

การศึกษาการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์ชนิดพอลิเมอร์ สำหรับวัดไอระเหยในข้าว

The study of the response of polymer-based gas sensor for volatile detection in rice

พนิดา หล่อวงศ์ตระกูล^{1*}

Panida Lorwongtragool^{1*}

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์ซึ่งผลิตจากวัสดุผสมของท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังหลายชั้นและพอลิ (2-อะคริลาไมด์-2-เมทิล-1-โพรพานีสัลโฟนิค แอซิด-โค-อะคริโลไนไตรล์) (MWCNT/PAMPA-co-A) โดยแบ่งการศึกษาออกเป็น 2 ส่วน คือ (1) การศึกษาการตอบสนองเชิงไฟฟ้าของเซ็นเซอร์เมื่อทดสอบด้วยไอระเหยกลิ่นข้าวในระบบไดนามิกส์ของเครื่องจุลกลีททรอนิกส์ และ (2) การศึกษาในเชิงทฤษฎีโดยใช้แบบจำลองเชิงโมเลกุลเพื่อเข้าใจการทำงานของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A เมื่อมีโมเลกุลของไอระเหยกลิ่นข้าวเข้าทำอันตรกิริยา ได้แก่ โมเลกุลของ 2-อะเซทิล-1-ไพโรลีน (2-AP) และโมเลกุลของเฮกซานาล ผลการศึกษาการตอบสนองต่อไอระเหยกลิ่นข้าวพบว่า เซ็นเซอร์ที่ผลิตขึ้นนั้นให้การตอบสนองต่อกลิ่นข้าวหอมมะลิได้ดีกว่าข้าวขาวอย่างมีนัยสำคัญ ซึ่งอาจจะบ่งชี้ถึงปริมาณไอระเหยรวมของข้าวหอมมะลิที่มีปริมาณสูงกว่าข้าวขาวนั่นเอง และผลจากการศึกษาด้วยวิธีพลวัตโมเลกุลและการวิเคราะห์การกระจายตัวของโมเลกุลกลืนรอบๆ พอลิเมอร์ พบว่าตำแหน่งของไฮโดรเจนอะตอมบนหมู่ไฮดรอกซิลของพอลิเมอร์เป็นตำแหน่งทำงานหลักที่สามารถเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลเฮกซานาลได้ดีกว่าโมเลกุล 2-AP จากผลการศึกษาจึงเป็นแนวทางในการออกแบบและพัฒนาวัสดุเซ็นเซอร์เพื่อเพิ่มการตอบสนองต่อกลิ่นข้าวที่สูงขึ้นในอนาคต โดยการเพิ่มจำนวนหน่วยซ้ำของโครงสร้างของพอลิ (2-อะคริลาไมด์-2-เมทิล-1-โพรพานีสัลโฟนิค แอซิด) จะสามารถเพิ่มหมู่ฟังก์ชันทำงานซึ่งจะนำไปสู่การตอบสนองต่อไอระเหยกลิ่นข้าวที่สูงขึ้นนั่นเอง

คำสำคัญ: ก๊าซเซ็นเซอร์ ข้าวหอมมะลิ พลวัตโมเลกุล 2-อะเซทิล-1-ไพโรลีน เฮกซานาล

Abstract

The objective of this research was to investigate the response of polymer-based gas sensor for volatile detection in rice. A sensor was fabricated from composite materials between multi-walled carbon nanotubes and poly (2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid-co-acrylonitrile) (MWCNT/PAMPA-co-A) based on screen printing technique. This experiment was divided into 2 parts: (1) to study on the electrical responses of the

¹ คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลสุวรรณภูมิ นนทบุรี 11000

¹ Faculty of Science and Technology, Rajamangala University of Technology Suvarnabhumi, Nonthaburi 11000

* Corresponding author. E-mail: panida.l@rmutsb.ac.th

fabricated sensor when exposed to rice vapors in the dynamic system of an electronic nose and (2) to study on molecular interactions between PAMPA-co-A and rice aroma compounds such as 2-acetyl-1-pyrroline (2-AP) and hexanal using molecular simulation. The results showed that the sensor was significantly more responsive to jasmine rice than white rice aroma. This may imply that the jasmine rice contains larger amount of total volatile compounds than the white rice. The results based on theoretical study using molecular dynamics simulation (MD) and radial distribution function (RDF) indicated that the position of hydrogen atoms on the hydroxyl group of polymers as a main active site could interact with hexanal molecules better than 2-AP molecules. In this work, it may be used as a guideline for research and development of sensing materials based on PAMPA-co-A to increase the sensing response to rice aroma compounds in the future by increasing of the number of repeating monomer unit of poly (2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid), and the number of the active site is consequently increased as well as sensor response to rice aroma compounds.

Keywords: gas sensor, jasmine rice, molecular dynamics, 2-acetyl-1-pyrroline, hexanal

บทนำ

ประเทศไทยเป็นหนึ่งในประเทศที่มีแหล่งการผลิตข้าวหอมมะลิคุณภาพสูงและมีชื่อเสียงเป็นที่ยอมรับไปทั่วโลก ปัจจุบันประเทศไทยยังคงเป็นผู้ส่งออกข้าวหอมมะลิรายใหญ่ของโลก ดังนั้นในหลายๆ ประเทศพยายามพัฒนาปรับปรุงพันธุ์ข้าวเพื่อให้ได้ข้าวที่มีความหอมทัดเทียมกับข้าวหอมมะลิของไทยเพื่อลดการนำเข้า ปัญหาการปลอมปนของข้าวพันธุ์อื่นๆ จึงเป็นหนึ่งในปัญหาที่น่าวิตก อีกทั้งยังเป็นการลดคุณภาพของข้าวและความน่าเชื่อถือในการส่งออก ปัจจุบันการตรวจสอบที่สามารถยืนยันพันธุ์ข้าวและเป็นที่ยอมรับมีเพียงวิธีการตรวจดีเอ็นเอของข้าวเท่านั้น โดยการตรวจดังกล่าวมีห้องปฏิบัติการเพียงไม่กี่ที่ที่สามารถทำการตรวจสอบและเป็นที่ยอมรับ นอกจากนี้ยังต้องใช้ระยะเวลาในการตรวจสอบที่นานและมีค่าใช้จ่ายในการวิเคราะห์ที่สูง

ในงานวิจัยนี้สนใจเทคนิคการตรวจวัดกลิ่น

ด้วยก๊าซเซ็นเซอร์บนหลักการของเครื่องจมูกอิเล็กทรอนิกส์ (electronic nose, e-nose) ซึ่งเป็นวิธีที่กลุ่มนักวิจัยหลายๆ กลุ่มเริ่มสนใจและเริ่มมีการศึกษามากขึ้น (Zheng et al., 2009; Abdullah et al., 2011; Jana et al., 2011; Lorwongtragool, & Kerdcharoen, 2015) การทำงานของจมูกอิเล็กทรอนิกส์อาศัยหลักการของการประมวลผลข้อมูลในลักษณะการจดจำรูปแบบ (pattern recognition) ของสัญญาณที่ได้จากการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์อาร์เรย์ (gas sensor array) ต่อไอระเหยของกลิ่น โดยแต่ละก๊าซเซ็นเซอร์ที่นำมาเป็นส่วนหนึ่งของเซ็นเซอร์อาร์เรย์นั้นควรจะต้องมีการตอบสนองแบบไม่จำเพาะ (non-selective) ต่อไอระเหยเพื่อที่จะสามารถเกิดรูปแบบของสัญญาณแบบต่างๆ ตามแต่ชนิดของไอระเหย (Hines, Boilot, Gardner, & Gongora, 2003) ในงานวิจัยที่ใช้ระบบจมูกอิเล็กทรอนิกส์ในการประยุกต์เพื่อตรวจวัดกลิ่นของข้าวที่ผ่านมา มักพบเห็นการใช้ก๊าซเซ็นเซอร์จำพวกโลหะออกไซด์

