการเคลื่อนไหว และการวิเคราะห์ระบบชีวโมเลกุลขนาดใหญ่โดยใช้กราฟิก 3 มิติ

3.1.4 EditPad Lite 7

ใช้ในการแก้ไขข้อความ แก้ไขโค้ดที่ใช้ในการเขียนและพัฒนาโปรแกรม

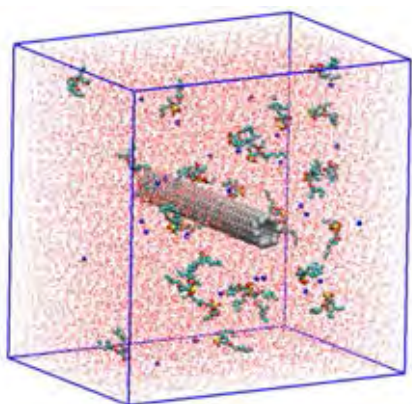
3.1.5 MATLAB R2018a

MATLAB หรือ Matrix Laboratory เป็นซอฟต์แวร์ที่ใช้ในการคำนวณและการเขียนโปรแกรม

3.2 แพคเกจซอฟต์แวร์

GROMACS package, version 5.0.4

3.3 แบบจำลอง



รูปที่ 3.1 แสดงตัวอย่างแบบจำลอง

การสร้างแบบจำลองประกอบไปด้วยท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังชั้นเดียว สารลดแรงตึงผิว AOT โซเดียมไอออน และน้ำ โดยกำหนดปริมาตรของกล่องแบบจำลองขนาด $10 \times 10 \times 7.133$ ลูกบาศก์นาโนเมตร ตัวแปรดำเนินการมีขนาดท่อนาโนคาร์บอน และค่าการปกคลุมพื้นผิวของสารลดแรงตึงผิวบนท่อนาโนคาร์บอน โดยค่าการปกคลุมพื้นผิวสามารถคำนวณได้จากพื้นที่ผิวของท่อนาโนคาร์บอน ซึ่งค่าการปกคลุมพื้นผิวและขนาดท่อนาโนคาร์บอนมีความสัมพันธ์ดังแสดงในตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 แสดงเส้นผ่านศูนย์กลางและพื้นที่ผิวของท่อนาโนคาร์บอน และจำนวนสารลดแรงตึงผิว AOT ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิว

ขนาดท่อนาโนคาร์บอน	เส้นผ่านศูนย์กลางของท่อนาโนคาร์บอน (นาโนเมตร)	พื้นที่ผิวของท่อนาโนคาร์บอน (ตารางนาโนเมตร)	จำนวนสารลดแรงตึงผิว AOT ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิว	
			ต่ำ	สูง
(6,6)	0.814	18.236	28	56
(12,12)	1.628	36.471	56	112
(20,20)	2.713	60.785	92	184

ดังนั้นระบบที่ใช้ในการจำลองจะแบ่งออกเป็น 6 ระบบ ดังแสดงในตารางที่ 3.2

ตารางที่ 3.2 แสดงสรุประบบแบบจำลอง

ระบบที่	ค่าการปกคลุม พื้นผิว	ขนาดท่อนาโนคาร์บอน	จำนวนสารลดแรงตึงผิว AOT	จำนวนโซเดียมไฮดรอกไซด์
1	ต่ำ	(6,6)	28	28
2		(12,12)	56	56
3		(20,20)	92	92
4	สูง	(6,6)	56	56
5		(12,12)	112	112
6		(20,20)	184	184

3.4 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

3.4.1 ติดตั้งโปรแกรม

3.4.2 เตรียมไฟล์ input

1) Initial configuration (init.gro)

ระบุตำแหน่งของโมเลกุลต่าง ๆ ภายในระบบประกอบด้วย ชื่ออะตอม ชนิดอะตอม ลำดับอะตอม ตำแหน่งโมเลกุลตามแกน x แกน y และแกน z และขนาดของกล่องในการสร้างแบบจำลอง

2) Index file (index.ndx)

เป็นการเก็บข้อมูลจากไฟล์ initial configuration ในรูปแบบ database file ซึ่งเป็นไฟล์ฐานข้อมูลที่ถูกใช้ในระบบปฏิบัติการ

3) Force fields (topol.top)

เป็นตัวบอกค่าพลังงานภายในระบบ

4) Input parameter (input.mdp)

เป็นตัวกำหนดพารามิเตอร์ต่าง ๆ โดยเวลาในการประมวลผล 100 นาโนวินาที และอุณหภูมิที่ใช้เท่ากับ 300 เคลวิน

5) Script file (script.sh)

ใช้สำหรับระบุตำแหน่งข้อมูล เพื่อส่งต่อข้อมูลไปยังระบบสำหรับการประมวลผล

3.4.3 ประมวลผลไฟล์ input ผ่านคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูง (High Performance Computer, HPC)

ของศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (National Electronics and Computer Technology Center, NECTEC)

3.4.4 ตรวจสอบข้อมูลที่ได้หลังจากการประมวลผล

3.4.5 นำข้อมูลที่เข้าสู่สมดุลดาค่าคุณสมบัติต่าง ๆ

1) แบบจำลอง (Snapshot)

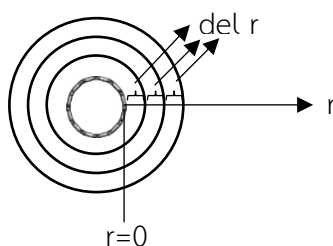
เป็นการแสดงภาพแบบจำลองที่เข้าสู่สมดุลด โดยสามารถสร้างจากโปรแกรม VMD คำสั่ง Snapshot สร้างภาพแบบจำลองด้านหน้า และด้านข้าง

2) ความหนาแน่น 2 มิติ (2D density)

เป็นการแสดงภาพความหนาแน่นอะตอมในรูปแบบ 2 มิติ ในทิศทางแกน x และแกน y โดยสามารถสร้างจากการใช้คำสั่งใน GROMACS ชุดคำสั่ง gmx densmap เพื่อสร้างความหนาแน่น 2 มิติ และ gmx xpm2ps เพื่อแปลงไฟล์ที่ได้จากคำสั่งก่อนหน้าให้เป็นไฟล์รูป

3) รูปแบบความหนาแน่น (Density profile)

เป็นการแสดงความหนาแน่นของอะตอมนำเสนอด้านข้อมูลในรูปแบบแผนภูมิ โดยแกน x แสดงระยะห่างตามแนวรัศมีจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอน หน่วยอังสตรอม ($^{\circ}\text{A}$) แกน y แสดงความหนาแน่นอะตอม หน่วยอะตอมต่ออังสตรอม ($\text{atom}/^{\circ}\text{A}$) สามารถคำนวณได้จากการประมวลในโปรแกรม MATLAB R2018a



รูปที่ 3.2 แสดงการแบ่งช่วงในการคำนวณรูปแบบความหนาแน่น

ระยะ $\text{del } r$ สามารถหาได้จากด้านของกล่องที่ใช้ในการสร้างระบบ โดยกำหนดช่วงให้คงที่ที่ 200 ช่วง มีสมการนี้

$$\text{del } r = \frac{\max(\text{box})}{n\text{bin} \times \sqrt{2}}$$

$$\text{del } r = \frac{10 \text{ nm}}{200 \times \sqrt{2}}$$

$$\text{del } r = 0.0354 \text{ nm}$$

ใช้โปรแกรม MATLAB R2018a ในการนับจำนวนอะตอมในระบบในแต่ละช่วงของค่า $\text{del } r$ และคำนวณค่าเฉลี่ยเพื่อสร้างแผนภูมิ

