ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
246366

MRG5080218 ผศ.ดร. ศรีประจักร์ ครองสุข

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ
การสร้างรูปแบบและจำลองในระดับนาโนของฟิล์มพอร์ไพรินแบบชั้นเดียวที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ

โดย
ผศ. ดร. ศรีประจักร์ ครองสุข และคณะ

มีนาคม 2554

b00251054

ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
246366

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ
การสร้างรูปแบบและจำลองในระดับนาโนของฟิล์มพอร์ไพรินแบบชั้นเดียวที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ

โดย
ผศ. ดร. ศรีประจักร์ ครองสุข และคณะ

สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ ห้องสมุดงานวิจัย

มีนาคม 2554

 b00251054 246366

สัญญาเลขที่ MRG5080218

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ
การสร้างรูปแบบและจำลองในระดับนาโนของฟิล์มพอร์ไพรินแบบชั้นเดียวที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ

	ผู้วิจัย	สังกัด
1.	ผศ. ดร. ศรีประจักร์ ครองสุข	ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น
2.	ผศ. ดร. ธีรเกียรติ์ เกิดเจริญ	ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล

สนับสนุนโดยสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา (สกอ.) และสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.)

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย สกอ. และ สกว.ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

กิตติกรรมประกาศ

คณะผู้วิจัยขอขอบคุณสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) และสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา (สกอ.) ที่ให้การสนับสนุนโครงการวิจัยนี้จนสำเร็จลุล่วง ผู้วิจัยขอขอบคุณภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น ที่สนับสนุนการทำวิจัยทั้งในแง่สถานที่และสิ่งอำนวยความสะดวกต่างๆ ขอขอบคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ธีรเกียรติ์ เกิดเจริญ อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการวิจัยนี้ ที่ให้คำแนะนำและข้อเสนอแนะที่เป็นประโยชน์สำหรับการทำวิจัยด้วยดีเสมอมา

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : MRG5080218

ชื่อโครงการ : การสร้างรูปแบบและจำลองในระดับนาโนของฟิล์มพอร์ไพรินแบบชั้นเดียว ที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ

ชื่อนักวิจัย : ผศ. ดร. ศรีประจักร์ ครองสุข มหาวิทยาลัยขอนแก่น

ที่อยู่อีเมลล์ : **srikro@kku.ac.th**

ระยะเวลาโครงการ : 2 ปี

246366

ในโครงการวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาโครงสร้างแบบชั้นโมเลกุลเดียวของพอร์ไฟน์และสมบัติเชิงพลวัตโดยใช้เทคการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล แบบจำลองฟังก์ชันศักย์ระหว่างโมเลกุลพอร์ไฟน์กับน้ำได้ทำการพัฒนาขึ้นมาใหม่บนพื้นพื้นฐานการคำนวณทางควอนตัม ผลที่ได้นี้ถูกนำไปใช้ในการศึกษาสมบัติเชิงโครงสร้างของสารละลายพอร์ไฟน์ในน้ำด้วยระเบียบวิธีการจำลองมอนติ คาร์โล การศึกษานี้แสดงให้เห็นว่ามีน้ำจำนวนสองโมเลกุลที่อยู่ภายในชั้นแรกสุดของสารละลายพอร์ไฟน์ กล่าวคือ น้ำหนึ่งโมเลกุลอยู่เหนือระนาบของโมเลกุลพอร์ไฟน์และน้ำอีกโมเลกุลหนึ่งอยู่ใต้ระนาบของโมเลกุลพอร์ไฟน์ โดยที่น้ำแต่ละโมเลกุลจะหันอะตอมไฮโดรเจนทั้งสองเข้าหาจุดศูนย์กลางมวลของพอร์ไฟน์ รูปแบบการวางตัวแบบนี้สอดคล้องเป็นอย่างดีกับผลการคำนวณควอนตัมของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลพอร์ไฟน์กับน้ำที่อยู่สภาวะก๊าซ ได้ทำศึกษาผลของความเข้นข้นเชิงพื้นผิวต่อโครงสร้างและความเสถียรของฟิล์มชั้นโมเลกุลเดียวพอร์ไฟน์ที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศโดยใช้วิธีการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล มีการศึกษาที่ความเข้มข้นแตกต่างกันจำนวนห้าความเข้มข้นเพื่อให้คลอบคลุมทุกช่วงของค่า π-A ไอโซเทอม ผลการจำลองนี้แสดงให้เห็นว่า การเพิ่มขึ้นของจำนวนโมเลกุลพอร์ไฟน์ไม่เพียงแต่ทำให้ความหนาแน่นของน้ำที่รอยต่อลดลงอย่างมีนัยสำคัญแล้วแต่ยังมีผลต่อค่าความตึงผิวของฟิล์มด้วย ค่าความตึงผิวที่คำนวณได้บ่งชี้ให้เห็นถึงการเปลี่ยนวัฏภาคของฟิล์มซึ่งสอดคล้องกับวัฏภาคก๊าซ (gas) วัฏภาคขยาย (expanded) วัฏภาคควบแน่น (condensed) และวัฏภาคการพังทะลาย (collapsed) พันธะไฮโดรเจนระหว่างพอร์ไฟน์กับน้ำมีบทบาทที่สำคัญมากในการสร้างฟิล์มแบบชั้นโมเลกุลเดียว โดยเฉพาะที่ความเข้นข้นต่ำ