และก๊าซเซ็นเซอร์จำพวกพอลิเมอร์ เนื่องจากเซ็นเซอร์เหล่านี้สามารถให้การตอบสนองต่อไอรยะเหยได้หลากหลายและสามารถนำเอาข้อมูลเหล่านั้นสร้างเป็นรูปแบบที่มีความจำเพาะต่อกลิ่นของไอรยะเหยได้ อย่างไรก็ตามในงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการพัฒนาเซ็นเซอร์ตรวจจับไอรยะเหยในข้าว ยังไม่พบงานวิจัยใดที่ทำการศึกษากลไกการเกิดอันตรกิริยาของวัสดุเซ็นเซอร์ต่อไอรยะเหยของข้าวด้วยวิธีการจำลองเชิงโมเลกุล ซึ่งการศึกษาด้วยวิธีการคำนวณเชิงทฤษฎีนั้น นอกจากจะสามารถทำความเข้าใจถึงกลไกการตอบสนองของวัสดุเซ็นเซอร์ต่อโมเลกุลไอรยะเหยได้แล้ว ยังสามารถเป็นแนวทางในการพัฒนาวัสดุเซ็นเซอร์เพื่อให้เกิดการตอบสนองต่อไอรยะเหยของกลิ่นมากขึ้นหรือใช้เป็นข้อมูลในการพิจารณาเลือกชนิดของเซ็นเซอร์ที่จะใช้เป็นส่วนหนึ่งของเซ็นเซอร์อาร์เรย์ภายในระบบจมูกอิเล็กทรอนิกส์เพื่อให้เหมาะสมกับประเภทของไอรยะเหยที่จะนำมาตรวจวัด ด้วยเหตุดังกล่าวการศึกษาดูด้วยแบบจำลองเชิงโมเลกุลจึงถูกหยิบยกมาเป็นเครื่องมือสำหรับการทำความเข้าใจการทำงานของพอลิเมอร์ซึ่งใช้เป็นวัสดุเซ็นเซอร์ในงานวิจัยนี้

สืบเนื่องจากจากงานวิจัยที่ได้มีการเผยแพร่เกี่ยวกับการพัฒนาก๊าซเซ็นเซอร์อาร์เรย์ประเภทวัสดุผสมของท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังหลายชั้นและพอลิเมอร์ที่ผ่านมานั้น (Lorwongtragool, & Kerdcharoen, 2015) พบว่าเซ็นเซอร์เหล่านี้สามารถใช้ในการจำแนกกลุ่มของข้าวหอมมะลิและข้าวขาวได้โดยใช้หลักการของจมูกอิเล็กทรอนิกส์ และพบความแตกต่างของปริมาณการตอบสนองของเซ็นเซอร์ต่อไอรยะเหยของข้าวหอมมะลิในปริมาณที่สูงกว่าข้าวขาวอย่างมี

นัยสำคัญ แต่อย่างไรก็ตามไอรยะเหยที่พบในข้าวนี้มี ความหลากหลาย สัญญาณการตอบสนองของเซ็นเซอร์เดี่ยวๆ จึงไม่สามารถบ่งชี้ข้อมูลเกี่ยวกับไอรยะเหยได้มากนัก งานวิจัยต่างๆ ที่ได้ศึกษาเกี่ยวกับกลิ่นของข้าวนั้นได้มีการแบ่งประเภทของข้าวออกเป็น 2 จำพวกคือ ข้าวที่ไม่ให้กลิ่นหอม (non-fragrant rice) และข้าวที่ให้กลิ่นของสารหอมระเหย (fragrant rice) เอกลักษณ์ของข้าวหอมโดยส่วนใหญ่แล้วมักกล่าวถึงสารหอมระเหยที่ชื่อว่า 2-อะเซทิล-1-ไพโรลีน (2-AP) ซึ่งมีลักษณะคล้ายกลิ่นข้าวโพดคั่ว (popcorn-like) หรือกลิ่นคล้ายใบเตย (pandan-like) หรือกลิ่นหอมของมะลิ (jasmine-like) (Grimm, Bergman, Delgado, & Bryant, 2001; Mahatheeranont, Keawsa-ard, & Dumri, 2001; Yang, Shewfelt, Lee, & Kays, 2008; Tananu Wong, & Lertsiri, 2010) โดยสาร 2-AP นี้จะมีปริมาณที่ลดลงเมื่อระยะเวลาเก็บรักษานานขึ้น และยังขึ้นกับสภาวะของการเก็บรักษาข้าวอีกด้วย (Yoshihashi, Huong, Surojanametukul, Tungtrakul, & Varanyanond, 2005) แต่อย่างไรก็ตาม ไม่เพียงแต่ไอรยะเหยของสาร 2-AP ที่มีการเปลี่ยนแปลงตลอดเวลา ในเมล็ดข้าวยังมีไอรยะเหยของสารประกอบอินทรีย์อื่นๆ ที่เกิดจากการสลายตัวของกรดไขมัน ซึ่งได้จากการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันของกรดไขมัน (lipid oxidation) ภายในเมล็ดข้าว เช่น ไอรยะเหยของ octanal, heptanal, nonanal, (E)-2-nonenal, decanal และ 2-heptanone ที่เกิดจากการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันของ oleic acid และไอรยะเหยของ hexanal, pentanol, pentanal, (E)-2-octenal, (E,E)-2,4-decadienal และ 2-pentylfuran เกิดจากการสลายตัวของ linoleic acid (Yang, Shewfelt, Lee, & Kays, 2008; Tananu Wong,

& Lertsiri, 2010) ทั้งนี้ปริมาณของไอระเหยต่างๆ ขึ้นกับปัจจัยอื่นๆ เช่น ค่าความชื้น อุณหภูมิ แสง ระยะเวลา และลักษณะของการเก็บข้าวสารหลังการเก็บเกี่ยว เป็นต้น

ในงานวิจัยนี้ได้แบ่งการศึกษาการตอบสนองของเซ็นเซอร์ประเภทพอลิเมอร์ต่อไอระเหยของข้าวออกเป็น 2 ส่วน คือ การศึกษาด้วยวิธีการทดลองตรวจวัดกลิ่นข้าวในระบบไดนามิกส์เช่นเดียวกับเครื่องจุลกลีเกิ้ลทรอนิกส์ โดยได้ให้รายละเอียดเกี่ยวกับโครงสร้างและกระบวนการผลิตเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ซึ่งเป็นหนึ่งในก๊าซเซ็นเซอร์ที่เคยถูกรายงานว่าสามารถตอบสนองต่อไอระเหยของกลิ่นข้าวได้ (Lorwongtragool, & Kerdcharoen, 2015) ทำการทดสอบเซ็นเซอร์ต่อไอระเหยของข้าว 2 ชนิด คือ ข้าวขาวและข้าวหอมมะลิ ข้อมูลจากผลการตอบสนองของเซ็นเซอร์นี้จะสามารถเปรียบเทียบในเชิงคุณภาพของไอระเหยรวม (total volatiles) ที่พบภายในข้าว การศึกษาในส่วนที่สองเป็นการศึกษาเพื่อที่จะเข้าใจการทำงานการตอบสนองของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A เมื่อมีไอระเหย 2-AP และ hexanal เข้าทำอันตรกิริยาโดยใช้แบบจำลองเชิงโมเลกุลซึ่งโมเลกุลทั้งสองนี้ถือว่าเป็นตัวแทนของไอระเหยที่สามารถพบได้ในตัวอย่างข้าว งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาในเบื้องต้นและถูกคาดหวังว่าจะสามารถนำเอาองค์ความรู้หรือข้อมูลที่ได้จากการศึกษาไปพัฒนาวัสดุเซ็นเซอร์เพื่อเพิ่มการตอบสนองต่อไอระเหยของข้าวมากขึ้นในอนาคต อีกทั้งยังเป็นแนวทางให้กับการศึกษาการตอบสนองต่อกลิ่นข้าวของวัสดุเซ็นเซอร์ชนิดอื่นๆ ซึ่งจะเป็นประโยชน์ในการเลือกสมาชิกภายในเซ็นเซอร์อาร์เรย์ให้เหมาะกับการตรวจวัดไอระเหยของกลิ่นข้าว

