

ในการออกแบบสารสังเคราะห์เพื่อหาสารประกอบที่มีสมบัติทางทัศนศาสตร์แบบไม่เชิงเส้น นั้นโดยทั่วไปต้องคำนึงคุณสมบัติพื้นฐาน 2 ข้อ คือ สารต้องมีค่า hyperpolarizability สูง ซึ่งสารที่มีระบบ π -conjugated จะสอดคล้องกับสมบัติข้อนี้ และสมบัติอีกข้อคือ สารสังเคราะห์นั้นต้องตกผลึกใน noncentrosymmetric space group กล่าวคือ การจัดเรียงตัวในโครงสร้างผลึกไม่มี inversion center ซึ่งจะต้องทำการตกผลึกสารที่สังเคราะห์ได้และทำการหาโครงสร้างผลึกด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว (single crystals X-ray structure determination) เพื่อให้ได้ข้อมูล space group ของผลึกดังกล่าว และผลึกที่ได้ต้องมีขนาดใหญ่พอที่จะศึกษาสมบัติทางทัศนศาสตร์ด้วย และโดยทั่วไปสารที่มีลักษณะการ packing ของโมเลกุลในของแข็งเป็นแบบ parallel ก็จะมีสมบัติเป็น NLO ที่ดีด้วย และหากผลึกของสารสังเคราะห์นั้นมีลักษณะ transparent ในช่วง visible light ก็จะดีมากในการใช้เป็นสาร NLO ดังนั้นผู้วิจัยจึงเลือกระบบของสารอินทรีย์ที่มี π -conjugated ที่ไม่มีหมู่ chromophores มากจนเกินไป และเลือกโลหะไอออน Zn(II) เนื่องจากมีแนวโน้มการเกิดสารประกอบแบบไม่มีสี ซึ่งจะไม่ดูดกลืนแสงในช่วง visible light จากทฤษฎีและสมมติฐานดังกล่าวจึงมีแนวคิดในการออกแบบสารสังเคราะห์ PAC1-PAC20 ดังเสนอในโครงการวิจัยนี้

2. วัตถุประสงค์ของโครงการ

- 2.1 เพื่อสังเคราะห์และหาโครงสร้างของสารประกอบอนุพันธ์ของ Aryl-ethenylpyridinium และ Aryl-ethenylquinolinium โดยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี
- 2.2 เพื่อหาโครงสร้างผลึกของสารประกอบ Aryl-ethenylpyridinium และ Aryl-ethenylquinolinium ที่สังเคราะห์และตกผลึกได้
- 2.3 เพื่อหาสมบัติทางทัศนศาสตร์ของสารที่ได้จากข้อ 2
- 2.4 เพื่อให้ได้ข้อมูลความสัมพันธ์ของ crystal packing และสมบัติทางทัศนศาสตร์
- 2.5 เพื่อหาสมบัติที่น่าสนใจทางด้านอื่นในกรณีที่สารไม่แสดงสมบัติทางทัศนศาสตร์
- 2.6 เพื่อสร้างผลงานทางวิชาการตีพิมพ์ในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ
- 2.7 เพื่อสร้างความร่วมมือกับนักวิจัยชาวต่างชาติ (อินเดีย) ในส่วนของการศึกษาสมบัติทางทัศนศาสตร์