คำหลัก : พอร์ไฟน์ชั้นโมเลกุลเดียว, พลวัตเชิงโมเลกุล, มอนติคาร์โล, โครงสร้างไฮเดชัน ผลของความเข้นข้น

Abstract

Project Code: MRG5080218

Project Title: Nanoscale Modeling and Simulations of Porphyrin Monolayer Film at the Water-Air Interface

Investigator: Assist. Prof. Dr. Sriprajak Krongsuk, Khon Kaen University

E-mail Address: srikro@kku.ac.th

Project Period: 2 Years

246366

In this project the porphine (PH_2) monolayer structure and dynamical properties have been investigated using a molecular dynamics simulation technique. The porphine-water potential model has been newly developed base on *ab initio* calculations. Consequently, the structural properties of the PH_2 molecule in aqueous solution have been investigated using the Monte Carlo method. This study reveals that there are two water molecules in the first hydration shell of the PH_2 molecule ie., one lies above and another one lies below the PH_2's plane. Each of the two water molecule is favored to point two hydrogen atoms to the center of mass of the PH_2. This orientation is good agreement with the *ab initio* calculation of the PH_2-water interaction in a gas phase. The effect of surface concentration on the structure and stability of the PH_2 monolayers at the water-gas interface have been studied by using molecular dynamics simulation. Five monolayer systems having different surface concentrations were investigated in order to cover a full range of the experimental π-A isotherm. The simulation results show that increment of a number of the PH_2 molecules not only affects the significantly decreasing water density at the interface but also the monolayer surface tensions. The calculated surface tensions of the five systems indicate that the monolayer phase transfer corresponding to gaseous, expanded, condensed, and collapsed phases are observed. The hydrogen bonding between water and the PH_2 molecules at the interface plays an important role on the monolayer film formation, especially at the lower surface concentrations.

Keywords: Porphine Monolayers, Molecular Dynamics, Monte Carlo, Hydration Structure, Concentration Effect

หน้าสรุปโครงการ (Executive Summary)

ทุนพัฒนาศักยภาพในการทำงานวิจัยของอาจารย์รุ่นใหม่

1. **ชื่อโครงการ**

   (ภาษาไทย) การสร้างรูปแบบและจำลองในระดับนาโนของฟิล์มพอร์ไพรินแบบชั้นเดียวที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ

   (ภาษาอังกฤษ) Nanoscale Modeling and Simulations of Porphyrin Monolayer Film at the Water-Air Interface

2. **ชื่อหัวหน้าโครงการวิจัย หน่วยงานที่สังกัด ที่อยู่ หมายเลขโทรศัพท์ โทรสาร และ** e-mail

