บทคัดย่อ

241773

งานวิจัยนี้ ได้รายงานผลการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง ทางพลังงาน ทางอิเล็กทรอนิกส์ และสมบัติทางแสงของโมเลกุลเป้าหมายที่เป็นอนุพันธ์ของสารฟลูออรีน และอนุพันธ์ของสารเพอร์ริลีน โดยอาศัยการคำนวณทางเคมีควอนตัม ใช้ระเบียบวิธี Density Functional Theory (DFT) ที่ระดับความถูกต้อง B3LYP/SVP พบว่าวิธีทางเคมีควอนตัมสามารถใช้ ปรับแต่งค่าพลังงานแถบช่องว่าง (energy gap) ค่าความยาวคลื่นในการดูดกลืนแสง (λabs) ค่าความยาวคลื่นในการคายแสง (λabs) ได้โดยการปรับความยาวคอนจูเกชันของโมเลกุลเป้าหมาย ดังนั้นเพื่อเป็นการศึกษาถึงโมเลกุลที่สังเคราะห์ได้ในห้องปฏิบัติการเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการคำนวณ และเพื่อทำนายโมเลกุลเป้าหมายใหม่ที่ยังไม่ได้ทำการสังเคราะห์ การศึกษาทางทฤษฎีโดยวิธีทางเคมีควอนตัมถือได้ว่ามีความสำคัญอย่างยิ่งในการพัฒนาวัสดุอินทรีย์ที่มีระบบคอนจูเกต เพื่อใช้เป็นสารส่งผ่านประจุบวกในการประยุกต์ใช้ในไดโอดเรืองแสงอินทรีย์ (Organic Light Emitting Diodes, OLEDs) และนอกจากนั้นผลการทดลอง สามารถสรุปได้ว่าวิธี TDDFT นี้เป็นวิธีที่เหมาะสมและถูกต้องในการทำนายสมบัติต่างๆ ของโมเลกุลเป้าหมาย

241773

In this study, we theoretically reported the electronic and optical properties of a series of novel a-fluorenyl oligothiophenes and series of perylene derivatives. The ground state conformation, energy gap, absorption, and emission properties have been investigated using density functional theory (DFT), time-dependent DFT (TDDFT) method at B3LYP/SVP level, as implemented in Turbomole 5.7 program package. We found that it is possible to fine-tune the energy level and emission color of the resulting materials by adjusting the conjugation length of target molecules. The results are pointed out that in order to rationalize the experimentally observed properties of these known materials and also predict those of unknown ones, quantum chemistry calculations are very essential for the investigations on π-conjugated oligothiophenes as hole-transporting materials in OLEDs. It has, therefore, been demonstrated that TDDFT, implemented in the Turbomole5.7 program package, provides an accurate performance and can be one of the useful and affordable methods for future studies involving conjugated organic materials for OLEDs applications.