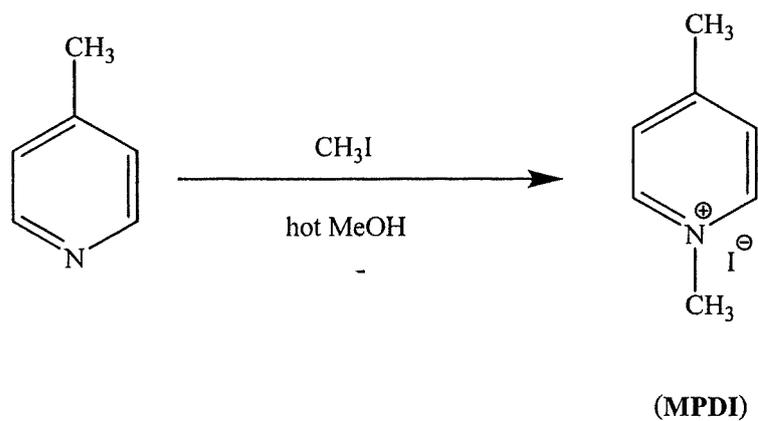
3. ขั้นตอนการวิจัย

- 3.1 ค้นคว้าเอกสาร เตรียมสารเคมี และอุปกรณ์ห้องปฏิบัติการ
- 3.2 สังเคราะห์สารประกอบ 1,4-Dimethylpyridinium iodide และ 1,2-Dimethylquinolinium iodide ดังแผนการสังเคราะห์ที่ 3.1-3.2 พร้อมหาโครงสร้างสารด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี (UV-Vis, FT-IR และ NMR)
- 3.3 สังเคราะห์สารประกอบ Aryl ethenylpyridinium และ Aryl-ethenylquinolinium ดังแผนการสังเคราะห์ที่ 3.3-3.4 พร้อมหาโครงสร้างสารด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี (UV-Vis, FT-IR และ NMR)

- 3.4 สังเคราะห์ Benzenesulfonate salts ดัชนีการสังเคราะห์ที่ 3.5
พร้อมหาโครงสร้างสารด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี (UV-Vis, FT-IR และ NMR)
- 3.5 สังเคราะห์สารประกอบ Aryl-ethenylpyridinium benzenesulfonates และ
Aryl-ethenylquinolinium benzenesulfonates ดัชนีการสังเคราะห์ที่ 3.6-3.7
พร้อมหาโครงสร้างสารด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี (UV-Vis, FT-IR และ NMR)
- 3.6 สังเคราะห์ Aryl-ethenylpyridinium zinc iodide และ Aryl-ethenylquinolinium zinc iodide
ดัชนีการสังเคราะห์ที่ 3.8-3.9 พร้อมหาโครงสร้างสารด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี
(UV-Vis, FT-IR และ NMR)
- 3.7 ทำการตกผลึกสารที่สังเคราะห์ได้จากข้อ 3.5-3.6 เพื่อให้ได้ผลึกที่ดีและมีขนาดเหมาะสม
เพื่อหาโครงสร้างด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว โดยใช้ตัวทำละลาย
ชนิดต่างๆ เพื่อให้ได้ตัวทำละลายที่เหมาะสมในการตกผลึก
- 3.8 ทำการเก็บข้อมูลการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยวของผลึกที่ได้ ด้วยเทคนิค
Single crystal X-ray Diffractions ด้วยเครื่อง APEX II CCD
- 3.9 หาโครงสร้างผลึกของสารประกอบที่ได้จากข้อมูลการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์บนผลึกเดี่ยว
- 3.10 วิเคราะห์โครงสร้างสามมิติของสารประกอบและการ packing ของโมเลกุลในหน่วยเซลล์
- 3.11 หาสมบัติทางทัศนศาสตร์ของสารที่สังเคราะห์ได้และตกผลึกใน non-centrosymmetric
space group ด้วยเทคนิค classical powder SHG measurements เทียบกับ urea ซึ่งพัฒนาโดย
Kurtz and Perry
- 3.12 พิจารณาความสัมพันธ์ของโครงสร้างสามมิติ และ crystal packing กับ สมบัติ NLO ที่ได้
- 3.13 สรุป เขียนรายงานการวิจัย และ manuscripts เพื่อตีพิมพ์ผลงานในวารสารวิชาการ
ระดับนานาชาติ