วิธีการศึกษา

การศึกษาถูกแบ่งออกเป็น 2 ส่วน คือ (1) การศึกษาการตอบสนองของเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยของกลิ่นข้าวและ (2) การศึกษาเชิงทฤษฎีด้วยแบบจำลองเชิงโมเลกุลเพื่อที่จะเข้าใจอันตรกิริยาของโมเลกุลไอระเหยในกลิ่นข้าวกับโมเลกุลพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ด้วยวิธีพลวัตโมเลกุล มีรายละเอียดดังนี้

1. การศึกษาการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยเคมีในข้าว

1.1 การสร้างก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A

ก๊าซเซ็นเซอร์ประเภทวัสดุผสมท่อนาโนคาร์บอนและพอลิเมอร์โดยทั่วไปจะประกอบไปด้วยองค์ประกอบที่สำคัญ 2 ชั้น คือ ชั้นของขั้วไฟฟ้าและชั้นวัสดุเซ็นเซอร์ โดยชั้นของขั้วไฟฟ้าเป็นชั้นของโลหะที่เคลือบลงบนวัสดุฐาน ซึ่งในงานวิจัยนี้ต้องการสร้างก๊าซเซ็นเซอร์ที่อยู่บนฐานที่สามารถบิดโค้งงอได้และมีราคาถูก โดยได้เลือกใช้แผ่นพลาสติกใสทำจากโพลีเอสเตอร์หนา 100 ไมครอนเป็นฐานสำหรับการผลิตเซ็นเซอร์ในครั้งนี้ ในขณะที่ชั้นถัดขึ้นมาเป็นชั้นของวัสดุเซ็นเซอร์ซึ่งจะเคลือบลงบนขั้วไฟฟ้า ซึ่งในงานวิจัยนี้สนใจก๊าซเซ็นเซอร์ที่ผลิตจากวัสดุผสมของ MWCNT/PAMPA-co-A

การสร้างก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ในครั้งนี้ได้ทำการเคลือบชั้นวัสดุเซ็นเซอร์บนขั้วไฟฟ้าของเซ็นเซอร์ด้วยวิธีการพิมพ์สกรีน โดยการสร้างรูปแบบขั้วไฟฟ้าลงบนฐานพลาสติกด้วยกาวยเงินให้มีลักษณะเป็นขั้วอินเตอร์ดิจิตเตด (interdigitated electrodes) ที่มีระยะห่างระหว่างขั้ว

ประมาณ 0.08 เซนติเมตร มีพื้นที่สำหรับสกรีนวัสดุ เซ็นเซอร์ขนาด 0.75×0.75 เซนติเมตร ด้านบนของ เซ็นเซอร์มีการปิดผนึกด้วยแผ่นพลาสติก โดยจะเว้น ในส่วนพื้นผิวข้างบนเป็นช่องเปิดขนาด 0.75×0.75 เซนติเมตร เพื่อให้ไอระเหยของกลิ่นสามารถ

ตกกระทบพื้นผิวของวัสดุเซ็นเซอร์ได้ ทั้งนี้ การปิดผนึกดังกล่าวจะช่วยลดการเกิดออกไซด์ ของขั้วโลหะที่สัมผัสกับไอระเหยและสิ่งแวดล้อมได้ โครงสร้างของก๊าซเซ็นเซอร์ที่ได้สร้างขึ้น แสดงดัง (Figure 1)

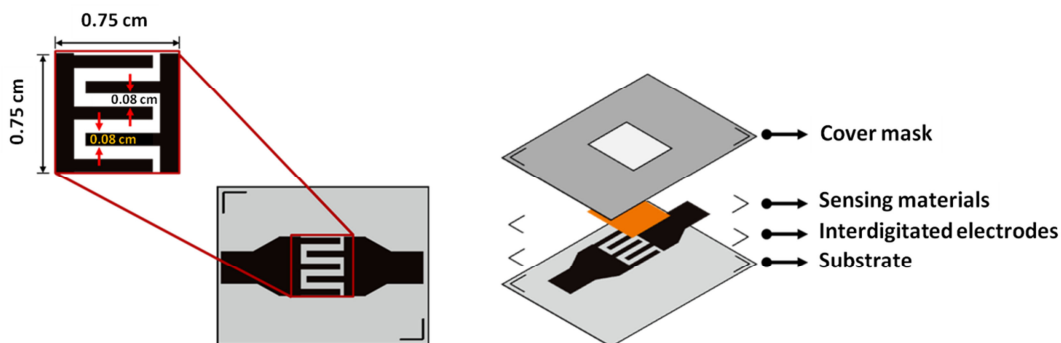


Figure 1 The structure of MWCNT/PAMPA-co-A sensor based on screen printing technique.

วัสดุผสมของ MWCNT/PAMPA-co-A เตรียมจากการละลายพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ปริมาณ 0.10 กรัม ลงในตัวทำละลาย DMSO ปริมาตร 5 มิลลิลิตร กวนให้เข้ากันโดยใช้เครื่องกวนสารละลาย ด้วยแท่งแม่เหล็ก จนกระทั่งได้สารละลายของ พอลิเมอร์ใส จากนั้นเติมท่อนาโนคาร์บอนชนิด MWCNT ปริมาณ 0.05 กรัม ลงในสารละลายพอลิเมอร์ที่ เตรียมไว้โดยไม่ต้องทำการกวน และใช้เครื่องผสม สารระบบอัลตราโซนิกส์ ในการช่วยกระจายตัวของ ท่อนาโนคาร์บอนในสารผสม โดยเครื่องให้ความถี่ ในการสั่นประมาณ 20 กิโลเฮิร์ตซ์ เป็นเวลา 10-15 นาที จะได้วัสดุผสมสีดำเนื้อละเอียดเนื้อเดียวที่มี ท่อนาโนคาร์บอนกระจายตัวในพอลิเมอร์ PAMPA-co-A/MWCNT ตามต้องการ ทำการพิมพ์สกรีนวัสดุ

เซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ลงบนขั้วไฟฟ้า และอบให้ความร้อนประมาณ 70 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 30 นาที เพื่อระเหยตัวทำละลายและทำให้ ได้เซ็นเซอร์ที่มีเสถียรภาพที่ดี

1.2 การทดสอบการตอบสนองของก๊าซ เซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A