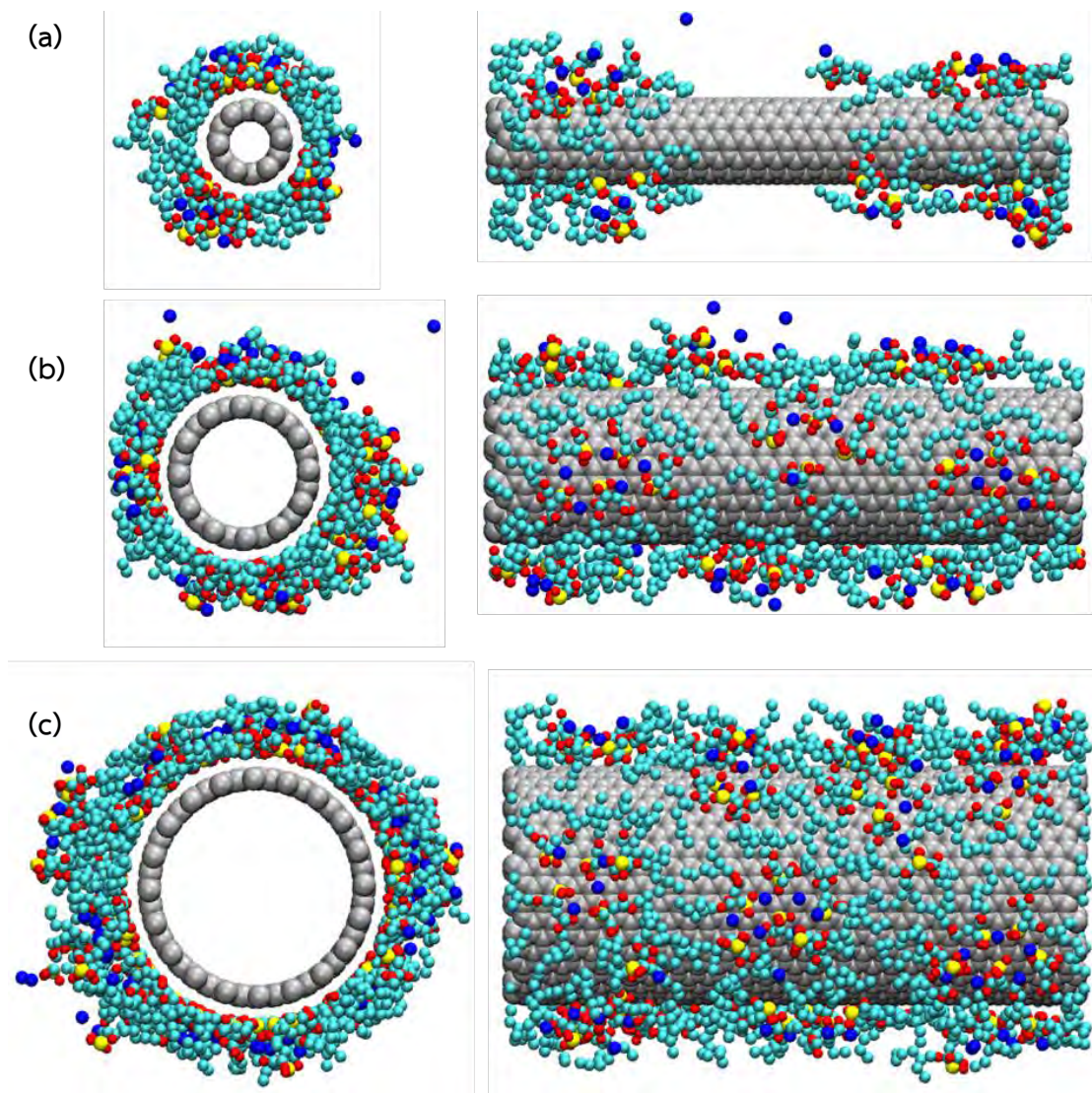
- 4) พลังงานรวมของระบบ (Total energy)

เป็นการแสดงพลังงาน (potential energy) รวมของระบบ โดยสามารถสร้างจากการใช้คำสั่ง
ใน GROMACS ชุดคำสั่ง gmx energy และเลือก Total energy เพื่อคำนวณพลังงาน (E_{total})
ซึ่งประกอบไปด้วยแรงพันธะและแรงที่ไม่ได้เกิดจากการสร้างพันธะระหว่างอะตอม โดยแรง
พันธะได้แก่ พันธะโควาเลนต์ มุมระหว่างพันธะ และการบิดตัวของโมเลกุล แรงที่ไม่ได้เกิด
จากการสร้างพันธะระหว่างอะตอมได้แก่ แรงแวนเดอร์วาลส์และแรงระหว่างประจุ

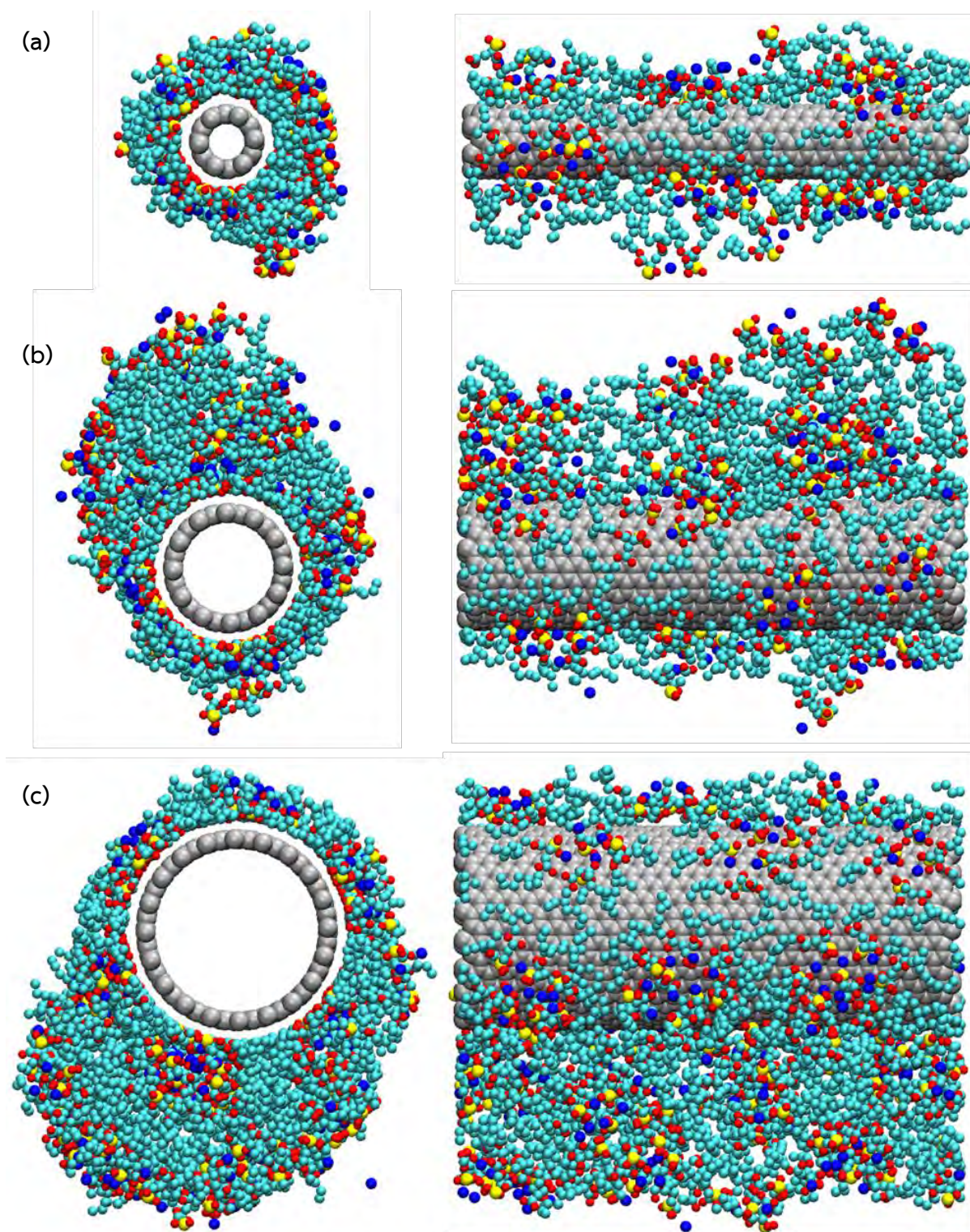
บทที่ 4

ผลการทดลองและการวิเคราะห์ผล

4.1 แบบจำลอง (Snapshot)



รูปที่ 4.1 แสดงผลการจำลองการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวต่ำ ภาพจำลองด้านหน้า (ซ้าย) และด้านข้าง (ขวา) ของท่อนาโนคาร์บอนขนาด (a) (6,6) (b) (12,12) และ (c) (20,20) โดยไม่แสดงโมเลกุลน้ำ สีที่แสดงดังนี้ สีฟ้าแทนอะตอมคาร์บอน สีแดงแทนอะตอมออกซิเจน สีเหลืองแทนอะตอมซิลเฟอร์ สีน้ำเงินแทนอะตอมไฮโดรเจนของสารลดแรงตึงผิว AOT และสีเทาแทนอะตอมคาร์บอนของท่อนาโนคาร์บอน



