



ด้วย สำหรับการจำลองเชิงโมเลกุลของระบบการสร้างฟิล์มที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศในแบบจำลองฟังก์ชันศักย์ (Potential Function Models) ซึ่งใช้แทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในระบบ จะถูกทำการพัฒนาขึ้นมาใหม่โดยวางอยู่บนพื้นฐานการคำนวณทางเคมีควอนตัม (Quantum Chemical Calculations) เพื่อที่จะให้สามารถบรรยายระบบโมเลกุลได้อย่างถูกต้องและน่าเชื่อถือเพื่อจะนำไปสู่การเข้าใจได้ดียิ่งขึ้นสำหรับกลไกของการสร้างฟิล์มพอร์ไฟรินและบทบาทของโมเลกุลน้ำต่อโครงสร้างและความเสถียรของฟิล์ม



2. วัตถุประสงค์ของโครงการ

- (1) สร้างแบบจำลองฟังก์ชันศักย์ (Potential Function Models) ที่ใช้อธิบายอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลพอร์ไฟริน-พอร์ไฟริน และ พอร์ไฟริน-น้ำ สำหรับระบบโมเลกุลพอร์ไฟรินที่มีและไม่มีโครงสร้างประกอบเชิงซ้อนกับไอออนโลหะทรานซิชัน (Transition Metal Ions) โดยวางอยู่บนพื้นฐานการคำนวณทางเคมีควอนตัม
- (2) เพื่อพัฒนาโปรแกรมสำหรับการวิเคราะห์หาข้อมูลเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัต (Structural and Dynamical Properties) ของการสร้างฟิล์มพอร์ไฟรินที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ
- (3) เพื่อศึกษาลักษณะโครงสร้างของฟิล์มพอร์ไฟรินแบบที่มีและไม่มีโครงสร้างประกอบเชิงซ้อนกับไอออนโลหะทรานซิชัน
- (4) เพื่อศึกษาผลความหนาแน่นเชิงพื้นผิว (Surface Density) ของโมเลกุลพอร์ไฟรินต่อโครงสร้างและความเสถียรของฟิล์มแบบชั้นโมเลกุลเดี่ยว (Monolayer Films)

3. ผลงานวิจัยที่ผ่านมา

ฟิล์มบางของโมเลกุลพอร์ไฟริน (Porphyrins) และสารประกอบเชิงซ้อนของพอร์ไฟรินกับไอออนโลหะทรานซิชัน (Porphyrin Complexed with Transition Metal Ions) ได้รับความสนใจและทำการศึกษาอย่างกว้างจากนักวิจัยด้านการทดลองและด้านทฤษฎี [1-15] เนื่องจากมีคุณสมบัติทางแสงและการนำไฟฟ้าที่ดี (Optical and Conductivity Properties) จึงทำให้มีการนำไปประยุกต์ใช้ในหลายด้านทางเทคโนโลยี เช่น ตัวนำไฟฟ้าด้วยแสง [11] (Photoconductor) เซลล์แสงอาทิตย์ [7] (Solar Cell) อุปกรณ์เก็บข้อมูลด้วยแสง [16] (Optical Data Storages) และอุปกรณ์ตรวจจับสารเคมี [17] (Chemical Sensors) หลายเทคนิควิธีสำหรับการเตรียมฟิล์มบางของโมเลกุลพอร์ไฟรินได้ถูกนำมาใช้ เพื่อให้ได้ฟิล์มที่มีคุณสมบัติที่ดีและเหมาะสมต่อการนำไปประยุกต์ใช้งาน และหนึ่งในหลายวิธีที่เป็นที่ยอมรับและใช้กันอย่างแพร่หลายสำหรับการเตรียมฟิล์มของสารอินทรีย์ (Organic Materials) ก็คือ เทคนิค Langmuir-Blodgett (LB) [18] ซึ่งจุดเด่นของเทคนิคนี้คือสามารถควบคุมความหนาของฟิล์มบนซับสเตรทได้ในระดับโมเลกุลและเป็นที่ทราบกันดีว่าเทคนิควิธีนี้เกี่ยวข้องกับการสร้างฟิล์มชั้นโมเลกุลเดี่ยว (Monolayer Film) บนผิวน้ำก่อนหลังจากนั้นจึงทำการเคลื่อนย้ายไปสู่ซับสเตรท (Substrate) การวิเคราะห์โครงสร้างของฟิล์มพอร์ไฟรินที่เกิดขึ้นระหว่างรอยต่อน้ำกับอากาศและที่เกิดขึ้นที่ซับสเตรท จึง