   ผู้วิจัยหลัก (ชื่อภาษาไทย) ผศ. ดร. ศรีประจักร์ ครองสุข

   (ชื่อภาษาอังกฤษ) Assist. Prof. Dr. Sriprajak Krongsuk

   วุฒิการศึกษาสูงสุด Ph. D. (Physics), Mahidol University, Thailand

   ตำแหน่ง อาจารย์ ระดับ 5

   ที่อยู่ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น ถนนมิตรภาพ

   อ.เมือง จ. ขอนแก่น 40002

   โทรศัพท์ 043-202222-9 ต่อ 2248 โทรสาร 043-202374 E-mail: srikro@kku.ac.th

3. **สาขาวิชาที่ทำการวิจัย**

   การคำนวณทางเคมีควอนตัม (Quantum Chemical Calculations) และการจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Simulations) ของระบบโมเลกุลขนาดใหญ่ (Macromolecules)

4. **งบประมาณทั้งโครงการ** 480,000 **บาท** (สี่แสนแปดหมื่นบาทถ้วน)

5. **ระยะเวลาดำเนินงาน** 2 **ปี**

6. **ได้เสนอโครงการนี้ หรือโครงการที่มีส่วนเหมือนกับเรื่องนี้บางส่วนเพื่อขอทุนต่อแหล่งทุนอื่นที่ใดบ้าง**

   ☒ ไม่ได้เสนอต่อแหล่งทุนอื่น

   ☐ เสนอต่อแหล่งทุนอื่น

7. **ปัญหาที่ทำการวิจัย และความสำคัญของปัญหา**

ฟิล์มบางของโมเลกุลพอร์ไพริน (Porphyrins) และสารประกอบของพอร์ไพริน (Porphyrin Compounds) กำลังได้รับความสนใจเนื่องจากมีความหลากหลายในการประยุกต์ใช้งาน เช่น ใช้ทำเป็นวัสดุตัวนำไฟฟ้าด้วยแสง (Photoconductors) เซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ (Solar Cell) วัสดุเก็บข้อมูลด้วยแสง (Optical Data Storage Devices) และวัสดุตรวจจับสารเคมี (Chemical Sensors) การเตรียมฟิล์มบางของสารออร์แกนนิกค์ (Organics Matterials) เหล่านี้ก็เป็นกระบวนการหนึ่งที่มีสำคัญมากต่อประสิทธิภาพของฟิล์มที่จะนำไปประยุกต์ใช้งานและหนึ่งในหลายวิธีที่นิยมกันคือการเตรียมฟิล์มโดยใช้เทคนิค LB (Langmuir-Blodgettt Technique) เนื่องจากเทคนิคนี้สามารถที่จะควบคุมระดับความหนาของฟิล์มและการจัดเรียงตัวของโมเลกุลได้ อย่างไรก็ตามคุณภาพของฟิล์มที่ได้จะขึ้นอยู่กับเงื่อนไขการทดลองและธรรมชาติของสารที่ใช้ในการสร้างฟิล์ม ดังนั้นในการวิเคราะห์ลักษณะโครงสร้างของฟิล์มที่ผิวน้ำ (Water Subphase) และที่ผิวซับสเตรท (Substrate) จึงมีความสำคัญและจำเป็นเบื้องต้นในการที่จะเข้าใจถึงกลไกของการสร้างฟิล์มและคุณสมบัติของฟิล์มที่เกิดขึ้น และการสร้างฟิล์มที่ผิวน้ำของโมเลกุลเหล่านี้จึงเป็นอีก

ประเด็นหนึ่งที่นักวิจัยได้มีการศึกษาอย่างแพร่หลายเพื่อที่จะเข้าใจถึงลักษณะโครงสร้างและการวางตัวของโมเลกุลที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ หลายๆเทคนิคทางการทดลองสำหรับการวิเคราะห์โครงสร้างที่รอยต่อระหว่างของเหลวกับอากาศ เช่น Second-Harmonic and Sum-Frequency Spectroscopy, FT-IR Spectroscopy, X-Ray Diffractions รวมทั้งเทคนิควิธีการจำลองเชิงโมเลกุล[1] (Molecular Simulations) ได้เข้ามามีบทบาทอย่างมากในการศึกษาปัญหาเหล่านี้ แต่อย่างไรก็เนื่องจากความซับซ้อนของปัญหาและข้อจำกัดในเครื่องมือและการทดลอง ด้วยเหตุนี้วิธีการจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Simulations) จึงได้รับความสนใจอย่างแพร่หลาย ปัจจุบันวิธีการจำลองเชิงโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์ เช่น วิธีโมเลคิวลาร์ไดนามิกส์ (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 ในทางกลับกันผลการทดลองที่ได้จากการจำลองระบบยังสามารถที่จะให้ข้อมูลที่นำไปสู่การออกแบบวิธีการทดลองให้มีประสิทธิภาพดียิ่งขึ้น