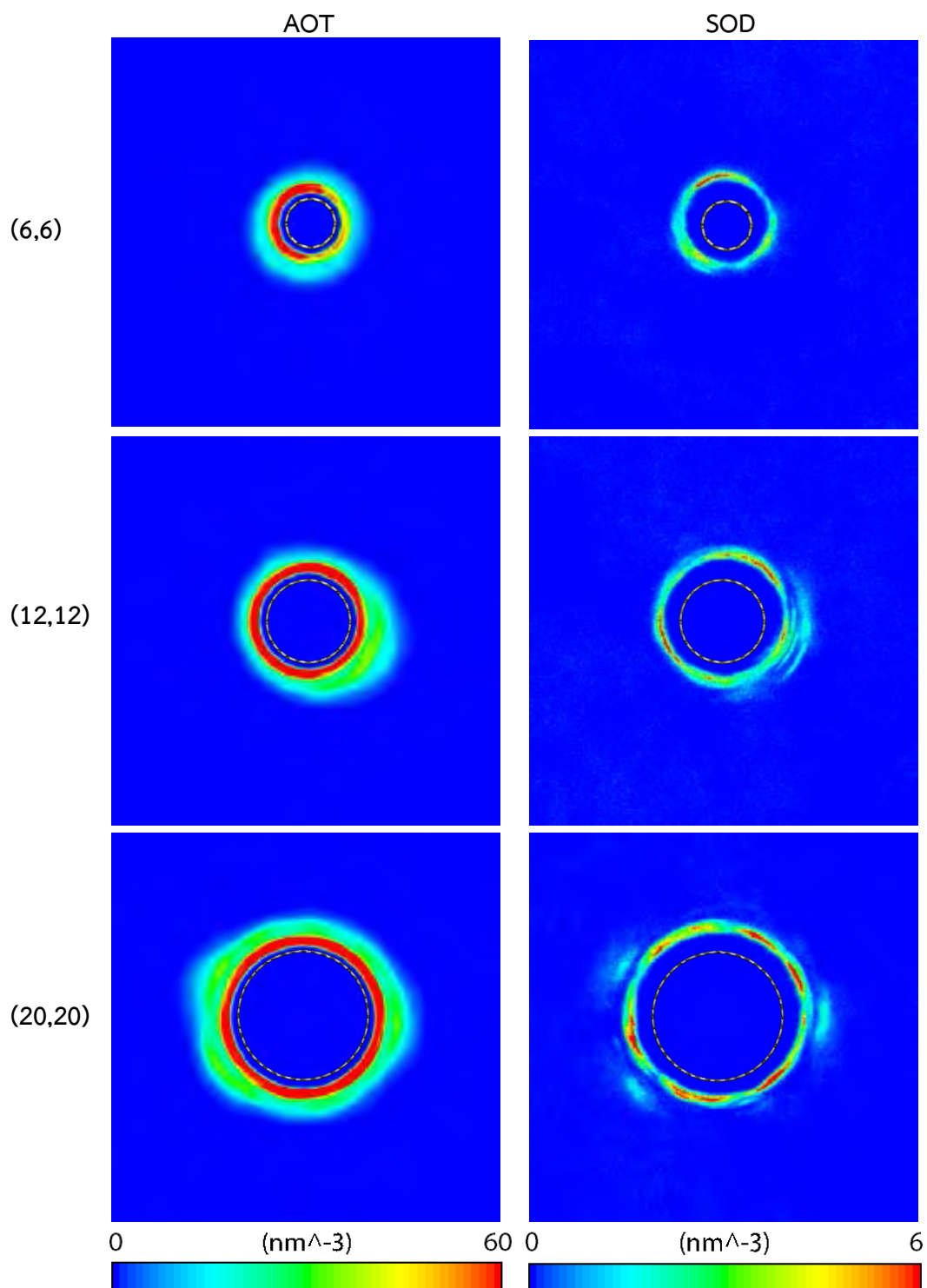
รูปที่ 4.2 แสดงผลการจำลองการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง ภาพจำลองด้านหน้า (ซ้าย) และด้านข้าง (ขวา) ของท่อนาโนคาร์บอนขนาด (a) (6,6) (b) (12,12) และ (c) (20,20) โดยไม่แสดงโมเลกุลน้ำ สีที่แสดงดังนี้ สีฟ้าแทนอะตอมคาร์บอน สีแดงแทนอะตอมออกซิเจน สีเหลืองแทนอะตอมซัลเฟอร์ สีน้ำเงินแทนอะตอมไฮโดรเจนของสารลดแรงตึงผิว AOT และสีเทาแทนอะตอมคาร์บอนของท่อนาโนคาร์บอน

จากรูปที่ 4.1 และ 4.2 พบว่าสารลดแรงตึงผิว AOT ดูดซับบนท่อนานาโนคาร์บอน ส่วนหางของสารลดแรงตึงผิว AOT จะอยู่บริเวณใกล้ท่อนานาโนคาร์บอนซึ่งเป็นผลมาจากแรงไฮโดรโฟบิกระหว่างหางของสารลดแรงตึงผิว AOT กับท่อนานาโนคาร์บอน ส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว AOT บางส่วนจะซี้ออกจากท่อนานาโนคาร์บอนเนื่องจากแรงไฮโดรฟิลิกระหว่างส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว AOT กับน้ำ ด้วยลักษณะโครงสร้างโมเลกุลของสารลดแรงตึงผิว AOT ที่เป็นแบบกิ่งส่งผลให้บางส่วนของส่วนหัวสารลดแรงตึงผิว AOT อยู่ใกล้ท่อนานาโนคาร์บอนเช่นเดียวกับส่วนหาง โซเดียมไอออนส่วนใหญ่อยู่บริเวณใกล้ส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว AOT เนื่องจากแรงไฟฟ้าสถิต จากรูป 4.1 (a) (b) และ (c) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำ และรูป 4.2 (a) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงลักษณะการดูดซับสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนานาโนคาร์บอนเป็นแบบชั้นเดียว (monolayer) ในขณะที่รูป 4.2 (b) และ (c) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงลักษณะการดูดซับสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนานาโนคาร์บอนจะมีการปกคลุมหลายชั้น (multilayer) เนื่องจากสารลดแรงตึงผิว AOT มีการปกคลุมบนพื้นท่อนานาโนคาร์บอนอย่างหนาแน่นบางส่วนของสารลดแรงตึงผิว AOT จึงเกิดการรวมตัวกันเป็นไมเซลล์ (micelle) ทำให้เกิดการปกคลุมหลายชั้นบนท่อนานาโนคาร์บอน

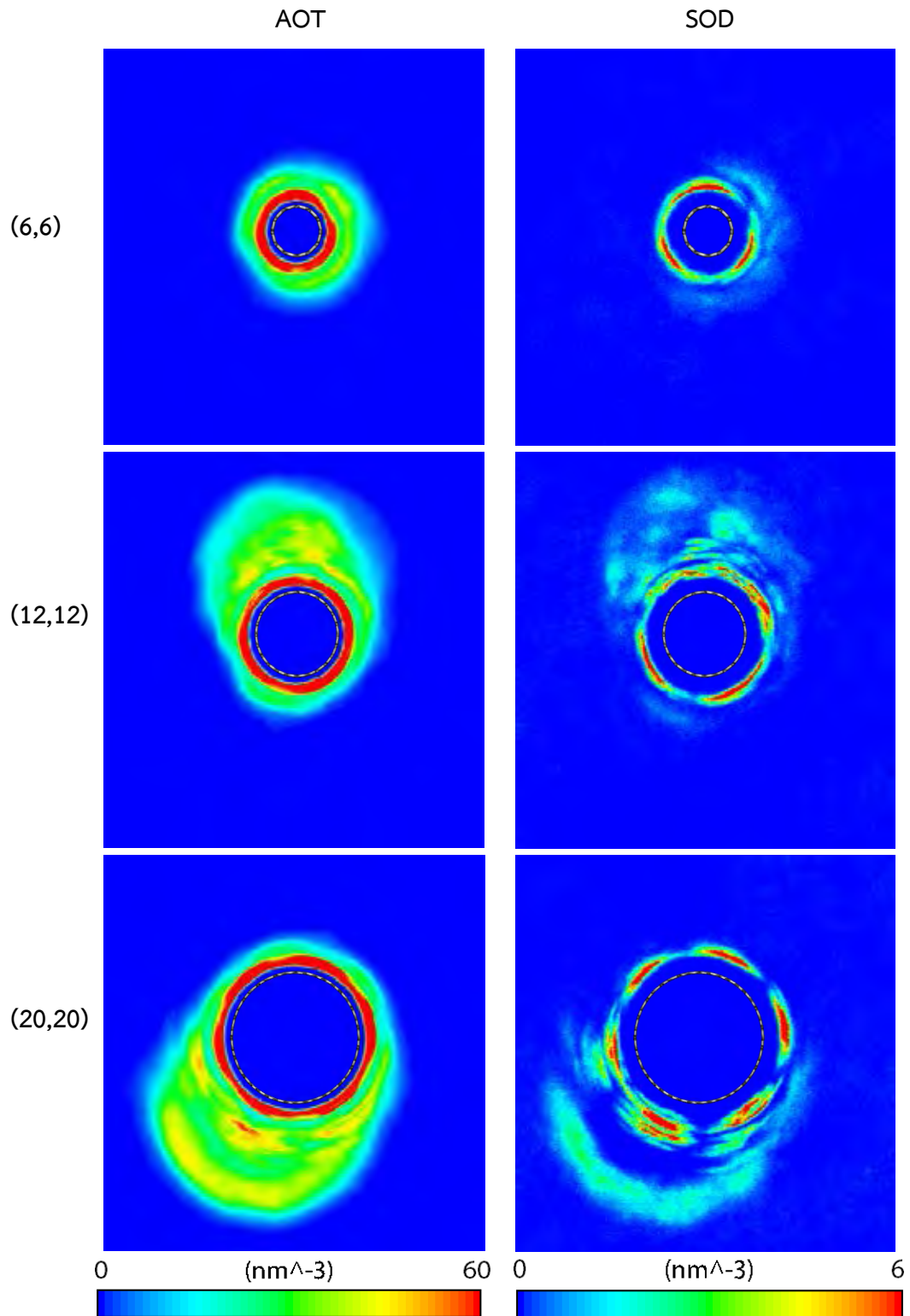
เมื่อเปรียบเทียบผลการทดลองกับสารลดแรงตึงผิว SDBS และสารลดแรงตึงผิว SDS พบว่าพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิว SDBS ชนิดโซ่ตรงและโซ่กิ่งจะมีพฤติกรรมคล้ายกับสารลดแรงตึงผิว AOT ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำโดยทั้งส่วนหัวและส่วนหางของสารลดแรงตึงจะอยู่บริเวณพื้นผิวดำท่อนานาโนคาร์บอน ส่วนโซเดียมไอออนจะมีการกระจายตัวมากกว่า ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงพบว่ามีพฤติกรรมแตกต่างโดยหางของสารลดแรงตึงผิว SDBS จะอยู่บริเวณใกล้กับท่อนานาโนคาร์บอน ส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว SDBS จะหันออกจากท่อนานาโนคาร์บอน ส่วนสารลดแรงตึงผิว AOT ที่ส่วนหัวและส่วนหางของสารลดแรงตึงจะอยู่ในบริเวณพื้นผิวของท่อนานาโนคาร์บอนเป็นผลมาจากลักษณะโครงสร้างของ SDBS มีหาง 1 หาง ส่วนโครงสร้างของ AOT มีหาง 2 หางแรงไฮโดรโฟบิกจึงมีค่ามากกว่าส่งผลให้มีพฤติกรรมดังกล่าว นอกจากนี้พบว่าที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงพบว่ามีพฤติกรรมที่เหมือนกันคือโซเดียมไอออนจะอยู่ใกล้ส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิวและการเกิดไมเซลล์ทำให้เกิดปกคลุมท่อนานาโนคาร์บอนหลายชั้น การเปรียบเทียบระหว่างสารลดแรงตึงผิว SDS กับสารลดแรงตึงผิว