มีความสำคัญและจำเป็นอย่างยิ่งที่จะให้ข้อมูลสำหรับการสร้างฟิล์มบางที่มีคุณสมบัติที่เหมาะสมต่อการนำไปใช้งานดังนั้นหลากหลายเทคนิค เช่น UV-Spectroscopy [4, 19], Synchrotron X-Ray Diffraction[20], FT-IR Spectroscopy[7, 8], Second Harmonic Generation [2], Polarized Epifluorescence[9], และ Atomic Force Microscopy (AFM) [3] ได้ถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์ลักษณะโครงสร้างของฟิล์ม และจากการผลการทดลองเหล่านี้แสดงให้เห็นว่าลักษณะโครงสร้างของฟิล์มที่เกิดขึ้นภายใต้เงื่อนไขการเตรียมฟิล์มที่แตกต่างกันจะมีผลอย่างยิ่งต่อประสิทธิภาพการทำงานของฟิล์ม [8, 9, 20] ในขณะที่ผลการศึกษาด้วยวิธี STM (Scanning Tunneling Microscopy) [8] พบว่าการวางตัวของพอร์ไฟรินมีบทบาทอย่างยิ่งต่อคุณสมบัติของฟิล์ม อย่างไรก็ตามการวิเคราะห์โครงสร้างของฟิล์มด้วยวิธีการทดลองก็ยังมีข้อจำกัดและมีความยุ่งยากเนื่องจากความซับซ้อนของปัญหา ในการที่จะให้ข้อมูลเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตในระดับโมเลกุล (Molecular Level) ดังนั้นเทคนิควิธีการจำลองระบบโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์ [21-45] (Computer Simulations) จึงเป็นอีกทางเลือกหนึ่งในการที่จะให้ข้อมูลดังกล่าว ซึ่งเทคนิคการจำลองด้วยคอมพิวเตอร์ไม่เพียงแต่จะให้ข้อมูลเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัต ในระดับอะตอมแล้วแต่ยังสามารถทำการจำลองระบบภายใต้สภาวะที่การทดลองจริงไม่สามารถจะทำได้ หรือมีข้อจำกัด

การศึกษาฟิล์มชั้นโมเลกุลเดี่ยวของพอร์ไฟรินและสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไฟรินกับไอออนโลหะทรานซิชันพบว่าส่วนที่เป็นแกนของโครงสร้างของพอร์ไฟรินหรือที่เรียกว่า พอร์ไฟน์ (Porphine) จะวางตัวในสองรูปแบบที่เป็นไปได้ที่รอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ[8] คือ แบบโมเลกุลวางตัวขนานกับผิวของน้ำ ("face-on") และอีกแบบคือ โมเลกุลวางแบบเอียงทำมุมกับผิวของน้ำ ("edge-on") อย่างไรก็ตามการจัดเรียงของโมเลกุลเหล่านี้จะขึ้นอยู่กับเงื่อนไขของการทดลอง [46, 47] เช่น การครอบคลุมพื้นที่ผิวเริ่มต้น (Initial Coverage) และความเข้มข้นเชิงพื้นผิว (Surface Concentrations) Valkova และคณะ [46] ทำการศึกษาโครงสร้างฟิล์มชั้นโมเลกุลเดี่ยว Copper Porphyrine (CuPz) ที่ผิวระหว่างน้ำและอากาศพบว่าการเกิดฟิล์มชั้นโมเลกุลเดี่ยว (Monolayer) จะขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของสารเริ่มต้นและความดันพื้นผิว (Surface Pressure) และนอกจากนี้ยังพบว่าโครงสร้างของฟิล์มจะมีเสถียรภาพเมื่อโมเลกุล CuPz วางตัวเอียงทำมุม 65° - 72° กับระนาบรอยต่อ (โครงสร้างแบบ α) เมื่อเร็วๆนี้ Borodin และ Kiselev [38]ได้ทำการศึกษาการสร้างฟิล์มชั้นโมเลกุลเดี่ยวพอร์ไพราซีน (Porphyrine Monolayers) ที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศโดยใช้เทคนิคการจำลองเชิงคอมพิวเตอร์ พบว่าการสร้างฟิล์มของโมเลกุลนี้มีความไม่เป็นระเบียบสูง (Inhomogeneous Film) เนื่องจากการโมเลกุลเหล่านี้ชอบที่จะจับกันเป็นกลุ่มก้อนและ นอกจากนี้ยังแสดงให้เห็นลักษณะของการวางตัวของโมเลกุลพอร์ไพราซีน ที่มีหลายรูปแบบที่เป็นไปได้ การศึกษาในเชิงทฤษฎี [38, 48] ชี้ให้เห็นว่าความเสถียรของฟิล์มพอร์ไพรินนั้นขึ้นอยู่กับอันตรกิริยา π - π และการสร้างพันธะไฮโดรเจนระหว่างน้ำกับโมเลกุลพอร์ไพริน ดังนั้นการเข้าใจถึงอันตรกิริยาระหว่างพอร์ไพรินกับพอร์ไพริน และพอร์ไพรินกับน้ำรวมทั้งบทบาทของน้ำต่อการการสร้างฟิล์มของโมเลกุลพอร์ไพรินและสารประกอบเชิงซ้อนของพอร์ไพรินจึงเป็นเรื่องสำคัญพื้นฐานที่จะศึกษา ถึงแม้ว่า