ก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ที่สร้างขึ้นนั้น ถูกนำมาทดสอบการตอบสนอง ต่อกลิ่นข้าวในระบบไดนามิกส์ของเครื่องจุ่มก อิลีกทรอนิกส์ ตัวอย่างข้าวที่นำมาทดสอบเป็น ข้าวสารที่ขายตามท้องตลาด และมีบรรจุภัณฑ์ที่ น่าเชื่อถือ และมีช่วงเวลาของการผลิตใกล้เคียงกัน ประกอบด้วยข้าวขาวที่มาจาก 3 ยี่ห้อ และข้าวหอมมะลิ ที่มาจาก 3 ยี่ห้อเช่นกัน ข้าวในแต่ละตัวอย่างปริมาณ

10 กรัม ถูกนำมาทดสอบในระบบไดนามิกส์โดยการกำหนดให้อัตราการไหลของไอร่เหยของกลิ่นที่ไหลเข้าสู่หน่วยรับกลิ่น (sensing unit) มีอัตราการไหลที่คงที่ประมาณ 3 ลิตรต่อนาที อุณหภูมิที่ให้กับข้าวตัวอย่างมีค่าคงที่ประมาณ 70 องศาเซลเซียส ทั้งนี้เพื่อเป็นการเพิ่มปริมาณไอร่เหยที่ออกมาจากเมล็ดข้าวบริเวณ headspace ของขวดบรรจุข้าวตัวอย่าง กำหนดการเก็บข้อมูลในช่วงสัญญาณอ้างอิง (reference time) และช่วงสัญญาณที่มีการตอบสนองต่อไอร่เหยของเซ็นเซอร์ (sample time) เป็นคาบเวลา คือ 4 นาที และ 1 นาที ตามลำดับ ทำการบันทึก 4 คาบเวลา และทดลองซ้ำ 3 ครั้งสำหรับแต่ละตัวอย่างของข้าว เพื่อให้ข้อมูลการตอบสนองเพื่อนำมาหาค่าเฉลี่ยจำนวน 12 ค่า ต่อหนึ่งตัวอย่างข้าว โดยเงื่อนไขต่างๆ ที่เหมาะสมของการศึกษาการตอบสนองในระบบไดนามิกส์ข้างต้นได้ถูกศึกษาและรายงานในงานวิจัยก่อนหน้านี้ (Lorwongtragool, & Kerdcharoen, 2015) สัญญาณที่ได้จะถูกเก็บในรูปแบบข้อมูลของค่าความต้านทานของเซ็นเซอร์เป็นฟังก์ชันของเวลา เพื่อนำมาคำนวณค่าเปอร์เซ็นต์การตอบสนองของเซ็นเซอร์ (% sensor response) จากเปอร์เซ็นต์การเปลี่ยนแปลงค่าความต้านทานของเซ็นเซอร์ต่อไอร่เหยเมื่อเทียบกับสัญญาณการตอบสนองเซ็นเซอร์ต่ออากาศอ้างอิง ดังสมการที่ (1)

$$\% \text{sensor response} = \frac{R_{\text{rice}} - R_{\text{ref}}}{R_{\text{ref}}} \times 100 \quad (1)$$

โดย R_{ref} และ R_{rice} ค่าความต้านทานของเซ็นเซอร์เมื่อตอบสนองต่ออากาศอ้างอิงและค่าความต้านทานของเซ็นเซอร์เมื่อตอบสนองต่อไอร่เหยทดสอบของตัวอย่างข้าว ตามลำดับ

2. การศึกษาเชิงทฤษฎีด้วยวิธีพลวัตโมเลกุล

การศึกษาในเชิงทฤษฎีโดยใช้แบบจำลองเชิงโมเลกุลมีจุดประสงค์เพื่อที่จะเข้าใจพฤติกรรมหรืออันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่ต้องการศึกษา ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาอันตรกิริยาระหว่างพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ซึ่งเป็นวัสดุเซ็นเซอร์และโมเลกุลของกลิ่นที่พบในข้าวหอมมะลิ ได้แก่ โมเลกุลของ 2-AP และ hexanal เพื่อที่จะเข้าใจการทำงานของวัสดุเซ็นเซอร์เมื่อมีโมเลกุลกลิ่นเหล่านี้เข้าทำอันตรกิริยา

การศึกษาด้วยแบบจำลองเชิงโมเลกุลในระบบที่มีพอลิเมอร์และไอร่เหยของโมเลกุล 2-AP และ hexanal ถูกศึกษาโดยใช้วิธีการในศาสตร์ของพลวัตโมเลกุล (MD) ด้วย GROMACS software package ภายในแบบจำลองประกอบด้วยโมเลกุลของพอลิเมอร์ โดยในการจำลองครั้งนี้ได้สร้าง 3 ยูนิตของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ท่ามกลางไอร่เหยของโมเลกุลกลิ่นจำนวน 300 โมเลกุล ในที่นี้หมายถึง 2-AP หรือ hexanal ดัง (Figure 2)

ขั้นตอนการจำลองสามารถสรุปได้ดังใน (Figure 3) โดยในการจำลองโครงสร้างเริ่มต้นของโมเลกุลที่จะทำการศึกษาดูด้วยแบบจำลองได้จากการ optimize โครงสร้างที่ให้พลังงานต่ำสุดโดยวิธีทางเชิงควอนตัมบนฐานของเบสเสตระดับ B3LYP/6-31G⁺ ด้วยโปรแกรม GAMESS ประกอบด้วยโครงสร้างของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ที่มีโครงสร้าง 3 ยูนิต และโครงสร้างของไอร่เหย 2-AP หรือ hexanal ตามที่ต้องการศึกษา เมื่อได้โครงสร้างที่พลังงานต่ำตามต้องการแล้วจะนำมาจำลองการเกิดอันตรกิริยาระหว่างคู่ของพอลิเมอร์กับโมเลกุลไอร่เหยด้วยวิธีการจำลองด้วยพลวัตโมเลกุล

โดยสร้างระบบที่ประกอบด้วยโมเลกุลของพอลิเมอร์จำนวน 1 หน่วย ที่มีตำแหน่งกลางกล่องขนาด $8 \times 8 \times 8$ ลูกบาศก์นาโนเมตร ในพื้นที่รอบข้างจะใส่โมเลกุลของไอรอะเหยจำนวน 300 โมเลกุล โดยจะแบ่งการจำลองออกเป็น 2 ช่วง คือ ช่วงที่ 1 จะจำลองระบบให้มีอุณหภูมิคงที่ที่ 298 เคลวิน และให้มีผลของ temperature coupling ($\tau_{\text{t}} = 0.10$ พิโควินาที) และ pressure coupling ($\tau_{\text{p}} = 0.50$ พิโควินาที) แบบ berendsen ในการกำหนด temperature coupling แบบอัลกอริทึมของ berendsen นั้น เป็นการจำลองการเกิด coupling แบบอ่อนๆ กับจลศาสตร์อันดับแรก (first-order kinetics) ซึ่งอัลกอริทึมนี้จะค่อยๆ ให้มีการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิเป็นไปแบบเอ็กโพเนนเชียล (reference temperature, $T_0 = 298$ เคลวิน) ในการจำลองรอบแรกยังกำหนดให้มี

ผลของ pressure coupling ซึ่งระบบจะมีการวิสเกลของกล่องจำลองในทุกๆ สเต็ปของการคำนวณ โดยลักษณะของความดันจะค่อยๆ เปลี่ยนแปลงแบบเอ็กโพเนนเชียลเช่นเดียวกับอุณหภูมิ