AOT พบว่ามีพฤติกรรมใกล้เคียงกันทั้งส่วนหัวส่วนหางของสารลดแรงตึงผิวและโซเดียมไอออน แต่ด้วยลักษณะโครงสร้างของสารลดแรงตึงผิว AOT ที่มีขนาดใหญ่กว่าและมีหาง 2 หางทำให้สารลดแรงตึงผิวปกคลุมบนพื้นนาโนคาร์บอนแน่นกว่าสารลดแรงตึงผิว SDS

4.2 ความหนาแน่น 2 มิติ (2D density)



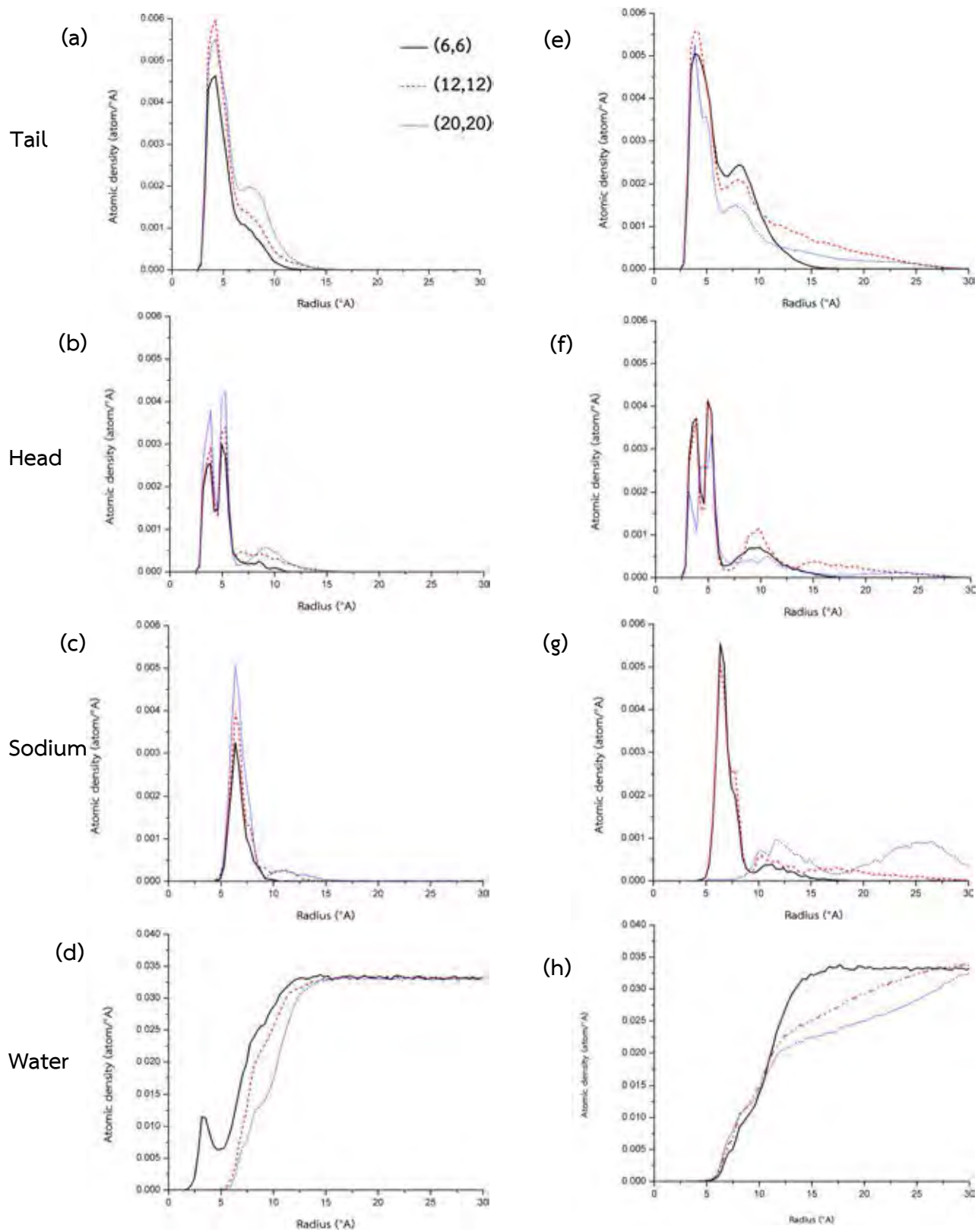
รูปที่ 4.3 แสดงความหนาแน่นของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวต่ำในรูปแบบ 2 มิติ ในทิศทางแกน x และแกน y ของสารลดแรงตึงผิว AOT (ซ้าย) และโซเดียมไอออน (ขวา) บนท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) (12,12) และ (20,20) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวต่ำ



รูปที่ 4.4 แสดงความหนาแน่นของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงในรูปแบบ 2 มิติ ในทิศทางแกน x และแกน y ของสารลดแรงตึงผิว AOT (ซ้าย) และโซเดียมไอออน (ขวา) บนท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) (12,12) และ (20,20) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง

พฤติกรรมการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT สามารถอธิบายได้ด้วยการคำนวณค่าความหนาแน่น 2 มิติ ในทิศทางแกน x และแกน y จากรูปที่ 4.3 และ 4.4 พบว่าสารลดแรงตึงผิว AOT (ซ้าย) มีพฤติกรรมดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนโดยความหนาแน่นของสารลดแรงตึงผิว AOT มีความหนาแน่นสูงบริเวณพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนทั้งในกรณีที่มีค่าการปกคลุมพื้นผิวดำและค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง แต่ในกรณีที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงพบว่าจะมีความหนาแน่นของสารลดแรงตึงผิว AOT บริเวณที่ห่างจากท่อนาโนคาร์บอนแสดงให้เห็นว่ามีสารลดแรงตึงผิวอยู่ในบริเวณดังกล่าว ส่วนโซเดียมไอออน (ขวา) ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวทั้ง 2 กรณีพบว่าจะมีความหนาแน่นสูงบริเวณถัดจากสารลดแรงตึงผิว AOT ที่ปกคลุมท่อนาโนคาร์บอน ในกรณีที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงพบว่าจะมีความหนาแน่นของโซเดียมไอออนในบริเวณที่ถัดออกมาแสดงให้เห็นว่าโซเดียมไอออนมีการกระจายอยู่นอกเหนือบริเวณแรกซึ่งสอดคล้องกับผลการจำลองการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอนรูปที่ 4.1 และ 4.2 ที่แสดงให้เห็นว่ามีการปกคลุมหลายชั้นที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงและโซเดียมไอออนอยู่ในบริเวณใกล้ส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว AOT เนื่องจากแรงทางไฟฟ้าสถิตจึงเห็นเป็นความหนาแน่นที่กระจายอยู่ในส่วนต่าง ๆ จากที่สารลดแรงตึงผิวสร้างไมเซลล์

4.3 รูปแบบความหนาแน่น (Density profile)



รูปที่ 4.5 แสดงรูปแบบความหนาแน่นของการดูดซับของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำ (ซ้าย) แสดงแผนภูมิความหนาแน่นของอะตอม (a) ทางสารลดแรงตึงผิว AOT (b) หัวสารลดแรงตึงผิว AOT (c) โซเดียมไอออน และ (d) น้ำ ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง (ขวา) แสดงแผนภูมิความหนาแน่นของอะตอม (e) ทางสารลดแรงตึงผิว AOT (f) หัวสารลดแรงตึงผิว AOT (g) โซเดียมไอออน และ (h) น้ำ สีที่แสดงภายในแผนภูมิดังนี้ สีดำแสดงข้อมูลของท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) สีแดงแสดงข้อมูลของท่อนาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และสีฟ้าแสดงข้อมูลของท่อนาโนคาร์บอนขนาด (20,20)

รูปแบบความหนาแน่นสามารถคำนวณได้จากการประมวลในโปรแกรม MATLAB R2018a และนำเสนอข้อมูลในรูปแบบกราฟ โดยแกน x แสดงระยะห่างตามแนวรัศมีจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอน หน่วยอังสตรอม ($^{\circ}\text{A}$) แกน y แสดงความหนาแน่นอะตอม หน่วยอะตอมต่ออังสตรอม ($\text{atom}/^{\circ}\text{A}$)

