

บทที่ 1

บทนำ

1. ความสำคัญและที่มาของปัญหา

เนื่องจากปัจจุบันนี้สารกึ่งตัวนำอินทรีย์มีบทบาทสำคัญในการสร้างอุปกรณ์ทางอิเล็กทรอนิกส์ เช่น Organic Field Effect Transistor (OFET) ไดโอดเปล่งแสง โซลาร์เซลล์ Gas sensor เป็นต้น โดย phthalocyanine ก็เป็นสารอีกชนิดหนึ่งที่มีการใช้ในการสร้างอุปกรณ์ทางอิเล็กทรอนิกส์เหล่านั้น

phthalocyanine มีสูตรโมเลกุลเป็น $C_{32}H_{16}CuN_8$ โดยมีความยาวของโมเลกุลประมาณ 15 อังสตรอม ระยะระหว่าง C-C อยู่ในช่วง 1.381-1.464 อังสตรอม โครงสร้างผลึกเป็นแบบ Monoclinic โดยมีค่าคงที่โครงสร้างผลึก $a = 19.845$, $b = 4.720$, $c = 14.80$ อังสตรอม มุม $\alpha = 90$, $\beta = 122$, $\gamma = 90$ องศา ค่าคงที่โครงสร้างผลึกและขนาดของโมเลกุลของphthalocyanine การประยุกต์ใช้ copper phthalocyanine มีการใช้แพร่หลายในวงการสีย้อมผ้าและในแผ่นบันทึกข้อมูล (CD) ความเร็วสูง

ทำให้การอธิบายการเคลื่อนที่ของพาหะในโครงสร้างได้ยากมากจึงซึ่งแบบจำลองแบบดั้งเดิมอธิบายไม่ได้ ต้องใช้แบบจำลองใหม่ที่มีชื่อว่าแบบจำลองฮอปปีง

ดังนั้นการรู้ถึงกลไกการนำไฟฟ้าของพาหะจึงเป็นสิ่งสำคัญในการเข้าใจลักษณะ เฉพาะของสารอินทรีย์เหล่านั้น ทำให้สามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้อย่างมีประสิทธิภาพ

2. วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1. ศึกษา Molecular orbital properties ในระดับพลังงานใกล้ Energy Gap
2. ดูผลของ Hopping rate ที่เกิดจากสนามไฟฟ้า
3. ดูผลของสนามไฟฟ้าใน phthalocyanine
4. คำนวณค่าความคล่องตัวของพาหะใน phthalocyanine

3. คำถามการวิจัย

1. การนำไฟฟ้าเกิดขึ้นได้อย่างไร
2. สารกึ่งตัวนำคืออะไร
3. phthalocyanine คืออะไร
4. สารอินทรีย์นำไฟฟ้าได้อย่างไร
5. DFT คืออะไร
6. Hopping model คืออะไร

4. นิยามศัพท์เฉพาะ

1. Energy band คือระดับพลังงานที่พาหะสามารถอยู่ได้
2. Phthalocyanine เป็นสารประกอบอินทรีย์ที่ประกอบไปด้วยวงแหวนเบนซีนสี่วงโดยแต่ละวงเชื่อมต่อกันด้วยไนโตรเจนและอาจมีโลหะอยู่ที่กลางโมเลกุล
3. Monte Carlo เป็นวิธีการที่ใช้การสุ่มเป็นหลัก
4. Hopping model คือแบบจำลองการเคลื่อนที่ของพาหะในสารอินทรีย์
5. DFT คือทฤษฎีที่มีการคำนวณโดยพิจารณาทุกอิเล็กตรอนในอะตอม
6. Molecular orbital คือสถานะของพาหะ
7. HOMO คือสถานะสูงสุดของพาหะที่อยู่ได้
8. LUMO คือสถานะต่ำสุดที่ไม่มีพาหะอยู่

5. ขอบเขตของการวิจัย

1. คำนวณสถานะของพาหะโดยใช้การคำนวณทาง quantum chemistry
2. คำนวณค่าความคล่องตัวของพาหะใน phthalocyanine โดยใช้แบบจำลองฮอปปีง
3. วิเคราะห์และสรุปผลที่คำนวณได้

6. ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

การวิจัยครั้งนี้คาดว่าจะได้รับประโยชน์ดังต่อไปนี้

1. สามารถอธิบายการเคลื่อนที่ของพาหะในสาร phthalocyanine
2. ทราบผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ Molecular orbital
3. สามารถอธิบายผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อพาหะได้

7. แนวทางการนำไปใช้ประโยชน์

การวิจัยครั้งนี้คาดว่าจะนำไปประโยชน์เกี่ยวกับ Molecular electronic ในอุปกรณ์จำพวก OFET ซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่ใช้กระแสไฟฟ้าน้อยมากโดยจะเป็นการสนับสนุนการประหยัดพลังงานเป็นอย่างมาก