เมื่อได้ผลการจำลองในรอบแรกแล้วระบบจะมีพลังงานที่ต่ำลงเข้าใกล้สภาวะสมดุล ทำการตัดผลของ pressure coupling ออก เพื่อให้ขนาดของกล่องจำลองมีความดันคงที่ โดยทำการกำหนดขนาดกล่องให้เท่ากับผลของขนาดกล่องที่ได้จากการคำนวณรอบแรก ในการคำนวณรอบที่ 2 นี้ จะกำหนดจำนวนสเต็ปเท่ากับ 2 ล้าน เช่นเดียวกับการจำลองรอบแรก จากผลการจำลองทั้งหมดนี้จะนำผลที่ได้ไปวิเคราะห์เพื่อดูการกระจายตัวของโมเลกุลไอรอะเหยตามหมู่ฟังก์ชันต่างๆ บนพอลิเมอร์

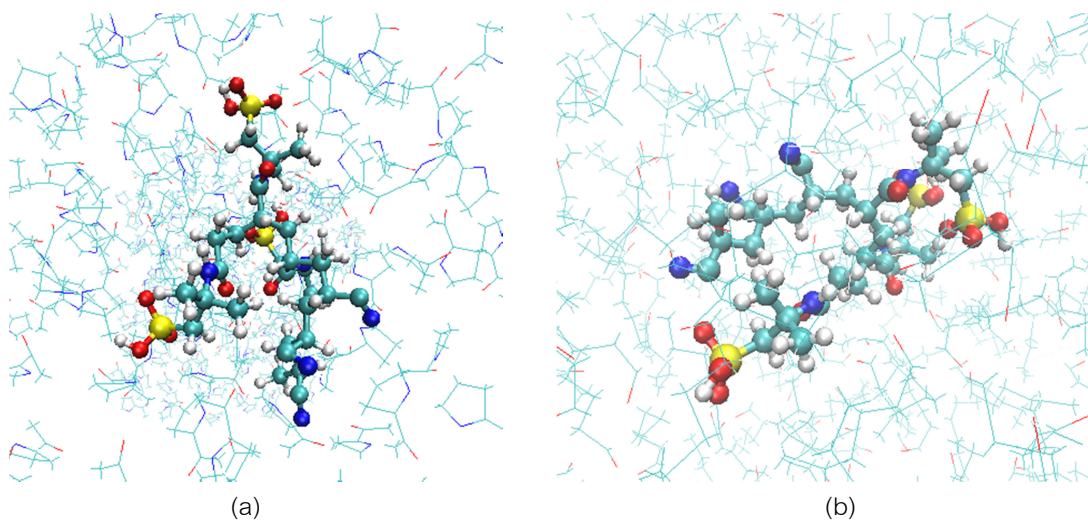


Figure 2 The simulation snapshots of (a) PAMPA-co-A in 300 molecules of 2-AP and (b) PAMPA-co-A in 300 molecules of hexane.

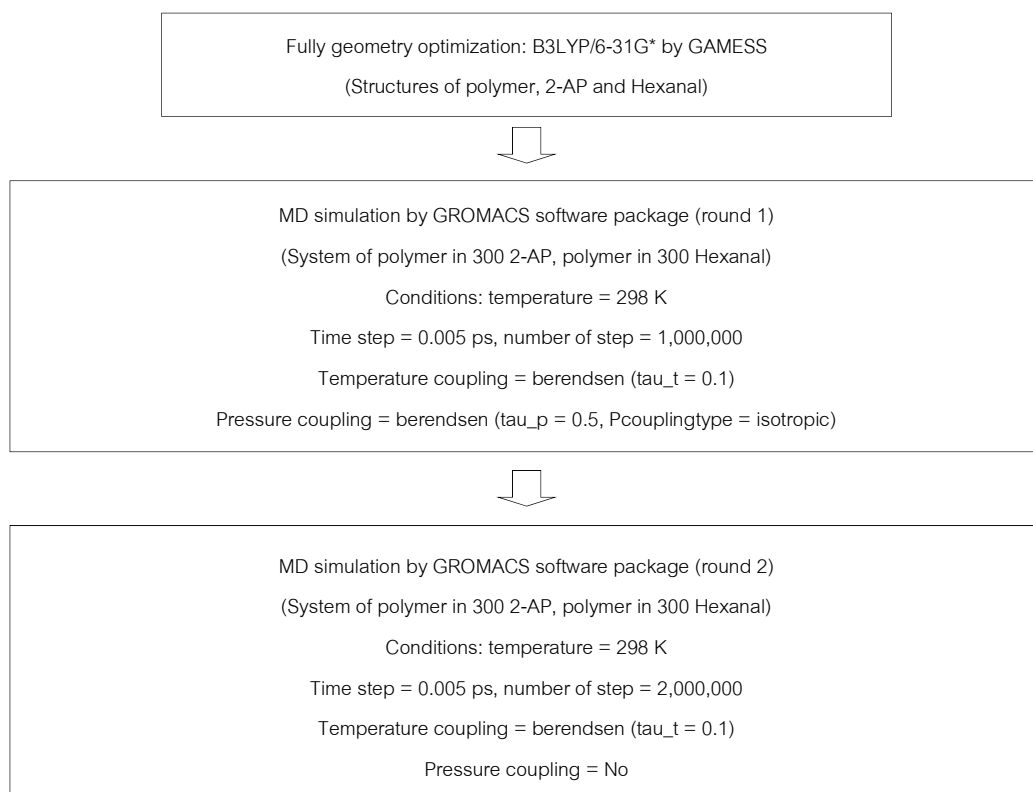


Figure 3 The flowchart of MD simulation procedure.

ในการศึกษาอันตรกิริยาของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A กับโมเลกุลไอระเหยของ 2-AP และ hexanal ด้วยวิธีของพลวัตโมเลกุล สามารถวิเคราะห์การกระจายตัวของโมเลกุลไอระเหยรอบๆ โมเลกุลของพอลิเมอร์ในเทอมของ radial distribution function (RDF), $g_{X-Y}(r)$ ซึ่งสอดคล้องกับความเป็นไปได้ที่จะพบอะตอมชนิด Y (อะตอมของโมเลกุลไอระเหย) ในแนวรัศมี r รอบอะตอมชนิด X (อะตอมของโมเลกุลพอลิเมอร์) โดยสามารถเขียนในรูปฟังก์ชันได้ดังนี้ (Abraham et al., 2018)

$$g_{X-Y}(r) = \frac{1}{\langle \rho_Y \rangle_{local}} \frac{1}{N_X} \sum_{i \in X} \sum_{j \in Y} \frac{\delta(r_{ij} - r)}{4\pi r^2} \quad (2)$$

โดยที่ $\langle \rho_Y \rangle_{local}$ หมายถึงความหนาแน่นเฉลี่ยของอะตอมชนิด Y รอบอะตอมชนิด X ในรูปแบบทรงกลมรัศมีเท่ากับครึ่งหนึ่งของขนาดกล่อง ซึ่งในแบบจำลองนี้รัศมีของระบบที่พิจารณา RDF มีค่า 4 นาโนเมตร

ผลการศึกษา

ผลการศึกษาการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยเคมีในข้าว

จากการทดสอบการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยเคมีในข้าว 2 ประเภท คือ ข้าวขาว (white rice, WR) และข้าวหอม