เมื่อพิจารณาแผนภูมิที่ 4.5 (a) และ 4.5 (e) ซึ่งแสดงความหนาแน่นอะตอมส่วนหางของสารลดแรงตึงผิว AOT พบว่าที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำท่อนาโนคาร์บอนทุกขนาดและที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) อะตอมส่วนหางของสารลดแรงตึงผิว AOT จะมีความหนาแน่นสูงบริเวณที่ห่างจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 5 อังสตรอมเนื่องจากผลของแรงไฮโดรโฟบิกและมีความหนาแน่นลดลงในช่วงถัดมาห่างจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 7 อังสตรอมมีลักษณะเป็นไหล่ของจุดยอดเป็นผลมาจากลักษณะทางโครงสร้างของสารลดแรงตึงผิว AOT ที่มีหาง 2 หางทำให้มีความหนาแน่นของสารลดแรงตึงผิวในช่วงดังกล่าว ส่วนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อนาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และ (20,20) ลักษณะของแผนภูมิที่ได้จะคล้ายกับที่กล่าวมาข้างต้นแต่ค่าความหนาแน่นที่ห่างจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนจะค่อย ๆ ลดลง ซึ่งแตกต่างจากกรณีก่อนหน้าที่ค่าความหนาแน่นจะลดลงอย่างรวดเร็วเป็นผลมาจากที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อนาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และ (20,20) การเกิดไมเซลล์ทำให้เกิดปกคลุมท่อนาโนคาร์บอนหลายชั้นจึงมีส่วนหางของสารลดแรงตึงผิวในบริเวณที่ห่างจากท่อนาโนคาร์บอน ทำให้แผนภูมิลักษณะตามแผนภูมิที่ 4.5 (a) และ 4.5 (e)

เมื่อพิจารณาแผนภูมิที่ 4.5 (b) และ 4.5 (f) ซึ่งแสดงความหนาแน่นอะตอมส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว AOT พบว่าที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำและที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงจะมีค่าความหนาแน่นสูงอยู่ 2 จุดโดย

ห่างจากพื้นผิวท่อานาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 5.5 และ 6 อังสตรอมตามลำดับ จุดแรกแสดงให้เห็นว่ามีส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว AOT อยู่ใกล้พื้นผิวท่อานาโนคาร์บอนในบริเวณใกล้เคียงกับส่วนหางของสารลดแรงตึงผิว เนื่องจากลักษณะทางโครงสร้างของสารลดแรงตึงผิว และจุดที่สองห่างจากพื้นผิวท่อานาโนคาร์บอนโดยอยู่ถัดจากบริเวณส่วนหางของท่อานาโนคาร์บอนเป็นผลมาจากส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิวเป็นส่วนที่มีขั้วจึงอยู่ใกล้บริเวณที่มีน้ำเนื่องจากแรงไฮโดรฟิลิก โดยส่วนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อานาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และ (20,20) จะมีค่าความหนาแน่นถัดจากจุดที่มีความหนาแน่นสูงทั้ง 2 จุด เนื่องจากการเกิดไมเซลล์เหมือนในกรณีส่วนหางของสารลดแรงตึงผิว

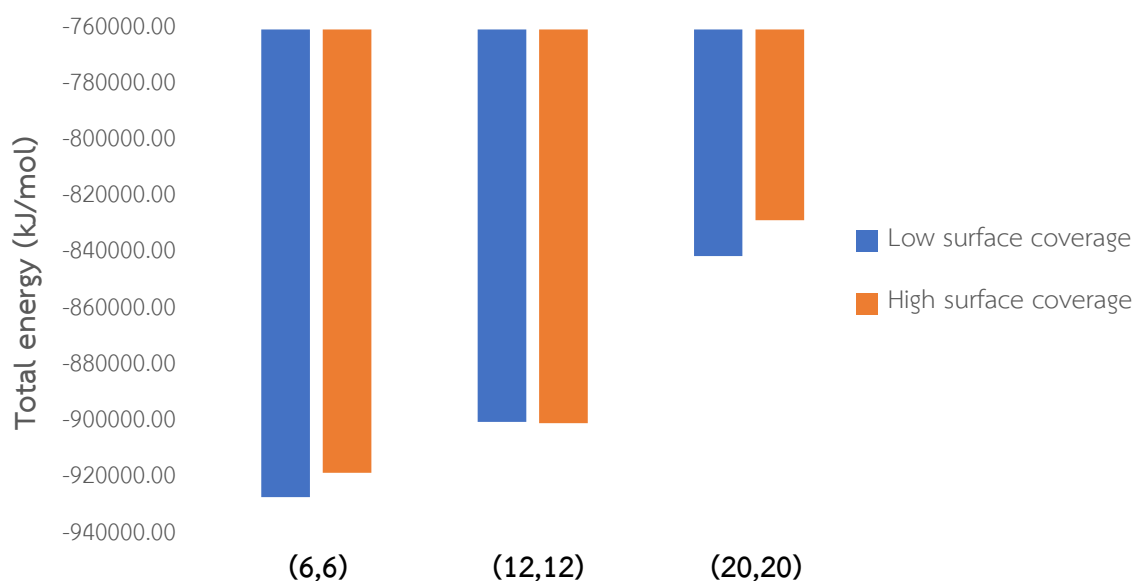
เมื่อพิจารณาแผนภูมิที่ 4.5 (c) และ 4.5 (g) ซึ่งแสดงความหนาแน่นอะตอมไฮโดรเจนไอออนพบว่าที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำท่อานาโนคาร์บอนทุกขนาดและที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อานาโนคาร์บอนขนาด (6,6) ค่าความหนาแน่นของไฮโดรเจนไอออนจะมีค่าสูงบริเวณห่างจากพื้นผิวท่อานาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 7 อังสตรอม ซึ่งถัดจากสารลดแรงตึงผิว AOT เนื่องจากไฮโดรเจนไอออนกับส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว AOT ดึงดูดกันด้วยแรงไฟฟ้าสถิต และมีความหนาแน่นเล็กน้อยในบริเวณถัดมาเกิดจากการกระจายตัวของไฮโดรเจนไอออน ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อานาโนคาร์บอนขนาด (12,12) พบว่าค่าความหนาแน่นของไฮโดรเจนไอออนยังคงมีค่าสูงบริเวณเดิมแต่ที่ถัดจากนั้นมีค่าความหนาแน่นสูงขึ้นมีสาเหตุจากการเกิดไมเซลล์ ไฮโดรเจนไอออนจึงแทรกตัวอยู่ใกล้กับส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิวที่เกิดไมเซลล์ และที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อานาโนคาร์บอนขนาด (20,20) พบว่าค่าความหนาแน่นของไฮโดรเจนไอออนมีการกระจายมาก ไฮโดรเจนไอออนจึงแทรกตัวอยู่ใกล้กับส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิวที่เกิดไมเซลล์เหมือนกับกรณีที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อานาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และกระจายตัวอยู่รอบนอก

เมื่อพิจารณาแผนภูมิที่ 4.5 (d) และ 4.5 (h) ซึ่งแสดงความหนาแน่นอะตอมของน้ำพบว่าที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำท่อานาโนคาร์บอนขนาด (6,6) มีค่าความหนาแน่นบริเวณห่างจากพื้นผิวท่อานาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 4 อังสตรอม แสดงให้เห็นว่าบริเวณดังกล่าวไม่มีสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อานาโนคาร์บอนหรือก็คือสารลดแรงตึงผิว AOT อยู่ไม่เต็มพื้นผิวของท่อานาโนคาร์บอนทำให้โมเลกุลของน้ำสามารถแทรกตัวอยู่ได้ และ

มีค่าความหนาแน่นคงที่สูงสุดบริเวณถัดจากสารลดแรงตึงผิว AOT โซเดียมไอออนห่างจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 12.5 อังสตรอม ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวด้านล่างท่อนาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และ (20,20) และที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) มีค่าความหนาแน่นคงที่สูงสุดบริเวณห่างจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 12.5 อังสตรอม ส่วนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงท่อนาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และ (20,20) จะมีค่าความหนาแน่นค่อย ๆ เพิ่มขึ้นตั้งแต่บริเวณห่างจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 12.5 อังสตรอม เนื่องจากมีบริเวณของสารลดแรงตึงผิวที่เกิดไมเซลล์ ทำให้ค่าความหนาแน่นอะตอมของน้ำต่ำ และจะมีค่าความหนาแน่นคงที่สูงสุดบริเวณห่างจากพื้นผิวท่อนาโนคาร์บอนรัศมีเท่ากับ 30 อังสตรอม

เมื่อเปรียบเทียบผลโปรไฟล์ความหนาแน่นเทียบกับสารลดแรงตึงผิว SDBS และสารลดแรงตึงผิว SDS พบว่าทางของสารลดแรงตึงผิวทั้ง 3 ชนิดจะอยู่ใกล้พื้นผิวของท่อนาโนคาร์บอน แต่โปรไฟล์ความหนาแน่นของทางสารลดแรงตึงผิว SDBS และ SDS ลักษณะของแผนภูมิค่าความหนาแน่นจะเป็นจุดยอด 1 จุด ส่วนโปรไฟล์ความหนาแน่นของทางสารลดแรงตึงผิว AOT ลักษณะของแผนภูมิค่าความหนาแน่นจะเป็นจุดยอด 1 จุดและมีค่าความหนาแน่นลดลงหลังจากนั้น ซึ่งเป็นผลมาจากโครงสร้างของสารลดแรงตึงผิวโดยสารลดแรงตึงผิว SDBS และ SDS มีโครงสร้างทาง 1 ทาง ส่วนสารลดแรงตึงผิว AOT มีทาง 2 ทาง ส่งผลให้มีค่าความหนาแน่นในส่วนที่ถัดจากจุดยอด ส่วนหัวของสารลดแรงตึงผิว และโซเดียมไอออนให้ผลที่ใกล้เคียงกันทั้ง 3 ชนิด คือ หัวของสารลดแรงตึงผิวมีทั้งส่วนที่อยู่ติดกับท่อนาโนคาร์บอนและอยู่ห่างจากท่อนาโนคาร์บอน โซเดียมไอออนจะมีการกระจายตัวตามตำแหน่งของส่วนหัวและรอบ ๆ ระบบ

