

# พลิกศาสตร์ดิมิตและสารประกอบแบบจำลองสำหรับพอลิเมอร์

Chemical Crystallography and Model Compounds for Polymers

มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

เขียนโดย: ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ปิยรัตน์ นิมมานพิภักดิ์

# สารบัญ

	หน้า
1. นิยามสารประกอบแบบจำลอง	1
1.1 สารประกอบแบบจำลองในบริบทการจำลองโครงสร้างพอลิเมอร์	
1.2 สารประกอบแบบจำลองในบริบทการออกแบบด้วยวิธีทางคอมพิวเตอร์	
2. ระบบผลึกและการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์	2
2.1 แกนผลึกและแลตทิซส่วนกลับ	
2.2 การกระจายของรังสีเอกซ์	
2.2.1 การกระจายของรังสีเอกซ์ อะตอม โมเลกุล และผลึก	
2.2.2 แนวคิดของ Max von Laue, William Henry และ William Lawrence Bragg และ Paul Peter Ewald	
2.2.3 การหาค่าคงที่แลตทิซและหมู่ปริภูมิ	
3. แบบจำลองโมเลกุล แบบจำลองโครงสร้างผลึก และการหาพารามิเตอร์ของอะตอม	20
3.1 ความยาวพันธะ มุมพันธะ และมุมจากการหมุนภายในโครงสร้าง	
3.2 สมการสำหรับพารามิเตอร์เชิงโครงสร้าง	
3.3 การประยุกต์ใช้การคำนวณพลังงาน	
4. วิธีอนุกรมฟูเรียร์ในการหาโครงสร้างผลึกและการทำรีไฟเมนต์	28
4.1 การหาโครงสร้างด้วยวิธีแพทเทอชัน	
4.1.1 วิธีอะตอมหนัก (Heavy atom method)	
4.1.2 วิธีหาแบบแพทเทอชัน (Patterson search method)	
4.2 การหาโครงสร้างด้วยวิธีตรง (Direct method)	

# สารบัญ

---

	หน้า
5. พอลิเมอร์ที่มีความเป็นผลึก	40
5.1 พอลิเอทิลีน (Polyethylene)	
5.2 พอลิเตตราฟลูออโรเอทิลีน (Polytetrafluoroethylene) และพอลิเมอร์ที่เกี่ยวข้อง	
5.3 พอลิโอเลฟิน (Poly- $\alpha$ -olefins)	
5.3.1 Isotactic polymer	
5.3.2 Diisotactic polymer	
5.3.3 Syndiotactic polymer	
5.4 พอลิเมอร์แบบไวนิล (Vinyl polymer)	
5.5 พอลิเมอร์แบบไวนิไลด์ีน (Vinylidene polymer)	
5.6 พอลิเมอร์ที่มีพันธะคู่	
5.7 พอลิอีเทอร์ (Polyether)	
5.8 พอลิไทโออีเทอร์ (Polythioether)	
5.9 พอลิเอสเทอร์ (Polyester)	
5.9.1 พอลิเอสเทอร์แบบโซ่ตรง (Aliphatic polyester)	
5.9.2 พอลิเอสเทอร์แบบมีวงอะโรมาติก (Aromatic polyester)	
5.10 พอลิเอไมด์ (Polyamide)	
5.10.1 พอลิเอไมด์แบบโซ่ตรง (Aliphatic polyamide)	
5.10.2 พอลิเอไมด์แบบมีวงอะโรมาติก (Aromatic polyamide)	
6. กรณีศึกษาการใช้สารประกอบแบบจำลองเพื่อการทำนาย คุณลักษณะของพอลิเมอร์	51