มะลิ (jasmine rice, JR) โดยตัวอย่างข้าวขาวที่นำมาทดสอบมีที่มาจาก 3 ยี่ห้อที่แตกต่างกัน ใช้สัญลักษณ์แทนดังนี้ WR1, WR2 และ WR3 ขณะที่ข้าวหอมมะลิที่นำมาทดสอบมีที่มาจาก 3 ยี่ห้อเช่นกัน ใช้สัญลักษณ์แทนดังนี้ JR1, JR2 และ JR3 ผลของการทดสอบการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยเคมีในข้าวทั้ง 6 ตัวอย่างนี้ ภายใต้ระบบไดนามิกส์ของเครื่องจุลกลีททรอนิกส์ เมื่อทำงานที่ 70 องศาเซลเซียส ได้ผลดัง (Figure 4)

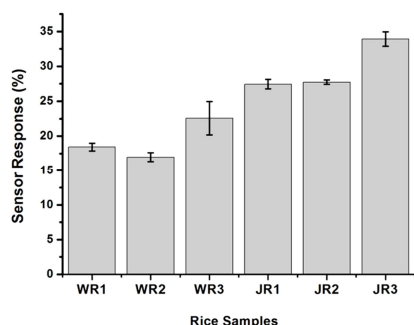


Figure 4 The percentage of sensor responses of MWCNT/PAMPA-co-A sensor interacting to vapors of 6 rice samples.

จาก (Figure 4) การตอบสนองของเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยของข้าวขาวให้การตอบสนองที่น้อยกว่าข้าวหอมมะลิอย่างมีนัยสำคัญ มีค่าเฉลี่ยของการตอบสนองของกลุ่มอยู่ที่ 19.30 เปอร์เซ็นต์ และ 29.70 เปอร์เซ็นต์ ตามลำดับ โดยค่าเฉลี่ยของเปอร์เซ็นต์การตอบสนองต่อกลุ่มข้าวขาวต่ำกว่ากลุ่มข้าวหอมมะลิและมีความแตกต่าง 42.40 เปอร์เซ็นต์ โดยประมาณ จากการทดสอบดังกล่าวไม่สามารถระบุได้ว่าผลการตอบสนองของเซ็นเซอร์ MWCNT/

PAMPA-co-A นั้นตอบสนองต่อไอระเหยของโมเลกุลกลิ่นชนิดใด เนื่องจากไอระเหยเคมีในตัวอย่างข้าวนั้นมีความหลากหลาย แต่อย่างไรก็ตามผลการทดสอบบอกได้เพียงว่า การที่เซ็นเซอร์สามารถตอบสนองได้มากหรือน้อยนั้นสัมพันธ์กับปริมาณไอระเหยที่เข้าทำอันตรกิริยากับวัสดุเซ็นเซอร์ ดังนั้นสำหรับผลการทดลองนี้สามารถบอกได้ว่าไอระเหยจากข้าวหอมมะลิ มีปริมาณของไอระเหยที่สามารถเข้าทำอันตรกิริยากับเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ที่สูงกว่าปริมาณไอระเหยที่ออกจากข้าวขาวอย่างมีนัยสำคัญ

ผลการศึกษาเชิงทฤษฎีด้วยวิธีพลวัตโมเลกุลระหว่างพอลิเมอร์ PAMPA-co-A และโมเลกุลไอระเหย

จากการศึกษาแบบจำลองโมเลกุลด้วยพลวัตโมเลกุล สามารถวิเคราะห์อันตรกิริยาในเทอมของ $g(r)$ ซึ่งเป็น radial distribution function (RDF) ที่จะทำให้เห็นภาพการกระจายตัวของโมเลกุลไอระเหย 2-AP หรือ hexanal จำนวน 300 โมเลกุล รอบๆ พอลิเมอร์ PAMPA-co-A ใน (Figure 5) เป็นการแสดงโครงสร้างและสัญลักษณ์ของตำแหน่งที่มีการเกิดอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล

ผลการวิเคราะห์ RDF จากการจำลองเชิงโมเลกุลระหว่าง PAMPA-co-A กับไอระเหยได้ผลดัง (Figure 6) พบว่าผลการกระจายตัวของโมเลกุลไอระเหย 2-AP จำนวน 300 โมเลกุล รอบๆ โมเลกุลของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A มีโอกาสที่จะพบ 2-AP ณ ตำแหน่ง H_{PAMPA} โดยโมเลกุล 2-AP หันอะตอม O_{2-AP} เข้าหาอะตอม H_{PAMPA} ของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ที่ระยะรัศมี 0.245 นาโนเมตร จะพบค่า $g(r)$ สูงที่สุดเท่ากับ 18.48 ดังแสดงใน (Figure 6a)

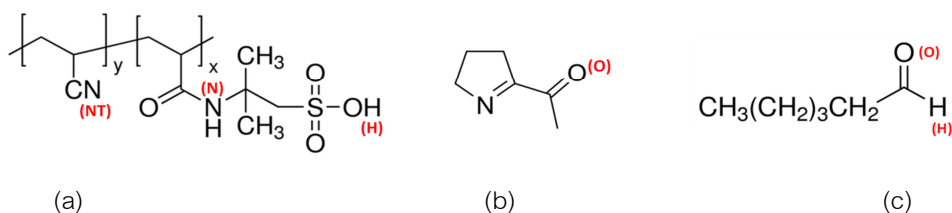


Figure 5 Molecular structure and symbol of the position defined for RDF analysis for (a) PAMPA-co-A (b) 2-AP (c) hexanal molecules.

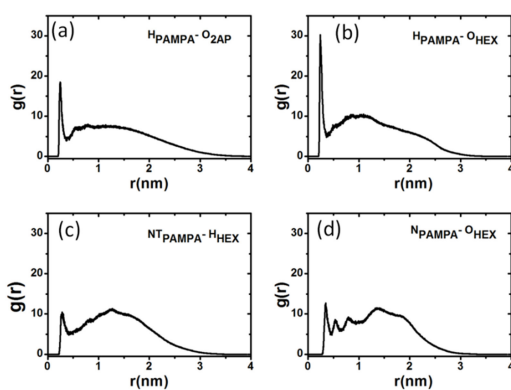


Figure 6 The RDF, $g(r)$ of (a) H_{PAMPA} and O_{2AP} (b) H_{PAMPA} and O_{HEX} (c) NT_{PAMPA} and H_{HEX} (d) N_{PAMPA} and O_{HEX}

จากผลการวิเคราะห์ RDF จากการจำลองเชิงโมเลกุล PAMPA-co-A กับไอระเหย hexanal ได้ผลดัง (Figure 6b) ถึง (Figure 6d) จากผลการกระจายตัวของโมเลกุลไอระเหย hexanal จำนวน 300 โมเลกุลที่เกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A พบตำแหน่งบนพอลิเมอร์ 3 ตำแหน่งที่สามารถเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลของ hexanal ได้ นั่นคือตำแหน่งของอะตอม H_{PAMPA} NT_{PAMPA} และ N_{PAMPA} โดยตำแหน่ง H_{PAMPA} บนโมเลกุล PAMPA-co-A ถือได้ว่าเป็นหมู่ฟังก์ชันทำงานหลัก (active site) โดยแสดงการเกิดอันตรกิริยากับอะตอม O_{HEX} ของโมเลกุล hexanal ให้ค่า $g(r)$ สูงสุดที่ระยะรัศมี 0.239

นาโนเมตร มีค่า 30.26 ดัง (Figure 6b) ขณะที่ตำแหน่งของอะตอม NT_{PAMPA} และ N_{PAMPA} สามารถเกิดอันตรกิริยาที่อ่อนกว่ากับอะตอม H_{HEX} และ O_{HEX} ตามลำดับ ดัง (Figure 6c) และ (Figure 6d)