4.4 พลังงานรวมของระบบ (Total energy)



แผนภูมิที่ 4.1 แสดงพลังงานรวมของระบบที่เกิดจากการดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) (12,12) และ (20,20) ที่สภาวะสมดุลที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวต่ำ (สีฟ้า) ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง (สีส้ม)

พลังงานรวมของระบบเป็นพลังงานรวมที่เกิดจากพันธะและที่ไม่ได้เกิดจากการสร้างพันธะระหว่างอะตอม พลังงานที่ได้จากพันธะได้แก่ พันธะโควาเลนต์ มุมระหว่างพันธะ และการบิดตัวของโมเลกุล พลังงานที่ไม่ได้เกิดจากการสร้างพันธะระหว่างอะตอมได้แก่ แรงแวนเดอร์วาลส์ และแรงระหว่างประจุ

สารลดแรงตึงผิว AOT ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวต่ำท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) ที่สภาวะสมดุลมีค่าเฉลี่ยเท่ากับ -926,387.92 กิโลจูลต่อโมล (12,12) ที่สภาวะสมดุลมีค่าเฉลี่ยเท่ากับ -899,552.09 กิโลจูลต่อโมล และ (20,20) ที่สภาวะสมดุลมีค่าเฉลี่ยเท่ากับ -840,561.94 กิโลจูลต่อโมล ที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูง ขนาดท่อนาโนคาร์บอน (6,6) ที่สภาวะสมดุลมีค่าเฉลี่ยเท่ากับ -917,720.83 กิโลจูลต่อโมล (12,12) ที่สภาวะสมดุลมีค่าเฉลี่ยเท่ากับ -900,056.73 กิโลจูลต่อโมล และ (20,20) ที่สภาวะสมดุลมีค่าเฉลี่ยเท่ากับ -827,802.46 กิโลจูลต่อโมล

จากแผนภูมิเป็นการอธิบายข้อมูลเชิงลึกของกระบวนการดูดซับลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอนโดยแสดงผลเป็นค่าพลังงาน (potential energy) ซึ่งแสดงถึงพลังงานรวมทั้งหมดของระบบพบว่าค่าพลังงานของระบบท่อนาโนคาร์บอน (6,6) ทั้งค่าการปกคลุมพื้นผิวดำและสูงมีค่าน้อยที่สุดแสดงถึงสถานะที่สามารถเกิดขึ้นได้ดีที่สุด ตามด้วยพลังงานของระบบท่อนาโนคาร์บอน (12,12) และค่าพลังงานของระบบท่อนาโนคาร์บอน (20,20) ที่มีค่ามากที่สุด โดยค่าพลังงานรวมสามารถนำไปใช้ในการคำนวณเพื่อหาพลังงานยึดเหนี่ยว (binding energy, $E_{binding}$) ได้จากสมการ

$$E_{binding} = E_{total} - (E_{CNT} + E_{water} + NE_{surfactant})$$

เมื่อ

E_{total} คือ พลังงานรวมของระบบที่สภาวะสมดุล

E_{CNT} , E_{water} และ $E_{surfactant}$ คือ พลังงานที่น้อยที่สุดของโมเลกุลท่อนาโนคาร์บอน โมเลกุลน้ำ และสารลดแรงตึงผิว ตามลำดับ ที่ยังไม่เกิดการดูดซับหรือมีปฏิสัมพันธ์กันในระบบ

N คือ จำนวนโมเลกุลสารลดแรงตึงผิวในระบบ

บทที่ 5

สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการทดลอง

โครงการวิจัยศึกษาการดูดซับสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอน โดยใช้การวิเคราะห์พลวัตเชิงโมเลกุลสร้างแบบจำลองที่ศึกษาประกอบด้วยท่อนาโนคาร์บอน สารลดแรงตึงผิว AOT โซเดียมไอออน และน้ำ 6 ระบบ โดยศึกษาค่าการปกคลุมพื้นผิวดำและสูงบนท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) (12,12) และ (20,20) ผลที่ได้ ได้แก่ ภาพจำลองการดูดซับสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาโนคาร์บอน ผลการคำนวณความหนาแน่น 2 มิติ การคำนวณรูปแบบความหนาแน่น และพลังงานรวมของระบบ จากผลการทดลองดังกล่าวพบว่าพฤติกรรมของสารลดแรงตึงผิว AOT จะดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนโดยที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวดำท่อนาโนคาร์บอนทุกขนาดและที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงที่ท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) สารลดแรงตึงผิวจะปกคลุมท่อนาโนคาร์บอนแบบชั้นเดียว (monolayer) ส่วนที่ค่าการปกคลุมพื้นผิวสูงในกรณีของท่อนาโนคาร์บอนขนาด (12,12) และ (20,20) จะเป็นแบบหลายชั้น (multilayer) เนื่องจากสารลดแรงตึงผิว AOT มีเกิดการรวมตัวกันเป็นไมเซลล์ (micelle) บนท่อนาโนคาร์บอน พลังงานของระบบมีแนวโน้มสูงขึ้นตามขนาดของท่อนาโนคาร์บอนและจำนวนของสารลดแรงตึงผิว จากลักษณะที่กล่าวมาสารลดแรงตึงผิว AOT สามารถดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนได้และสามารถใช้เป็นตัวเลือกในศึกษาและพัฒนาการประยุกต์ใช้ในการเพิ่มการผลิตน้ำมัน (enhanced oil recovery)

5.2 ข้อเสนอแนะ

- 5.2.1 การใช้ศึกษาตัวแปรอื่น ๆ ที่น่าจะมีผลต่อการดูดซับสารลดแรงตึงผิวบนท่อนาโนคาร์บอน เช่น ชนิดของไอออน
- 5.2.2 คำนวณค่าพลังงานยึดเหนี่ยว (binding energy) เพื่ออธิบายผลของการดูดซับในเชิงลึก

5.2.3 ศึกษาสารลดแรงตึงผิว AOT ที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนบริเวณระหว่างผิวสัมผัสระหว่างน้ำมันกับน้ำเพื่อดูพฤติกรรมการปลดปล่อย (desorption) ที่เกิดขึ้น

ภาคผนวก

1. ตัวอย่างการคำนวณหาเส้นผ่านศูนย์กลางท่อนาโนคาร์บอน

ท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6)

$$n = 6 \text{ และ } m = 6$$

จากสมการ

$$D = \frac{a}{\pi} \sqrt{(n^2 + nm + m^2)} \quad nm = 78.3 \sqrt{((n + m)^2 - nm)} \text{ pm}$$

$$a = 0.246 \text{ nm}$$

$$D = \frac{0.246}{\pi} \sqrt{(6^2 + (6)(6) + 6^2)} = 0.814 \text{ nm}$$

ดังนั้นเส้นผ่านศูนย์กลางท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) เท่ากับ 0.814 นาโนเมตร

2. ตัวอย่างการคำนวณหาพื้นที่ผิวท่อนาโนคาร์บอน

สมการพื้นที่ผิวข้างของทรงกระบอก

$$A = 2\pi rL = \pi DL$$

ท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) มีเส้นผ่านศูนย์กลางเท่ากับ 0.814 นาโนเมตร และมีความยาวเท่าขนาด

กล่อ่งจำลองคือ 7.133 นาโนเมตร

$$A = \pi(0.814)(7.133) = 18.236 \text{ nm}^2$$

ดังนั้นพื้นที่ผิวท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) เท่ากับ 18.236 ตารางนาโนเมตร

3. ตัวอย่างการคำนวณหาจำนวนสารลดแรงตึงผิว AOT

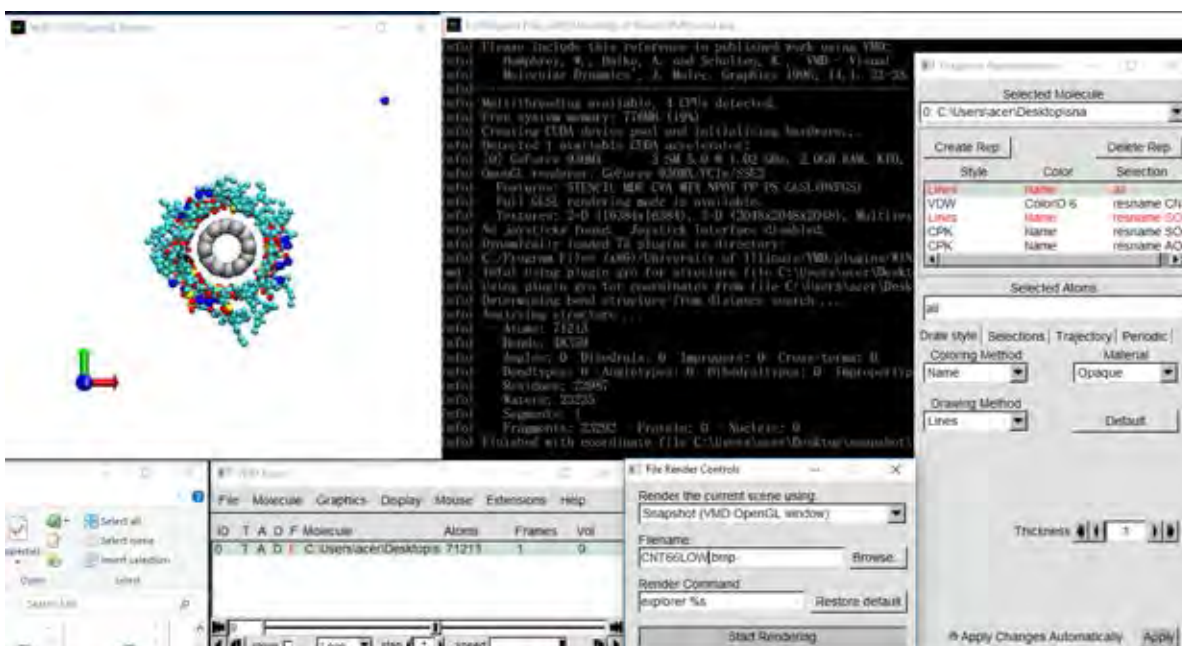
ค่าการปกคลุมพื้นผิวต่ำของสารลดแรงตึงผิว AOT บนท่อนาकार์บอนเท่ากับ 0.65-0.66

