

**ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์** การศึกษาเชิงทฤษฎีของฟังก์ชันนอไลเซชันของพื้นผิวผ้าไหมบอมบิกซ์มอริที่ปรับสภาพด้วยพลาสมาซัลเฟอร์เฮกซะฟลูออไรด์

**ผู้เขียน** นางสาวผดุงศรี คำฮ้อย

**ปริญญา** วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (เคมี)

**คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์** ผศ.ดร.ปิยรัตน์ นิมมานพิภักดิ์ ประธานกรรมการ  
ดร.วรรณจันทร์ แสงหิรัญ ธี กรรมการ

**บทคัดย่อ**

การคำนวณกลศาสตร์ควอนตัมและการจำลองเชิงพลวัต ถูกนำมาใช้เพื่ออธิบายการเปลี่ยนแปลงเชิงเคมีของพื้นผิวผ้าไหมบอมบิกซ์มอริ ที่เกิดปฏิกิริยากับฟลูออรีนในขบวนการอาบด้วยพลาสมาของซัลเฟอร์เฮกซะฟลูออไรด์ แบบจำลองพื้นผิวผ้าไหมโพลี(ไกลซีน-อะลานีน)ที่ผ่านฟลูออรีนในพลาสมาจำลองโดยการคำนวณพลวัต กลไกการเกิดปฏิกิริยาดังกล่าวศึกษาโดยใช้การ

คำนวณกลศาสตร์ ผลลัพธ์สนับสนุนโอกาสการดึงไฮโดรเจนได้ทั้งจากที่อะตอมไนโตรเจนหรือคาร์บอน และพบว่าโมเลกุลของน้ำเกาะบนพื้นผิวของไหมที่อาบด้วยพลาสมาน้อยกว่าไหมที่ไม่อาบพลาสมา

<b>Thesis Title</b>	Theoretical Study of the Functionalization of <i>Bombyx mori</i> Silk Surface Treated by Sulphur Hexafluoride Plasma
<b>Author</b>	Ms.Padungsee Komhoi
<b>Degree</b>	Master of Science (Chemistry)
<b>Thesis Advisory Committee</b>	Asst.Prof.Dr. Piyarat Nimmanpipug Chairperson Dr.Vannajan Sanghiran Lee Member

### ABSTRACT

Quantum calculation and molecular dynamics simulation were used to clarify chemical modification of *Bombyx mori* silk reacting with energetic fluorine in sulphur hexafluoride plasma treatment process. The silk surface model poly(Glycine-Alanine), exposing to fluorine in plasma was simulated via molecular dynamics calculation. Reaction pathways were investigated using quantum calculation. The result supports the possibility of H abstraction from both nitrogen and carbon atoms and water molecules are attracted to the plasma treatment silk surface less than untreated one.