สำหรับในโครงการวิจัยนี้จะทำการจำลองเชิงโมเลกุลของการสร้างฟิล์มพอร์ไพรินและสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไพรินกับไอออนโลหะทรานซิชันที่เกิดที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ (Water-Air Interface) เพื่อศึกษาลักษณะฟิล์มที่เกิดขึ้นและวิเคราะห์หาโครงสร้างของฟิล์มแบบที่มีและไม่มีไอออนโลหะว่ามีความแตกต่างกันอย่างไร การวางตัวของโมเลกุลพอร์ไพริน โครงสร้างการล้อมรอบของโมเลกุลกุลน้ำ รวมทั้งศึกษาคุณสมบัติเชิงพลวัตของโมเลกุลเหล่านี้ด้วย ซึ่งข้อมูลเหล่านี้จะเกี่ยวพันกับคุณสมบัติของฟิล์มที่จะนำไปใช้งานต่อไป นอกจากนี้ในโครงการวิจัยยังจะศึกษาผลของความเข้มข้นพอร์ไพรินต่อโครงสร้างและความเสถียรของฟิล์มด้วย สำหรับการจำลองเชิงโมเลกุลของระบบการสร้างฟิล์มที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศนั้นแบบจำลองฟังก์ชันศักย์ (Potential Function Models) ซึ่งใช้แทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในระบบ จะถูกทำการพัฒนาขึ้นมาใหม่โดยวางอยู่บนพื้นฐานการคำนวณทางเคมีควอนตัม (Quantum Chemical Calculations) เพื่อที่จะให้สามารถบรรยายระบบโมเลกุลได้อย่างถูกต้องและน่าเชื่อถือเพื่อจะนำไปสู่การเข้าใจได้ดียิ่งขึ้นสำหรับกลไกของการสร้างฟิล์มพอร์ไพรินและบทบาทของโมเลกุลน้ำต่อโครงสร้างและความเสถียรของฟิล์ม

8. **วัตถุประสงค์**

(1) สร้างแบบจำลองฟังก์ชันศักย์ (Potential Function Models) ที่ใช้อธิบายอันตรกิริยาระหว่างคู่โมเลกุลพอร์ไพริน-พอร์ไพริน และ พอร์ไพริน-น้ำ สำหรับระบบโมเลกุลพอร์ไพรินที่มีและไม่มีการสร้างสารประกอบเชิงซ้อนกับไอออนโลหะทรานซิชัน (Transition Metal Ions) โดยวางอยู่บนพื้นฐานการคำนวณทางเคมีควอนตัม

(2) เพื่อพัฒนาโปรแกรมสำหรับทำการวิเคราะห์หาข้อมูลเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัต (Structural and Dynamical Properties) ของการสร้างฟิล์มพอร์ไพรินที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ

---

[1] มีบทความวิจัย 506 เรื่องที่เกี่ยวกับการจำลองระบบฟิล์ม momolayer ที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ โดยสืบค้นจากฐานข้อมูล ISI Web of Science ระหว่างปี 2001-2006

(3) เพื่อศึกษาลักษะโครงสร้างของฟิล์มพอร์ไพรินแบบที่มีและไม่มีการสร้างสารประกอบเชิงซ้อนกับไอออนโลหะทรานซิชัน

(4) เพื่อศึกษาผลความหนาแน่นเชิงพื้นผิว (Surface Density) ของโมเลกุลพอร์ไพรินต่อโครงสร้า งและความเสถียรของฟิล์มแบบชั้นโมเลกุลเดียว (Monolayer Films)

