

1. ความสำคัญและที่มาของโครงการวิจัย

ในปัจจุบันนี้วิทยาศาสตร์ทางด้านนาโนและนาโนเทคโนโลยี (Nanoscience and Nanotechnology) ที่เกี่ยวข้องกับการศึกษาระบบที่มีขนาดเล็กๆในระดับนาโนเมตร ได้รับความสนใจอย่างมากจากนักวิจัยทั้งในด้านการทดลองและด้านทฤษฎี เนื่องจากความต้องการเทคโนโลยีสิ่งประดิษฐ์ใหม่ๆมีแนวโน้มทำให้มีขนาดเล็กและประสิทธิภาพสูงซึ่งจะมีความสะดวกและงานต่อการใช้งานและนอกจากนี้ยังไม่สร้างผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม การสร้างฟิล์มบางสำหรับการประยุกต์ใช้งานด้านเทคโนโลยีการตรวจจับสารเคมี (Chemical Sensors) การกักเก็บพลังงานแสง (Solar Cell) อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ทางแสง (Optical Electronic Devices) ก็เป็นหนึ่งในหลายงานวิจัยที่มีความสำคัญและมีบทบาทอย่างมากในเชิงอุตสาหกรรมสิ่งประดิษฐ์ แต่อย่างไรก็ตามการสร้างอุปกรณ์ที่ขนาดเล็ก (Nanodevices) ก็ยังเป็นปัญหาอยู่ในขณะนี้ เพราะว่ามันนอกเหนือจากขนาดของระบบที่ขนาดเล็กในระดับนาโนแล้ว กฎเกณฑ์หรือทฤษฎีบางอย่างที่เคยใช้อธิบายพฤติกรรมของอิเล็กตรอนในอดีตไม่อาจใช้ได้กับระบบแบบนี้ ดังนั้นจึงทำให้มีการสร้างแบบจำลองเชิงทฤษฎีต่างๆขึ้นมา เพื่อที่จะอธิบายระบบและนอกจากนี้ก็มีการพัฒนาเทคนิควิธีการทดลองใหม่ๆสำหรับวิเคราะห์และแปลความหมาย เพื่อให้เข้าใจกลไกและกระบวนการทางเคมีต่างๆที่เกิดขึ้นในระบบดังกล่าว ในปัจจุบันแม้ว่าจะมีเครื่องมือที่สามารถวิเคราะห์ระบบในระดับนาโนได้ดี เช่น Atomic Force Microscopy (AFM), Scanning Tunneling Microscopy (STM), Optical Spectroscopy เป็นต้น แต่ข้อมูลบางอย่างที่เกี่ยวข้องกับพฤติกรรมในระดับอะตอมหรือโมเลกุลก็ยังหาไม่ได้จากการทดลองเหล่านี้ เนื่องจากความซับซ้อนของระบบและการทดลองที่ทำได้ยาก³ ด้วยเหตุนี้จึงทำให้เทคนิคการจำลองระบบด้วยคอมพิวเตอร์^{4,5} (Computer Modeling and Simulations) เข้ามามีบทบาทอย่างมากในการศึกษาปัญหาวิจัยเกี่ยวกับระบบในระดับนาโนเพราะว่าการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์สามารถทำได้ง่ายและให้ผลที่สามารถจะเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงได้ และนอกจากนี้บ่อยครั้งที่การทดลองจริงไม่สามารถจะดำเนินการได้เพราะข้อจำกัดในเรื่องของเครื่องมือ ตลอดจนอุปกรณ์ที่มีราคาแพง หรือแม้แต่ในแง่ของขีดจำกัดทางเทคโนโลยีเองที่ไม่สามารถทำให้ทำการทดลองจริงได้

ฟิล์มบางของโมเลกุลพอร์ไฟริน (Porphyrins) และสารประกอบของพอร์ไฟริน (Porphyrin Compounds) กำลังได้รับความสนใจเนื่องจากมีความหลากหลายในการประยุกต์ใช้งาน เช่น ใช้ทำเป็นวัสดุตัวนำไฟฟ้าด้วยแสง (Photoconductors) เซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ (Solar Cell) วัสดุเก็บข้อมูลด้วยแสง (Optical Data Storage Devices) และวัสดุตรวจจับ

³ Benjamin, I., Chemical Reactions and Solvation at Liquid Interfaces: A Microscopic Perspective. Chem. Rev., 1996. 96: p. 1449-1475.