nm²/headgroup ท่อนาकार์บอนขนาด (6,6) เท่ากับ 18.236 ตารางนาโนเมตร

$$AOT = \frac{\text{พื้นที่ผิวท่อนาकार์บอน}}{\text{ค่าการปกคลุมพื้นผิว}} = \frac{18.236}{0.65} \approx 28$$

ดังนั้นจำนวนสารลดแรงตึงผิว AOT เท่ากับ 28 ตัว

4. ตัวอย่างทำรูปแสดงแบบจำลอง



รูปที่ 1 แสดงตัวอย่างทำรูปแสดงแบบจำลอง

5. ตัวอย่างคำสั่งที่ใช้ทำความหนาแน่น 2 มิติ

แสดงตัวอย่างในระบบที่ 6 โดยทำความหนาแน่น 2 มิติของสารลดแรงตึงผิว AOT

- gmx_mpi densmap -f init.xtc -s init.tpr -n index.ndx -o densmapAOTdm60.xpm -dmin 0 -dmax 60


```

fprintf('Read frame %d \n',a);
tline = fgetl(fid); %line1
fileid = tline(1:16);
frame = 1 + frame;
tline = fgetl(fid); %line2
natom = str2double(tline(11:20)); step(a) =
str2double(tline(28:38));
time(a) = str2double(tline(45:56)); prec(a) =
str2double(tline(65:74));
eval = fgetl(fid);%line3
Genbox = eval;
tline = fgetl(fid); xaxit = str2double(tline(19:30));%line4
tline = fgetl(fid); yaxit = str2double(tline(33:44));%line5
tline = fgetl(fid); zaxit = str2double(tline(47:58));%line6
BOX = zeros(3,1); %genbox
    BOX(1,1) = xaxit;
    BOX(2,1) = yaxit;
    BOX(3,1) = zaxit;
%loop for read coordination
eval = fgetl(fid); %line7
counter = 1;
while ~feof(fid) % navigate through the rest of the file
    if counter > natom, break; end
    tline = fgetl(fid);
    atomid = str2double(tline(9:13));
    TYPE = tline(9:13);
    TYPE= TYPE(~isspace(TYPE));
    for i = 1: ntypes
        if strcmp(TYPES(i), '') == 1
            TYPES{i} = TYPE;
            current_type = i;
            break;
        elseif strcmp(TYPES(i), TYPE) == 1
            current_type = i;
            break;
        end
    end
    x = str2double(tline(17:28));
    y = str2double(tline(30:42));
    z = str2double(tline(44:56));

```

```

COORDINATES(a,counter,1) = atomid+1;
COORDINATES(a,counter,2) = x;
COORDINATES(a,counter,3) = y;
COORDINATES(a,counter,4) = z;
counter = counter +1;

end
a = a+1;
end
msgbox('File read into COORDINATES');

%define values for calculation
radius=13.56269;  box=10*BOX;
nbin=200;  delr=max(box)/(sqrt(2)*nbin);
CNT=2320;
AOT=184;
SOD=184;
SOL=18185;
%define VG-coordinate
VGA = zeros(nbin,totframe); vgA = zeros(nbin,1);
VGH = zeros(nbin,totframe); vgH = zeros(nbin,1);
VGC = zeros(nbin,totframe); vgC = zeros(nbin,1);
VGS = zeros(nbin,totframe); vgS = zeros(nbin,1);
VGW = zeros(nbin,totframe); vgW = zeros(nbin,1);
VGT = zeros(nbin,totframe); vgT = zeros(nbin,1);
gA = zeros(nbin,1); gC = zeros(nbin,1); gH = zeros(nbin,1);
gS = zeros(nbin,1); gW = zeros(nbin,1);
%loop for calculation
b=1;
while b <= totframe
    fprintf('Run loopping %d\n',b);
    ii=1;  aa=1;  bb=1;  cc=1;
    ig=1:1:200;
    gA(ig)=0;  gC(ig)=0;
    gH(ig)=0;  gW(ig)=0;  gS(ig)=0;
    while ii<=natom
        %Calculation for AOT
        if ii<=(AOT*28)
            jj=ii;
            k=rem(jj,28);
            if k >= 1 && k <= 12
                xr=(COORDINATES(b,ii,2)*10)-((xaxit*10)/2);

```



```

        yr=(COORDINATES(b,ii,3)*10)-((yaxit*10)/2);
        r=sqrt(xr^2+yr^2);
        r=r-radius;
        ig=round(r/delr);
        gA(ig)=gA(ig)+1;
    end
elseif k >= 13 && k <= 16
    xr=(COORDINATES(b,ii,2)*10)-((xaxit*10)/2);
    yr=(COORDINATES(b,ii,3)*10)-((yaxit*10)/2);
    r=sqrt(xr^2+yr^2);
    r=r-radius;
    ig=round(r/delr);
    gH(ig)=gH(ig)+1;
end
elseif k >= 17 && k < 28
    xr=(COORDINATES(b,ii,2)*10)-((xaxit*10)/2);
    yr=(COORDINATES(b,ii,3)*10)-((yaxit*10)/2);
    r=sqrt(xr^2+yr^2);
    r=r-radius;
    ig=round(r/delr);
    gC(ig)=gC(ig)+1;
end
elseif k == 0
    xr=(COORDINATES(b,ii,2)*10)-((xaxit*10)/2);
    yr=(COORDINATES(b,ii,3)*10)-((yaxit*10)/2);
    r=sqrt(xr^2+yr^2);
    r=r-radius;
    ig=round(r/delr);
    gC(ig)=gC(ig)+1;
end

end

if k == 0
    aa=aa+1;
end

ii=ii+1;
%Calculation for SOD
elseif ii >= (AOT*28+1) && ii <= (AOT*28+SOD)
    xr=(COORDINATES(b,ii,2)*10)-((xaxit*10)/2);
    yr=(COORDINATES(b,ii,3)*10)-((yaxit*10)/2);
    r=sqrt(xr^2+yr^2);
    r=r-radius;

```

```

        ig=round(r/delr);
        gS(ig)=gS(ig)+1;
        %fprintf('SOD\t %d\t %d\n',b,ig)
        bb=bb+1;
        ii=ii+1;
%Calculation for CNT
        elseif ii >= (AOT*28+SOD+1) && ii <= (CNT+AOT*28+SOD+1)
            ii=ii+1;
%Calculation for SOL
        elseif ii >= (CNT+AOT*28+SOD+1) && ii<=natom
            xr=(COORDINATES(b,ii,2)*10)-((xaxit*10)/2);
            yr=(COORDINATES(b,ii,3)*10)-((yaxit*10)/2);
            r=sqrt(xr^2+yr^2);
            r=r-radius;
            ig=round(r/delr);
            gW(ig)=gW(ig)+1;
            cc=cc+1;
            ii=ii+1;
        end
end
%Calculation density
fprintf('Calculating %d\n',b);
m=1;
while m<=nbin
    vb=pi*abs((delr*m+radius)^2-(delr*(m-1)+radius)^2)*zaxit*10;
    vgA(m)=gA(m)/(12*vb);
    VGA(m,b)= vgA(m);
    vgH(m)=gH(m)/(4*vb);
    VGH(m,b)= vgH(m);
    vgC(m)=gC(m)/(12*vb);
    VGC(m,b)= vgC(m);
    vgS(m)=gS(m)/vb;
    VGS(m,b)= vgS(m);
    vgW(m)=gW(m)/(3*vb);
    VGW(m,b)= vgW(m);
    vgT(m)=vgA(m)+vgC(m);
    VGT(m,b)=vgT(m);
    m=m+1;
end
%Write data into new file
fprintf('Writing %d\n',b);