โมเลกุลพอร์ไฟรินส่วนใหญ่ที่ศึกษาโดยการทดลองจะมีโครงสร้างขนาดใหญ่ แต่แกนหลักยังเหมือนกันคือมีโครงสร้างที่เรียกว่า พอร์ไฟน์ (Porphine, H_2P) และโครงสร้างนี้จะถูกใช้ตลอดสำหรับการศึกษาในโครงการวิจัยนี้

โมเลกุลพอร์ไฟน์ คือพอร์ไฟรินซึ่งไม่มีหมู่ฟังก์ชัน (Functional Groups) มายึดเกาะและเป็นแกนหลักของโมเลกุลที่สำคัญทางชีววิทยา[49] เช่น โมเลกุลของเม็ดเลือดแดง (Hemoglobin) และคลอโรฟิลล์ (Chlorophyll) ขณะที่สารประกอบเชิงซ้อนระหว่างพอร์ไฟรินกับไอออนโลหะทรานซิชัน เช่น Mg^{2+} , Cd^{2+} , Zn^{2+} มีความเสถียรสูงมากและมีคุณสมบัติในการดูดกลืนแสงได้ดีซึ่งจะมีประโยชน์ในการศึกษากระบวนการสังเคราะห์แสง (Photosynthesis) ด้วยเหตุผลดังกล่าวจึงทำให้มีการศึกษาวิจัยอย่างกว้างขวางทั้งในด้านการทดลองและด้านทฤษฎี [49, 50] แต่อย่างไรก็ตามการศึกษาที่เกี่ยวกับการสร้างฟิล์มของโมเลกุลพอร์ไฟน์ (PH_2) และสารประกอบเชิงซ้อนของพอร์ไฟน์กับไอออนโลหะทรานซิชัน ที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศยังไม่มีรายงานวิจัย การศึกษาเชิงทฤษฎีที่ผ่านมาจะสนใจที่โครงสร้างและคุณสมบัติที่เกี่ยวข้องกับอิเล็กตรอนของโมเลกุลพอร์ไฟรินและสารประกอบเชิงซ้อนของพอร์ไฟริน[12-15] ส่วนในด้านการทดลองการศึกษาจำนวนมากจะมุ่งเน้นที่การวิเคราะห์ลักษณะโครงสร้างของฟิล์มพอร์ไฟรินบนซับสเตรท เมื่อเร็ว ๆ นี้ได้มีการศึกษาลักษณะโครงสร้างของฟิล์มพอร์ไฟราไซน์ที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศโดยใช้เทคนิควิธีการจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Simulations) [38] และผลการศึกษาดังกล่าวให้ข้อมูลที่สอดคล้องด้วยดีกับผลการทดลองของการสร้างฟิล์มคอปเปอร์พอร์ไฟราไซน์ ($CuPz$) [46] แต่อย่างไรก็ตามการศึกษาลักษณะของฟิล์มพอร์ไฟรินที่เกิดขึ้นที่ผิวของน้ำ (Langmuir Film) มีค่อนข้างจำกัดโดยเฉพาะอย่างยิ่งโมเลกุลพอร์ไฟน์ และสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไฟน์กับไอออนโลหะทรานซิชัน ดังนั้นในโครงการวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อต้องการศึกษาลักษณะโครงสร้างฟิล์มแบบชั้นโมเลกุลเดี่ยวของพอร์ไฟน์แบบที่มีและไม่มีไอออนโลหะทรานซิชันว่ามีลักษณะแตกต่างกันอย่างไร และผลการเปลี่ยนความเข้มข้นของโมเลกุลพอร์ไฟน์ที่ผิวต่อลักษณะโครงสร้างของฟิล์ม และการจัดเรียงตัวของโมเลกุลที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศรวมทั้งศึกษาบทบาทของน้ำต่อความเสถียรของฟิล์มที่เกิดขึ้น โดยข้อมูลที่ได้เหล่านี้จะทำให้เข้าใจถึงกลไกของการสร้างฟิล์มพอร์ไฟรินและสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไฟรินในระดับโมเลกุลได้ดียิ่งขึ้นและช่วยเสริมข้อมูลที่ได้จากการทดลองด้วย เพื่อที่จะนำไปสู่การออกแบบและสร้างฟิล์มที่มีประสิทธิภาพเหมาะสมกับการประยุกต์ใช้ต่อไป