² Lu, D., et al., The Role of Molecular Modeling in Bionanotechnology. Phys. Biol., 2006. 3: p. 40-53

³ Gilmer, G.H., H. Huang, and C. Roland, *Thin Film Deposition: Fundamentals and Modeling*. Comput. Mat. Sci., 1998. 12: p. 354-380

สารเคมี (Chemical Sensors) การเตรียมฟิล์มบางของสารออร์แกนิก (Organics Materials) เหล่านี้ก็เป็นกระบวนการหนึ่งที่มีสำคัญมากต่อประสิทธิภาพของฟิล์มที่จะนำไปประยุกต์ใช้งาน และหนึ่งในหลายวิธีที่นิยมกันคือการเตรียมฟิล์มโดยใช้เทคนิค LB (Langmuir-Blodgett Technique) เนื่องจากเทคนิคนี้สามารถที่จะควบคุมระดับความหนาของฟิล์มและการจัดเรียงตัวของโมเลกุลได้ อย่างไรก็ตามคุณภาพของฟิล์มที่ได้จะขึ้นอยู่กับเงื่อนไขการทดลองและธรรมชาติของสารที่ใช้ในการสร้างฟิล์ม ดังนั้นในการวิเคราะห์ลักษณะโครงสร้างของฟิล์มที่ผิวน้ำ (Water Subphase) และที่ผิวซับสเตรท (Substrate) จึงมีความสำคัญและจำเป็นเบื้องต้นในการที่จะเข้าใจถึงกลไกของการสร้างฟิล์มและคุณสมบัติของฟิล์มที่เกิดขึ้น และการสร้างฟิล์มที่ผิวน้ำของโมเลกุลเหล่านี้จึงเป็นอีกประเด็นหนึ่งที่นักวิจัยได้มีการศึกษาอย่างแพร่หลายเพื่อที่จะเข้าใจถึงลักษณะโครงสร้างและการวางตัวของโมเลกุลที่ผิวย่อยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ หลายๆเทคนิคทางการทดลองสำหรับการวิเคราะห์โครงสร้างที่รอยต่อระหว่างของเหลวกับอากาศ เช่น Second-Harmonic and Sum-Frequency Spectroscopy, FT-IR Spectroscopy, X-Ray Diffractions รวมทั้งเทคนิควิธีการจำลองเชิงโมเลกุล⁶ (Molecular Simulations) ได้เข้ามามีบทบาทอย่างมากในการศึกษาปัญหาเหล่านี้ แต่อย่างไรก็ตามเนื่องจากความซับซ้อนของปัญหาและข้อจำกัดในเครื่องมือและการทดลอง ด้วยเหตุนี้วิธีการจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Simulations) จึงได้รับความสนใจอย่างแพร่หลาย ปัจจุบันวิธีการจำลองเชิงโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์ เช่น วิธีโมเลกุลาร์ไดนามิกส์ (Molecular Dynamics, MD) หรือ วิธีมอนติคาร์โล (Monte Carlo, MC) ได้รับการยอมรับอย่างกว้างขวางและนำไปใช้ในหลายๆสาขาวิทยาศาสตร์ ได้แก่ เคมี ชีววิทยา และฟิสิกส์ ทั้งนี้เป็นเพราะว่าสามารถให้ข้อมูลที่เป็นรายละเอียดในระดับอะตอม เช่น ตำแหน่ง ความเร็ว ความเร่ง เป็นต้น ซึ่งข้อมูลเหล่านี้จะถูกเปลี่ยนไปเป็นข้อมูลในระดับมหภาคที่สามารถวัดได้ด้วยการทดลอง เช่น อุณหภูมิ ความดัน ความจุความร้อน เป็นต้น โดยผ่านวิธีการทางกลศาสตร์เชิงสถิติ (Statistical Mechanics) นอกจากนี้การจำลองระบบด้วยคอมพิวเตอร์ยังเป็นเครื่องมือที่ดีในการทดสอบความถูกต้องของแบบจำลองทางทฤษฎีเมื่อเทียบกับผลการทดลอง และ ในทางกลับกันผลการทดลองที่ได้จากการจำลองระบบยังสามารถที่จะให้ข้อมูลที่น่าไปสู่การออกแบบวิธีการทดลองให้มีประสิทธิภาพดียิ่งขึ้น

สำหรับในโครงการวิจัยนี้จะทำการจำลองเชิงโมเลกุลของการสร้างฟิล์มพอร์ไฟรินและสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไฟรินกับไอออนโลหะทรานซิชันที่เกิดที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ (Water-Air Interface) เพื่อศึกษาลักษณะฟิล์มที่เกิดขึ้นและวิเคราะห์หาโครงสร้างของฟิล์มแบบที่มีและไม่มีไอออนโลหะว่ามีความแตกต่างกันอย่างไร การวางตัวของโมเลกุลพอร์ไฟริน โครงสร้างการล้อมรอบของโมเลกุลกลน้ำ รวมทั้งศึกษาคุณสมบัติเชิงพลวัตของโมเลกุลเหล่านี้ด้วย ซึ่งข้อมูลเหล่านี้จะเกี่ยวพันกับคุณสมบัติของฟิล์มที่จะนำไปใช้งานต่อไป นอกจากนี้ในโครงการวิจัยยังจะศึกษาผลของความเข้มข้นพอร์ไฟรินต่อโครงสร้างและความเสถียรของฟิล์ม

⁶ มีบทความวิจัย 506 เรื่องที่เกี่ยวกับการจำลองระบบฟิล์ม monolayer ที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ โดยสืบค้นจากฐานข้อมูล ISI