```

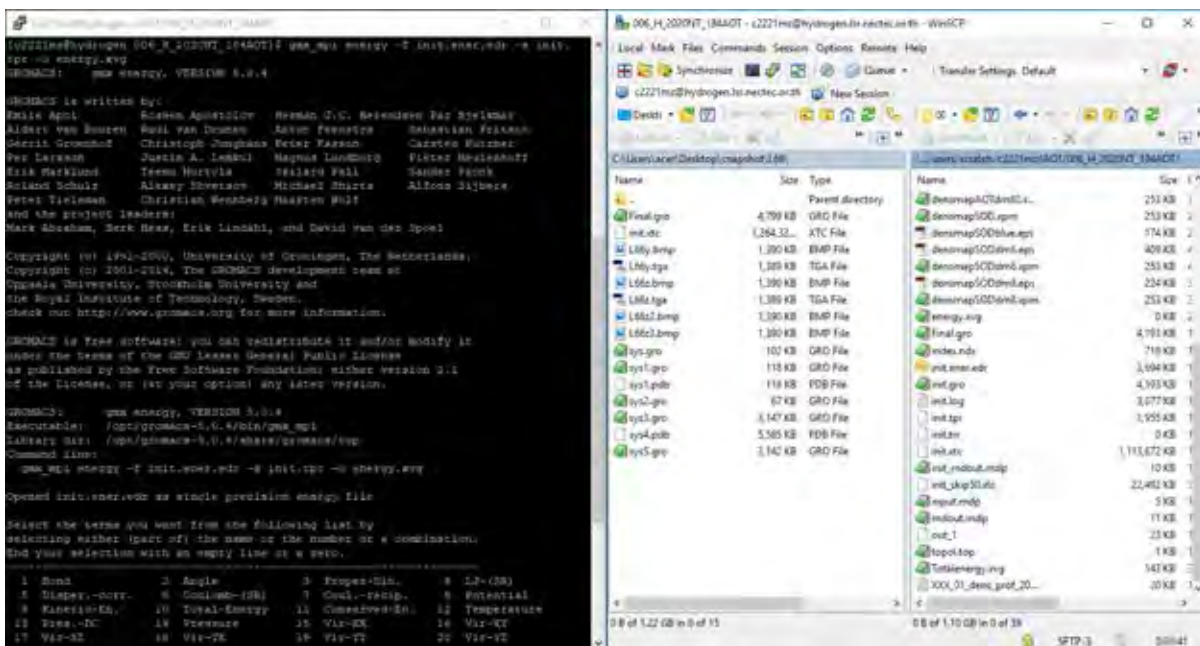
```

        name = b;
    b=b+1;
end
%msgbox('File write into COORDINATES and value');
mVGA=mean(VGA,2);
mVGH=mean(VGH,2);
mVGC=mean(VGC,2);
mVGS=mean(VGS,2);
mVGW=mean(VGW,2);
mVGT=mean(VGT,2);
%Plot average graph
n=1:1:200;
n=n*delr;
%Write average data into new file
fid=fopen('Average.txt','w');
fprintf(fid,'Average density of all frames\n');
fprintf(fid,'bin\t radius\t taill\t head\t tail2\t sodium\t
taill&2\t water\n');
for av=1:nbin
    n=av*delr;
    aver=sprintf('%5d \t %10.5f \t %10.5f \t %10.5f \t %10.5f \t
%10.5f \t %10.5f \t %10.5f
\n',av,n,mVGA(av),mVGH(av),mVGC(av),mVGS(av),mVGT(av),mVGW(av));
    fprintf(fid,aver);
end
fclose(fid);
msgbox('Write all file end');

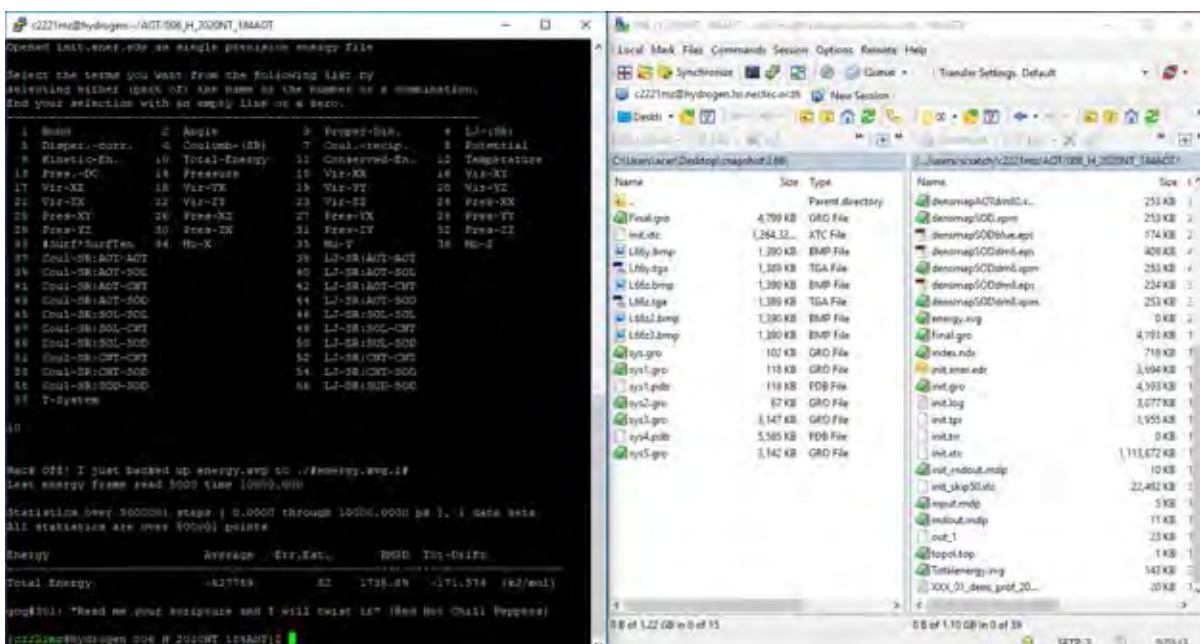
```

7. ตัวอย่างคำสั่งที่ใช้ทำรูปแบบพลังงาน

- gmx_mpi energy -f init.ener.edr -s init.tpr -o energy.xvg



รูปที่ 5 แสดงตัวอย่างใช้คำสั่ง gmx energy



รูปที่ 6 แสดงตัวอย่างเลือกรูปแบบพลังงาน

เอกสารอ้างอิง

1. Chen, C.; Wang, S.; Kadhum, M. J.; Harwell, J. H.; Shiao, B.-J., Using Carbonaceous Nanoparticles as Surfactant Carrier in Enhanced Oil Recovery: A Laboratory Study. *Fuel* **2018**, *222*, 561-568.
2. เทคนิคการผลิตน้ำมันดิบ. [online].Available from:<http://www.bangkokbiznews.com/blog/detail/634925> (accessed 19 เมษายน 2562).
3. การผลิตน้ำมันดิบ. [online].Available from:<https://dmf.go.th/public/list/data/index/-menu/670/page/1/searchindex/T> (accessed 19 เมษายน 2562).
4. Srisuriyachai, Y. V. a. F. Reducution of Surfactant Adsorption by Alkaline Substances in Carbonate Reservoir. Thesis, Chulalongkorn University, 2016.
5. Ngo, I. H. Effects of Reversibility of Surfactant Adsorption on Surfactant Flooding. Thesis, Chulalongkorn University, Chulalongkorn University, 2015.
6. สารลดแรงตึงผิว. [online].Available from: <https://th.wikipedia.org/wiki/สารลดแรงตึงผิว>. (accessed 19 เมษายน 2562).
7. วิชา สารลดแรงตึงผิว. [online].Available from: <http://www.chemtrack.org/News-Detail.asp?TID=4&ID=3> (accessed 19 เมษายน 2562)..
8. Som I., B. K. a. M. Y., Status of Surfactants as Penetration Enhancers in Transdermal Drug Delivery. *Journal of Pharmacy and Bioallied Science* **2011**, *4*, 2-9.
9. ประกาศกระทรวงอุตสาหกรรม. [online].Available from:<http://www.ratchakitcha.soc.go.th/DATA/PDF/2552/E/150/15.PDF> (accessed 1 พฤษภาคม 2562).
10. สุวัฒน์มาลา. The Doping of Carbon Nanotubes with Boron and Nitrogen for Applications in Gas Sensor and Water Treatment. มหาวิทยาลัยบูรพา.
11. สถาพร ท่อนานคาร์บอน. [online].Available from:<https://www.rsu.ac.th/engineer/che/news/News%20Data/ท่อนานคาร์บอน.pdf> (accessed 19 เมษายน 2562).
12. พัฒนา กระบวนการดูดซับ. [online].Available from:<https://pradthana.wordpress.com/2008/04/13/adsorption-process/> (accessed 19 เมษายน 2562).
13. Kamal, M. S.; Hussein, I. A.; Sultan, A. S., Review on Surfactant Flooding: Phase Behavior, Retention, Ift, and Field Applications. *Energy & Fuels* **2017**, *31*, 7701-7720.
14. Suttipong, M.; Striolo, A., Equimolar Mixtures of Aqueous Linear and Branched Sdbs Surfactant Simulated on Single Walled Carbon Nanotubes. *RSC Advances* **2015**, *5*, 90049-90060.

15. Tummala, N. R.; Striolo, A., Sds Surfactants on Carbon Nanotubes: Aggregate Morphology. *ACS Nano* **2009**, *3*, 595-602.
16. Suttipong, M.; Tummala, N. R.; Kitiyanan, B.; Striolo, A., Role of Surfactant Molecular Structure on Self-Assembly: Aqueous Sdbs on Carbon Nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry C* **2011**, *115*, 17286-17296.
17. Vu, T. V.; Papavassiliou, D. V., Modification of Oil–Water Interfaces by Surfactant-Stabilized Carbon Nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry C* **2018**, *122*, 27734-27744.