อภิปรายผล

จากผลการทดลองในส่วนของการศึกษาการตอบสนองของเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยเคมีในข้าว แสดงให้เห็นว่ากลุ่มข้าวหอมมะลิที่เป็นตัวแทนของข้าวที่ให้สารหอมระเหย (fragrant rice) มีปริมาณของไอระเหยเคมีโดยรวม (total volatile compounds) สูงกว่ากลุ่มข้าวขาว

ซึ่งเป็นตัวแทนของข้าวที่ไม่มียกกลิ่นหอม (non-fragrant rice) โดยจากงานวิจัยที่ผ่านมา ได้มีผู้รายงานว่ามีสารหอมมะลิมีสารหอมระเหยที่เป็นเอกลักษณ์ นั่นคือสาร 2-อะเซทิล-1-ไพโรลีน (2-AP) ปริมาณของ 2-AP ในข้าวหอมมะลิจะสูงในข้าวที่เพิ่งกะเทาะเปลือกใหม่ๆ หรือเพิ่งหุงสุกใหม่ๆ และจะมีปริมาณลดลงอย่างรวดเร็วขึ้นกับปัจจัยสิ่งแวดล้อมในการเก็บรักษา เช่น อากาศ อุณหภูมิ ความชื้น แสง และระยะเวลา นอกจากนี้ยังมีรายงานเกี่ยวกับการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันของกรดไขมันในข้าว ซึ่งจะทำให้เกิดการสร้างไอระเหยอินทรีย์จำพวกสารประกอบอัลดีไฮด์ (Yang, Shewfelt, Lee, & Kays, 2008; Tananuwong, & Lertsiri, 2010) ขึ้นในปริมาณที่สูงขึ้นในระหว่างการเก็บรักษา สารประกอบอัลดีไฮด์ที่ได้มีรายงานในงานวิจัยที่ผ่านมา ได้แก่ hexanal, octanal, heptanal, nonanal และ (*E*)-2-nonenal เป็นต้น ทั้งนี้ การเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันของกรดไขมันในข้าวขึ้นกับปัจจัยสิ่งแวดล้อมเช่นกัน ดังนั้นแล้วในผลของการตอบสนองของเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A นี้เพียงตัวเดียวไม่อาจจะบ่งชี้ถึงระดับของความหอมที่มีในข้าวได้ แต่อาจจะมีประโยชน์ในการใช้เป็นส่วนหนึ่งของหน่วยรับกลิ่น (sensing unit) บนหลักการของจุ่มกอิเล็คทรอนิกส์ในการแยกความแตกต่างของชนิดของข้าวระดับความหอมหรือเหม็น อายุการเก็บรักษาได้

ผลของการศึกษาเชิงทฤษฎีด้วยวิธีพลวัตโมเลกุลระหว่างพอลิเมอร์ PAMPA-co-A และโมเลกุลไอระเหย 2-AP และ hexanal แสดงให้เห็นผลที่สนับสนุนว่าเซ็นเซอร์ที่มีส่วนของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A สามารถเกิดอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลไอระเหย 2-AP และ hexanal ได้เช่นเดียวกัน

โดยผลของ RDF แสดงให้เห็นว่าหมู่ฟังก์ชันบนโมเลกุลของ PAMPA-co-A นั้น สามารถให้การตอบสนองต่อโมเลกุลไอระเหย hexanal ได้ดีกว่า 2-AP บนหมู่ฟังก์ชันทำงาน (active site) ตำแหน่งเดียวกัน คือ ตำแหน่งอะตอม H_{PAMPA} บนหมู่ไฮดรอกซิล (-OH) ของโมเลกุล PAMPA-co-A โดยให้ผลค่า $g(r)$ ของคู่อะตอม $H_{PAMPA}-O_{HEX}$ สูงกว่า $H_{PAMPA}-O_{2-AP}$ ถึง 1.64 เท่า มากกว่านั้น โมเลกุลไอระเหย hexanal ยังสามารถเข้าทำอันตรกิริยาในหมู่ฟังก์ชันทำงานรองที่ตำแหน่งอะตอม NT_{PAMPA} และ N_{PAMPA} ของพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ได้อีกด้วย จากการศึกษาในเชิงแบบจำลองนี้ทำให้คาดเดาได้ว่าหากนำพอลิเมอร์ PAMPA-co-A มาเป็นวัสดุเซ็นเซอร์ จะสามารถตอบสนองต่อไอระเหยของ 2-AP และ hexanal ได้ โดยสามารถตอบสนองต่อ hexanal ได้ดีกว่า 2-AP

ผลการศึกษาเชิงทฤษฎีนี้ เมื่อเปรียบเทียบกับผลการตอบสนองของเซ็นเซอร์ในการทดลองส่วนแรกได้สนับสนุนแนวคิดที่ว่าเซ็นเซอร์จากวัสดุ PAMPA-co-A นั้น ถึงแม้ว่าค่าการตอบสนองต่อไอระเหยต่อกลิ่นข้าวหอมมะลิจะให้ค่าสูงกว่าข้าวขาวในทุกๆ กรณี แต่ไม่อาจจะแปรผลไปสู่การตรวจวัดระดับความหอมได้โดยตรง ซึ่งการศึกษาโดยทั่วไปจะระบุถึงปริมาณของสาร 2-AP โดยเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A นี้สามารถใช้เป็นส่วนหนึ่งในอาร์เรย์ของหน่วยรับกลิ่นในจุ่มกอิเล็คทรอนิกส์ที่สามารถมีประโยชน์ในการจำแนกข้อมูลกลิ่นต่างๆ ของข้าวตามเงื่อนไขต่างๆ การศึกษาด้วยแบบจำลองเชิงโมเลกุลนี้ยังให้แนวคิดเกี่ยวกับการออกแบบและพัฒนาวัสดุเซ็นเซอร์ประเภทพอลิเมอร์ ซึ่งหากมีปริมาณของหมู่ฟังก์ชันทำงานที่มากขึ้นก็จะส่งผลต่อการตอบสนองต่อไอระเหย

ที่มากขึ้นเช่นกัน สำหรับพอลิเมอร์ PAMPA-co-A ซึ่งเป็นโคพอลิเมอร์ที่มีโครงสร้างประกอบด้วยโครงสร้างของมอนอเมอร์ 2 ตัว พอลิอะคริไลไนไตรล์ และพอลิ (2-อะคริลามิโด-2-เมทิล-1-ไพโรฟานีลซัลโฟนิค แอซิด) นั้น หากต้องการพัฒนาให้สามารถตอบสนองต่อไอระเหยของ 2-AP และ hexanal มากขึ้น จำเป็นต้องสังเคราะห์พอลิเมอร์ให้มีจำนวนหน่วยซ้ำของโครงสร้างของพอลิ (2-อะคริลามิโด-2-เมทิล-1-ไพโรฟานีลซัลโฟนิค แอซิด) เพิ่มมากขึ้น เพื่อเพิ่มปริมาณหมู่ฟังก์ชันในการเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลไอระเหย ดังผลจากแบบจำลองเชิงโมเลกุลข้างต้น