4. ระเบียบวิธีการทดลอง

4.1 สร้างแบบจำลองฟังก์ชันศักย์ (Potential Function Models)

การพัฒนาฟังก์ชันศักย์ที่ใช้อธิบายอันตรกิริยาแบบคู่ระหว่างโมเลกุลในระบบโดยใช้วิธีการคำนวณทางเคมีควอนตัมจะมีขั้นตอนการดำเนินการดังนี้

(6) การหารูปแบบโครงสร้างของโมเลกุล



โครงสร้างโมเลกุลของพอร์ไฟรินและสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไฟรินกับไอออนโลหะทรานซิชันจะหาโดยการคำนวณทางควอนตัมเพื่อให้หาโครงสร้างที่ดีที่สุด⁷ (Geometry Optimization Methods)

(7) การเลือกชุดฟังก์ชันพื้นฐาน และระดับของทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ

คำนวณหาพลังงานยึดจับ (Binding Energy) ระหว่างคู่ของ พอร์ไฟริน-น้ำ และพอร์ไฟริน-พอร์ไฟริน ในแนวที่ให้พลังงานต่ำสุดโดยการทดสอบกับหลายๆชุดฟังก์ชันพื้นฐาน (Basis Set) เช่น 3-21G, 6-31G, 6-31G**, DZP และหลายระดับของทฤษฎี เช่น Hartree-Fock (HF), Perturbation Theory, และ Density Functional Theory (DFT) เพื่อดูว่าชุดเบซิสฟังก์ชันและระดับทฤษฎีแบบไหนจึงจะเหมาะสมสำหรับการคำนวณระบบโมเลกุลแบบนี้

(8) การเลือกรูปแบบการวางตัวของคู่มอเลกุล

กำหนดรูปแบบการวางตัวของโมเลกุลหนึ่งรอบๆอีกโมเลกุลหนึ่งที่หยุดนิ่งอยู่กับที่ ซึ่งในที่นี้จะให้โมเลกุลพอร์ไฟรินอยู่กับที่ แล้วเลือกรูปแบบการวางตัวของโมเลกุลน้ำรอบๆโมเลกุลพอร์ไฟริน สำหรับคู่มอเลกุล พอร์ไฟริน-น้ำ ส่วนคู่มอเลกุล พอร์ไฟริน-พอร์ไฟริน ก็จะทำคล้ายๆกัน หลังจากที่ได้เลือกรูปแบบแล้วก็จะทำการสร้างตำแหน่งของคู่อันตรกิริยาที่ระยะทางต่างๆกันเพื่อให้ได้จำนวนจุดมากพอที่จะสามารถแทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทั้งสองเหล่านี้ได้ทุกรูปแบบการวางตัว