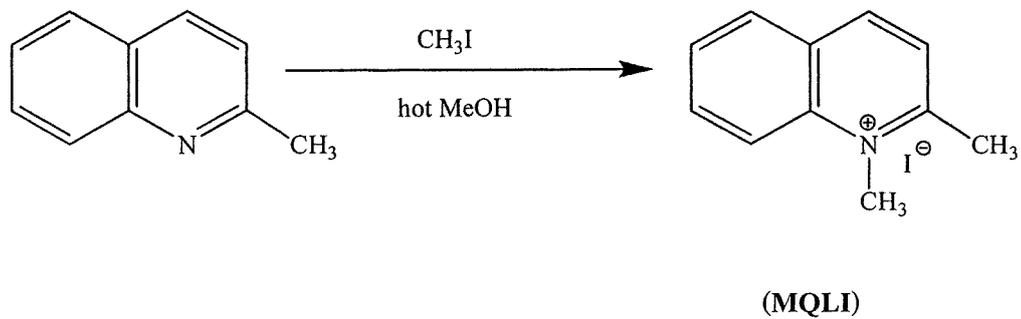
Scheme 3.1 การเตรียม 1,4-Dimethylpyridinium iodide (MPDI) เพื่อใช้ในการสังเคราะห์

Aryl-ethenylpyridinium

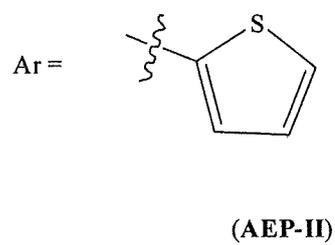
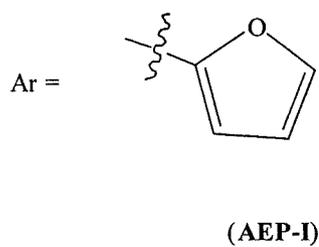
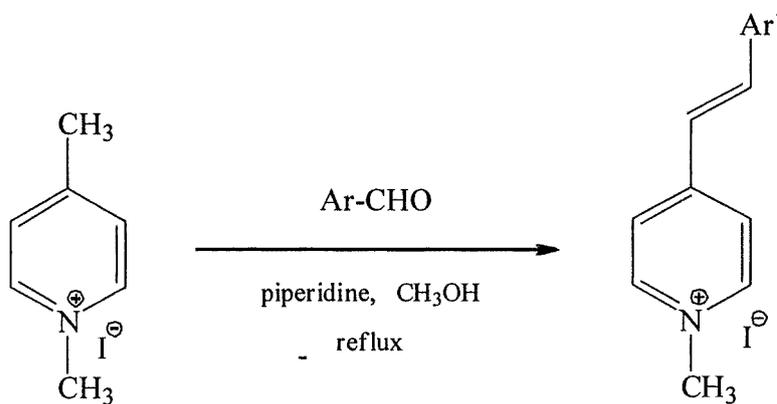


Scheme 3.2 การเตรียม 1,2-Dimethylquinolinium iodide (MQLI) เพื่อใช้ในการสังเคราะห์