9. ระเบียบวิธีวิจัย

9.1 สร้างแบบจำลองฟังก์ชันศักย์ (Potential Function Models)

การพัฒนาฟังก์ชันศักย์ที่ใช้อธิบายอันตรกิริยาแบบคู่ระหว่างโมเลกุลในระบบโดยใช้วิธีการคำนวณทางเคมีควอนตัมจะมีขั้นตอนการดำเนินการดังนี้

(1) ***การหารูปแบบโครงสร้างของโมเลกุล***

โครงสร้างโมเลกุลของพอร์ไพรินและสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไพรินกับไอออนโลหะทรานซิชันจะหาโดยการคำนวณทางควอนตัมเพื่อให้หาโครงสร้างที่ดีที่สุด[2] (Geometry Optimization Methods)

(2) ***การเลือกชุดฟังก์ชันพื้นฐาน และระดับของทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ***

คำนวณหาพลังงานยึดจับ (Binding Energy) ระหว่างคู่ของ พอร์ไพริน-น้ำ และพอร์ไพริน-พอร์ไพรินในแนวที่ให้พลังงานต่ำสุดโดยการทดสอบกับหลายๆชุดฟังก์ชันพื้นฐาน (Basis Set) เช่น 3-21G, 6-31G, 6-31G**, DZP และหลายระดับของทฤษฎี เช่น Hartree-Fock (HF), Perturbation Theory, และ Density Functional Theory (DFT) เพื่อดูว่าชุดเบซิสฟังก์ชันและระดับทฤษฎีแบบไหนจึงจะเหมาะสมสำหรับทำการคำนวณระบบโมเลกุลแบบนี้

(3) ***การเลือกรูปแบบการวางตัวของคู่โมเลกุล***

กำหนดรูปแบบการวางตัวของโมเลกุลหนึ่งรอบๆอีกโมเลกุลหนึ่งที่หยุดนิ่งอยู่กับที่ ซึ่งในที่นี้จะให้โมเลกุลพอร์ไพรินอยู่กับที่ แล้วเลือกรูปแบบการวางตัวของโมเลกุลน้ำรอบๆโมเลกุลพอร์ไพริน สำหรับคู่โมเลกุล พอร์ไพริน-น้ำ ส่วนคู่โมเลกุล พอร์ไพริน-พอร์ไพริน ก็จะทำคล้ายๆกัน หลังจากที่ได้เลือกรูปแบบแล้วก็จะทำการสร้างตำแหน่งของคู่อันตรกิริยาที่ระยะทางต่างๆกันเพื่อให้ได้จำนวนจุดมากพอที่จะสามารถแทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทั้งสองเหล่านี้ได้ทุกรูปแบบการวางตัว

(4) ***การปฏิบัติการคำนวณทางควอนตัม***

หลังจากที่ได้จำนวนจุดหลายจุดแล้วขั้นตอนต่อมาก็คือการคำนวณพลังงานยึดจับระหว่างคู่โมเลกุล สำหรับในขั้นตอนนี้จะใช้เวลามากในการคำนวณดังนั้นการเลือกชุดฟังก์ชันและระดับทฤษฎีการคำนวณจึงต้องให้เหมาะสมดังได้กล่าวมาแล้ว

(5) ***การเลือกรูปแบบฟังก์ชันที่เหมาะสม***

ข้อมูลพลังงานที่ได้จากการคำนวณทางควอนตัมจะนำไปใช้ในการปรับฟังก์ชันศักย์โดยใช้เทคนิค Nonlinear Data Fitting เพื่อหาค่าพารามิเตอร์ที่ให้ผลของการ Fitting ดีที่สุด ซึ่งโดยทั่วไปรูปแบบของฟังก์ชันศักย์ที่ใช้ในการทำการจำลองเชิงโมเลกุลจะแทนอันตรกิริยาที่เป็นแรงผลักและแรงดูดซึ่งเป็นแรงระยะสั้นๆ (van der Waals force) และแทนอันตรกิริยาที่เป็นแรงทางไฟฟ้า (Coulomb force)