(9) การปฏิบัติการคำนวณทางควอนตัม

หลังจากที่ได้จำนวนจุดหลายจุดแล้วขั้นตอนต่อมาก็คือการคำนวณพลังงานยึดจับระหว่างคู่มอเลกุลดังกล่าวตามสมการนี้

$$\Delta E(\text{kcal.mol}^{-1}) = (E_{\text{dimer}} - E_{\text{mono}} - E_{\text{mono}}) \times 627.5 \quad (1)$$

โดยที่ E_{dimer} คือ พลังงานรวมที่เกิดจากอันตรกิริยาระหว่างคู่มอเลกุลและ E_{mono} คือค่าพลังงานของแต่ละโมเลกุล ตัวเลข 627.5 นำมาคูณเพื่อเปลี่ยนหน่วยพลังงานจากหน่วยฮาร์ทรี (HF) เป็นหน่วยกิโลแคลอรีต่อโมล (kcal.mol^{-1}) สำหรับในขั้นตอนนี้จะใช้เวลามากในการคำนวณดังนั้นการเลือกชุดฟังก์ชันและระดับทฤษฎีการคำนวณจึงต้องให้เหมาะสมดังได้กล่าวมาแล้ว

(10) การเลือกรูปแบบฟังก์ชันที่เหมาะสม

ข้อมูลพลังงานที่ได้จากการคำนวณทางควอนตัมจะนำไปใช้ในการปรับฟังก์ชันศักย์โดยใช้เทคนิค Nonlinear Data Fitting เพื่อหาค่าพารามิเตอร์ที่ให้ผลของการ Fitting ดีที่สุด ซึ่งโดยทั่วไปรูปแบบของฟังก์ชันศักย์ที่ใช้ในการทำจำลองเชิงโมเลกุลจะอยู่ในรูปของ Lennard-Jones และ Electrostatic ดังสมการนี้

⁷ โครงสร้างที่ให้พลังงานต่ำที่สุด

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} + \frac{q_1 q_2}{r} \quad (2)$$

สองเทอมแรกในสมการ (2) แทนอันตรกิริยาที่เป็นแรงผลักและแรงดูดตามลำดับ ส่วนเทอมสุดท้ายแทนอันตรกิริยาที่เป็นแรงทางไฟฟ้า

4.2 การจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Simulations)

หลังจากที่ได้ทำการพัฒนาฟังก์ชันศักย์แล้วตามข้อ (4.1) ขั้นตอนต่อมาคือทำการจำลองระบบด้วยวิธีโมเลกุลไดนามิกส์ (Molecular Dynamics Simulations, MD) โดยเริ่มต้นจะกำหนดขนาดกล่องลูกบาศก์บรรจุโมเลกุลน้ำ โมเลกุลฟอร์ไพริน และอากาศเพื่อให้สอดคล้องกับเงื่อนไขทางการทดลองจริง รูปแบบจำลองการสร้างฟิล์มชั้นโมเลกุลเดี่ยวแสดงดังรูปที่ 1ก จากนั้นก็ทำการกำหนดค่าตัวแปรต่างๆที่เกี่ยวข้องในการทำการจำลองเชิงโมเลกุล เช่น เวลาที่ใช้ในการคำนวณ ช่วงเวลาในการคำนวณ อุณหภูมิ ความดัน และอื่นๆเป็นต้น วิธีการ MD จะเริ่มต้นจากการคำนวณหาแรงที่กระทำต่ออนุภาคใดๆ สมมติให้เป็น i อันเนื่องมาจากอนุภาคตัวอื่นที่อยู่ในระบบผ่านทางสมการ (3)