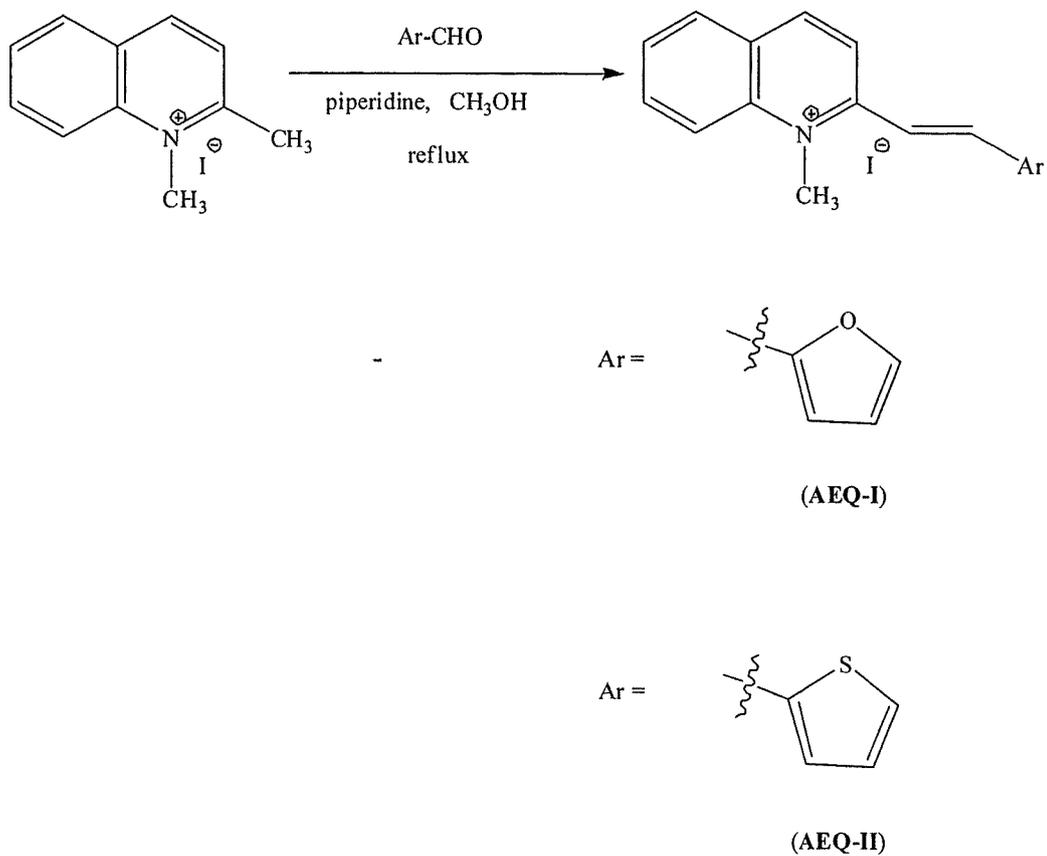
Aryl-ethynylquinolinium



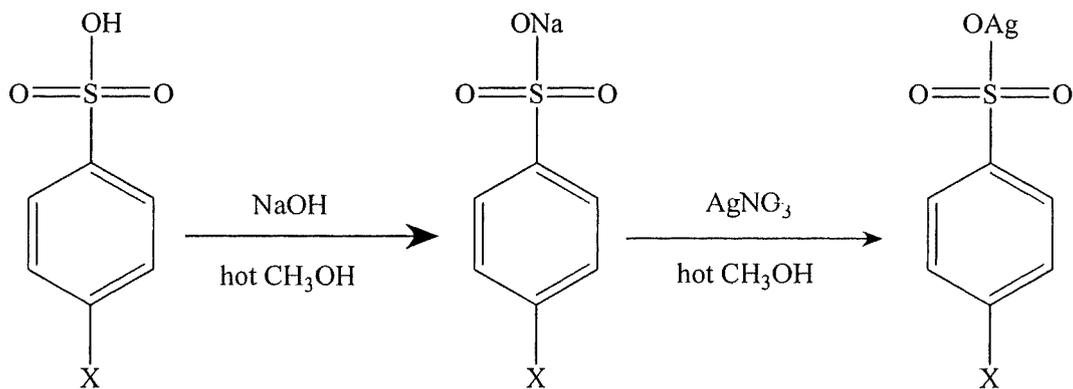
Scheme 3.3 การสังเคราะห์ Aryl ethenylpyridinium (AEP)



Scheme 3.4 การสังเคราะห์ Aryl ethenylquinolinium (AEQ)

