

1. บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้มีจุดประสงค์เพื่อทำการสังเคราะห์สารประกอบคอมโพสิตระหว่าง self-doped water-soluble polythiophene กับสารประกอบคอมโพสิตระหว่าง ดีเอ็นเอชนิดสายเดี่ยว (ss-DNA) กับ multiwalled-carbon nanotubes (ss-DNA/MWNTs) โดยเชื่อว่าสมบัติการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันและรีดักชัน (redox) รวมทั้งสมบัติการนำไฟฟ้าของโพลิเมอร์จะดีขึ้น ดังนั้นในขั้นแรกของงานวิจัยนี้จึงทำการสังเคราะห์สารประกอบคอมโพสิต ss-DNA/MWNTs ซึ่งได้เป็นผลสำเร็จ สารประกอบคอมโพสิต ss-DNA/MWNTs ที่สังเคราะห์ได้สามารถแขวนลอยได้ในน้ำ แม้ว่าจะเก็บเป็นเวลานานกว่า 3 เดือน อย่างไรก็ตามในงานวิจัยนี้อุปสรรคในการสังเคราะห์โพลิเมอร์เพื่อนำไปทำปฏิกิริยา *in situ* polymerization ในขั้นต่อไป โดยปัญหาที่เกิดขึ้นคือไม่สามารถแยกสารที่ต้องการออกได้ ให้บริสุทธิ์ถึงแม้ว่าจะใช้เทคนิค flash chromatography แล้วก็ตาม นอกจากนี้ในงานวิจัยนี้ยังศึกษาสมบัติอิเล็กทรอนิกส์ของโพลิเมอร์โดยอาศัยเทคนิคการคำนวณทางเคมีควอนตัมด้วยระเบียบวิธี density functional theory (DFT) โดยใช้ฟังก์ชันชนิด hybrid B3LYP และ basis set ชนิด 6-31G(d,p) จากผลการศึกษาพบว่าการเติมหมู่แทนที่ที่ตำแหน่ง 3 และ 4 บนวงไทโอพีนมีผลต่อค่า band gap energy ของโพลิเมอร์ โดยพบว่าการเติมหมู่แทนที่ชนิด methyl แทนที่โปรตอนบนตำแหน่งที่ 4 ทำให้ค่า band gap energy เพิ่มมากขึ้น ซึ่งสามารถอธิบายได้อิทธิพลของความเกะกะของหมู่ methyl ที่ทำให้การจัดเรียงตัวของสายโซ่โพลิเมอร์เบี่ยงเบนไปจากเส้นตรงเป็นผลให้สมบัติ conjugation ลดลงด้วย นอกจากนี้ยังพบว่าค่า band gap energy เพิ่มขึ้นได้เช่นกันเมื่อหมู่แทนที่ชนิด alkoxysulfonyl acid ที่ตำแหน่ง 3 บนวงไทโอพีนถูกแทนที่ด้วยหมู่ alkylsulfonic acid ที่มีความเกะกะมากกว่า

คำหลัก : โพลิเมอร์นำไฟฟ้า สารประกอบคอมโพสิตระหว่างโพลิเมอร์และคาร์บอนนาโนทิวบ์

สารประกอบคอมโพสิตระหว่างดีเอ็นเอชนิดสายเดี่ยวกับคาร์บอนนาโนทิวบ์ โพลิไทโอพีน

Abstract:

The aim of this work is to synthesize the nanocomposite of self-doped water-soluble polythiophene with ss-DNA-wrapped multiwalled-carbon nanotubes (ss-DNA/MWNTs). It is expected that the redox activity and conductivity of polymer will be enhanced in the presence of ss-DNA/MWNTs composite. In the first step, the ss-DNA/MWNTs composite was successfully synthesized. The resulting ss-DNA/MWNTs composite can be dispersed in water for a long period of time (ca. 3 months). However, the synthesis of starting monomer was not successful. The desired products were unable to purify even from employing flash chromatography technique. Furthermore, the electronic property of the self-doped water soluble polythiophene was studied using density functional theory (DFT) calculations. The hybrid B3LYP function was used within the 6-31 G(d,p) basis set. The results showed that the presence of substituents at the 3- and 4-position on the thiophene ring had an impact on the band gap energy of polymers. The introduction of methyl group at the 4-position compared with the hydrogen atom resulted in increased band gap energy. This was attributed to the steric effect of the methyl group which led to nonplanar (less conjugated) polymer chain. The increase in band gap energy of the polymers was also observed when the alkoxy sulfonic acid at the 3-position in the thiophene ring was replaced by more sterically demanding alkyl sulfonic acid side chain.

Keywords: self-doped water-soluble polymer, polythiophene, carbon nanotube-polymer composite