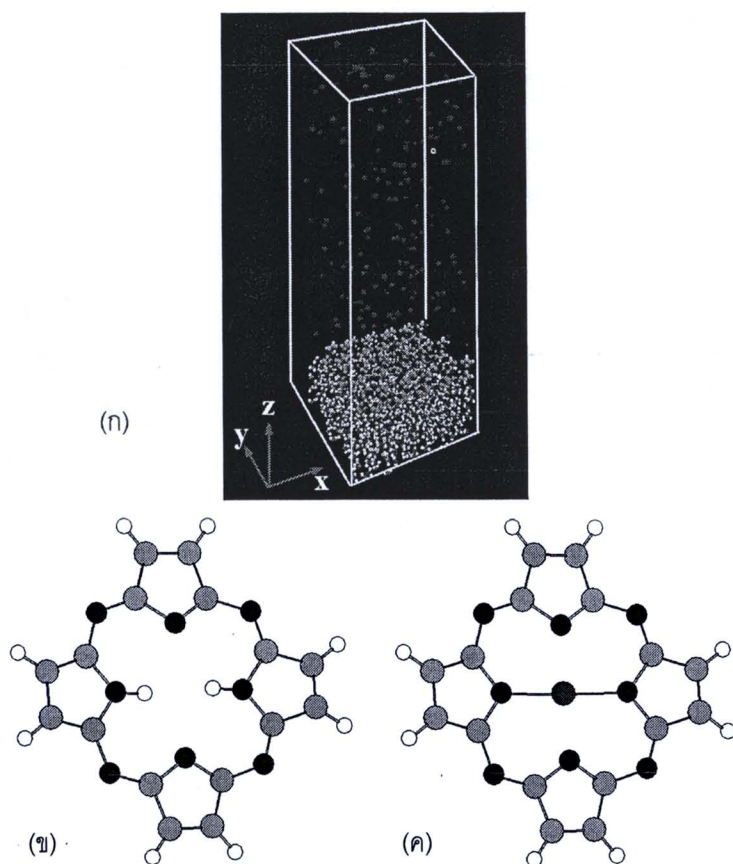
$$\vec{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}} \vec{F}_{ij} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}} \frac{\partial V(r_{ij})}{r_{ij}} \hat{e}_r \quad (3)$$

จากนั้นทำการแก้สมการการเคลื่อนที่ของอนุภาค i โดยใช้สมการการเคลื่อนที่ของนิวตัน (Newton's Equation of Motion) ดังสมการ (4)

$$\vec{F}_i = m_i \vec{a}_i = m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \quad (4)$$

จากสมการ (4) ในการแก้สมการเพื่อหาเส้นทางการเคลื่อนที่ (Trajectory) เพื่อให้ได้ตำแหน่ง ความเร็ว และความเร่ง ของอนุภาคใดๆจำเป็นต้องใช้ระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลข (Numerical Methods) ทำนองเดียวกัน สำหรับทุกอนุภาคภายในระบบก็จะถูกทำให้เคลื่อนที่ไปตามเวลาให้สอดคล้องตามสมการ (3) และ สมการ (4) และทุกๆช่วงเวลาในการเคลื่อนที่ของอนุภาคก็จะมีค่าคำนวณหาพลังงานรวมทั้งหมดในระบบ อุณหภูมิ และปริมาณอื่นๆที่สนใจ รวมทั้งการเก็บข้อมูลที่เป็นตำแหน่ง และ ความเร็ว ของทุกอนุภาคด้วยเพื่อนำไปใช้ในการวิเคราะห์ต่อไป

* อนุภาคอาจจะเป็นอะตอมหรือ โมเลกุลก็ได้



รูปที่ 1 (ก) แบบจำลองโมเลกุลของฟิล์มพอร์ไพรีนที่ผิวรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศและ (ข) โครงสร้างพอร์ไพรีน (ค) โครงสร้างสารประกอบเชิงซ้อนพอร์ไพรีนกับไอออน Zinc โดยที่อะตอม N (Blue), C (Cyan), H (White) และ Zn (Red)

4.3 การวิเคราะห์ข้อมูล (Data Analysis)

ขั้นตอนนี้จะเป็นการนำเอาข้อมูลที่ได้จากการทำใน (4.2) 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 รวมทั้งเข้าใจบทบาทน้ำต่อการสร้างฟิล์มและการวางตัวของโมเลกุลพอร์ไพรีน

5. ขอบเขตของการวิจัย

ในโครงการวิจัยนี้จะศึกษาโครงสร้างของฟิล์มพอร์ไพรีนที่เกิดขึ้นที่ผิวของน้ำซึ่งเป็นรอยต่อระหว่างน้ำกับอากาศ โดยโมเลกุลพอร์ไพรีนที่ใช้ในการศึกษาครั้งนี้คือ โมเลกุลพอร์