สรุป

จากการศึกษาการตอบสนองของก๊าซเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ต่อไอระเหยของข้าว 2 กลุ่ม คือ ข้าวขาว (WR) และข้าวหอมมะลิ (JR) ซึ่งถูกยกเป็นตัวแทนของกลุ่มข้าวที่ไม่มีกลิ่นหอม (non-fragrant rice) และข้าวที่ให้กลิ่นหอม (fragrant rice) ตามลำดับ เซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A สามารถให้การตอบสนองต่อไอระเหยของข้าวหอมมะลิได้ดีกว่าข้าวขาวอย่างมีนัยสำคัญ ซึ่งบ่งชี้ถึงปริมาณไอระเหยรวมที่มีปริมาณมากในข้าวหอมมะลิ ทำให้มีโอกาสเข้าทำอันตรกิริยากับเซ็นเซอร์ได้ดี ผลของการศึกษาเชิงทฤษฎีด้วยวิธีพลวัตโมเลกุลระหว่างพอลิเมอร์ PAMPA-co-A และโมเลกุลไอระเหย 2-AP และ hexanal ซึ่งใช้เป็นตัวแทนโมเลกุลกลิ่นที่พบได้ในข้าว ให้ผลที่สนับสนุนว่าเซ็นเซอร์ที่ผลิตจากพอลิเมอร์ PAMPA-co-A สามารถเกิดอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลไอระเหย 2-AP และ hexanal ได้ โดยพบว่าโมเลกุลพอลิเมอร์ PAMPA-co-A นั้น สามารถเกิดอันตรกิริยาต่อโมเลกุล

ไอระเหย hexanal ได้ดีกว่าโมเลกุลไอระเหย 2-AP มีหมู่ฟังก์ชันทำงานที่สามารถเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลไอระเหย hexanal ถึง 3 ตำแหน่ง คือ H_{PAMPA} NT_{PAMPA} และ N_{PAMPA} โดยตำแหน่ง H_{PAMPA} บนหมู่ไฮดรอกซิลบนโมเลกุล PAMPA-co-A ถือได้ว่าเป็นหมู่ฟังก์ชันทำงานหลักที่สามารถเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลของ hexanal ได้ มากไปกว่านั้นในตำแหน่ง H_{PAMPA} นี้ ยังเป็นตำแหน่งที่จะเกิดอันตรกิริยากับอะตอม O_{2-AP} ของโมเลกุล 2-AP ได้อีกด้วย จากการศึกษาในเชิงแบบจำลองโมเลกุลทำให้มั่นใจว่าสัญญาณการตอบสนองของเซ็นเซอร์ที่ผลิตจากวัสดุพอลิเมอร์ PAMPA-co-A เป็นผลที่เกิดจากการทำอันตรกิริยาของโมเลกุลไอระเหย 2-AP และ hexanal เป็นส่วนประกอบ แต่อย่างไรก็ตามจากการศึกษาการตอบสนองของเซ็นเซอร์ที่ผลิตจากวัสดุพอลิเมอร์ PAMPA-co-A เพียงตัวเดียวนี้อยังไม่อาจจะระบุถึงระดับของความหอมที่มีในข้าวได้ แต่จะมีประโยชน์ในการใช้เป็นส่วนหนึ่งของหน่วยรับกลิ่นบนหลักการแยกความแตกต่างของกลิ่นด้วยจมูกอิเล็กทรอนิกส์ซึ่งจำเป็นต้องอาศัยการประมวลผลจากข้อมูลเซ็นเซอร์หลายชนิด การศึกษาครั้งนี้ให้แนวคิดเกี่ยวกับการออกแบบและพัฒนาเซ็นเซอร์ MWCNT/PAMPA-co-A ให้สามารถเพิ่มการตอบสนองต่อไอระเหยเคมีของ 2-AP และ hexanal ได้โดยการเพิ่มจำนวนหน่วยซ้ำของโครงสร้างของพอลิ (2-อะคริลามิโด-2-เมทิล-1-ไพโรฟานีลซัลโฟนิค แอซิด) ให้เพิ่มมากขึ้น เพื่อเพิ่มปริมาณหมู่ฟังก์ชันในการเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลไอระเหย และเป็นข้อมูลในเบื้องต้นสำหรับการพัฒนาเซ็นเซอร์สำหรับไอระเหยของกลิ่นข้าวได้ในอนาคต

คำขอบคุณ

ขอขอบคุณทุนสนับสนุนงานวิจัย ทุนพัฒนาศักยภาพในการทำงานวิจัยของอาจารย์รุ่นใหม่ (MRG5680010) และกองทุนส่งเสริมงานวิจัยมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลสุวรรณภูมิที่สนับสนุนงบวิจัยแก่หน่วยวิจัยวัสดุศาสตร์และนวัตกรรม ขอขอบคุณผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ธีรเกียรติ์ เกิดเจริญ และ รองศาสตราจารย์ ดร.รัชวาล วงศ์สุสุข ที่คอยช่วยเหลือและให้คำปรึกษาในการทำงานโครงการวิจัยนี้

เอกสารอ้างอิง

- Abdullah, A. H., Adom, A.H., Shakaff, A. Y. Md., Ahmad, M. N., Zakaria, A., Fikri, N. A., & Omar, O. (2011). An electronic nose system for aromatic rice classification. *Sensor Letters*, 9(2), 850-855(6).
- Abraham, M. J., Van der Spoel, D., Lindahl, E., Hess, B., & the GROMACS development team. (2018). Radial distribution functions. In *GROMACS User Manual version 2016* (pp 196-198). www.gromacs.org.
- Grimm, C. C., Bergman, C., Delgado, J. T., & Bryant, R. (2001). Screening for 2-Acetyl-1-pyrroline in the headspace of rice using SPME/GC-MS. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 49, 245-249.
- Hines, E. L., Boilot, P., Gardner, J. W., & Gongora, M. A. (2003). Pattern analysis for electronic nose. In T. C. Pearce, S. S. Schiffman, H. T. Nagle, & J. W. Gardner (Eds.), *Handbook of machine olfaction: Electronic nose technology* (pp. 133-160). Weinheim: Wiley-VCH.
- Jana, A., Bhattacharyya, N., Bandyopadhyay, R., Adhikari, B., Tudu, B., Kundu, C., Roy, J. K., & Mukherjee S. (2011). Classification of aromatic and non-aromatic rice using electronic nose and artificial neural network. In *Proceeding of Recent Advances in Intelligent Computational Systems (RAICS)* (pp. 291-294). Trivandrum, Kerala, India: IEEE.
- Lorwongtragool, P., & Kerdcharoen, T. (2015). Development of chemical sensor array for rice aroma detection. *Advanced Materials Research*, 1103, 15-20.
- Mahatheeranont, S., Keawsa-ard, S., & Dumri, K. (2001). Quantification of the rice aroma compound, 2-Acetyl-1-pyrroline, in uncooked Khao Dawk Mali 105 brown rice. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 49, 773-779.
- Tananuwong, K., & Letsiri, S. (2010). Changes in volatile aroma compounds of organic fragrant rice during storage under different conditions. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 90, 1590-1596.
- Yang, D. S., Shewfelt, R. L., Lee, K.-S., & Kays, S. J. (2008). Comparison of odor-active compounds from six distinctly different rice flavor types. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 56, 2780-2787.
- Yoshihashi, T., Huang, N. T. T., Surojanametakul, V., Tungtrakul, P., & Varayanond, W. (2005). Effect of storage conditions on 2-acetyl-1-pyrroline content in aromatic rice variety, Khao Dawk Mali 105. *Journal of Food Science*, 70, 34-37.
- Zheng, X., Lan, Y., Zhu, J., Westbrook, J., Hoffmann, W. C., & Lacey, R. E. (2009). Rapid identification of rice samples using an electronic nose. *Journal of Bionic Engineering*, 6, 290-297.