9.2 การจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Simulations)

หลังจากที่ได้ทำการพัฒนาฟังก์ชันศักย์แล้วตามข้อ (9.1) ขั้นตอนต่อมาก็คือทำการจำลองระบบด้วยวิธีโมเลคคิวลาร์ไดนามิกส์ (Molecular Dynamics Simulations, MD) โดยเริ่มต้นจะกำหนดขนาดกล่อง

---

[2] โครงสร้างที่ให้พลังงานต่ำที่สุด

ลูกบาศก์บรรจุโมเลกุลน้ำ โมเลกุลพอร์ไพริน และอากาศ เพื่อให้สอดคล้องกับเงื่อนไขทางการทดลองจริง จากนั้นก็ทำการกำหนดค่าตัวแปรต่างๆที่เกี่ยวข้องในการทำการจำลองเชิงโมเลกุล เช่น เวลาที่ใช้ในการคำนวณ ช่วงเวลาในการคำนวณ อุณหภูมิ ความดัน และอื่นๆเป็นต้น ทุกๆช่วงเวลาในการเคลื่อนอนุภาคก็จะมีการคำนวณหาพลังงานรวมทั้งหมดในระบบ อุณหภูมิ และปริมาณอื่นๆที่สนใจ รวมทั้งการเก็บข้อมูลที่เป็นตำแหน่ง และ ความเร็ว ของทุกอนุภาคด้วยเพื่อนำไปใช้ในการวิเคราะห์ต่อไป

9.3 **การวิเคราะห์ข้อมูล** (Data Analysis)

ขั้นตอนนี้จะเป็นการนำเอาข้อมูลที่ได้จากการทำใน (9.2) มาทำการวิเคราะห์ผลตามหลักวิชาสถิติและคำนวณหาสมบัติเชิงโครงสร้าง เช่น ฟังก์ชันการกระจายเชิงรัศมี (Radial Distribution Functions) การวางตัวของโมเลกุล (Molecular Orientations) การกระจายความหนาแน่น (Density Profiles) การวิเคราะห์จำนวนพันธะไฮโดรเจน (Hydrogen Bond Analysis) และสมบัติเชิงพลวัต เช่น ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ (Diffusion Coefficient) ฟังก์ชันความเกี่ยวพันทางเวลา (Time Correlation Functions) เป็นต้น จากนั้นจะนำข้อมูลเหล่านี้มาตีความหมายทั้งในเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณเพื่อจะนำไปสู่ความเข้าใจถึงกลไกของการสร้างฟิล์ม ลักษณะโครงสร้างและความเสถียรของฟิล์ม รวมทั้งเข้าใจบทบาทน้ำต่อการสร้างฟิล์มและการวางตัวของโมเลกุลพอร์ไพริน

สารบัญ

กิตติกรรมประกาศ.....3
บทคัดย่อ (ไทย).....4
บทคัดย่อ (อังกฤษ).....5
สรุปโครงการ (Executive Summary).....6
1. ความสำคัญและที่มาของโครงการวิจัย.....9
2. วัตถุประสงค์ของโครงการ.....13
3. ผลงานวิจัยที่ผ่านมา.....13
4. ระเบียบวิธีการทดลอง.....15
4.1 สร้างแบบจำลองฟังก์ชันศักย์.....15
4.2 การจำลองเชิงโมเลกุล.....17
4.3 การวิเคราะห์ข้อมูล.....18
5. ขอบเขตของการวิจัย.....18
6. ผลการทดลอง.....19
6.1 การพัฒนาฟังก์ชันศักย์คู่บนพื้นฐาน
การคำนวณทางกลศาสตร์ควอนตัม.....19
6.2 การจำลองเชิงโมเลกุลด้วยระเบียบวิธี Monte Carlo.....20
6.3 การจำลองพลวัตของฟิล์มพอไพน์ที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ.....21
6.4 ผลการจำลองระบบฟิล์มชั้นเดียวพอร์ไฟน์.....22
7. สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ.....24
8. ผลลัพธ์ที่ได้จากโครงการ.....25
เอกสารอ้างอิง.....26
ภาคผนวก.....30