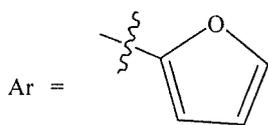
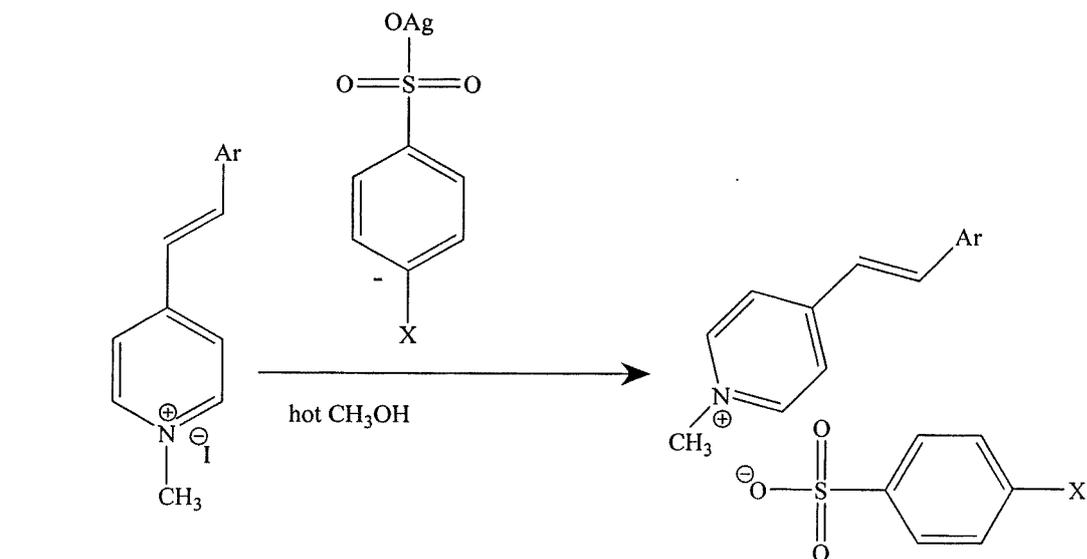


Scheme 3.5 การสังเคราะห์ Benzenesulfonate salts (An-X)

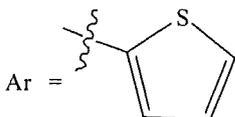


เมื่อ X = CH₃ (An-Me), OCH₃ (An-OMe), Cl (An-Cl) and Br (An-Br)

Scheme 3.6 การสังเคราะห์ Aryl-ethenylpyridinium benzenesulfonates (AEP-An)

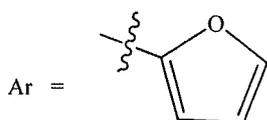
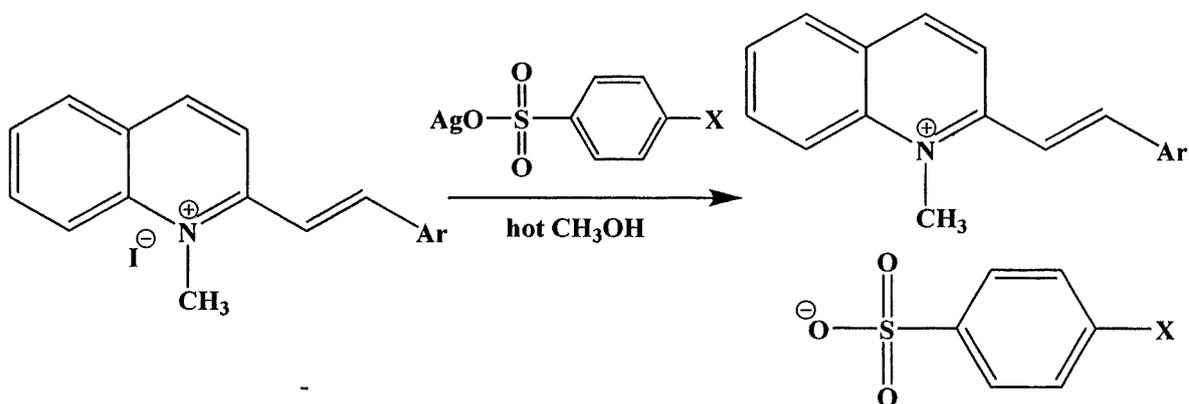


และ X = CH₃ (AEP-I-An-Me) หรือ PAC-1
 Br (AEP-I-An-Br) หรือ PAC-2
 Cl (AEP-I-An-Cl) หรือ PAC-3
 และ OCH₃ (AEP-I-An-OMe) หรือ PAC-4

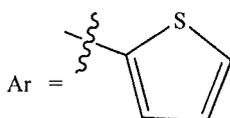


และ X = CH₃ (AEP-II-An-Me) หรือ PAC-5
 Br (AEP-II-An-Br) หรือ PAC-6
 Cl (AEP-II-An-Cl) หรือ PAC-7
 และ OCH₃ (AEP-II-An-OMe) หรือ PAC-8

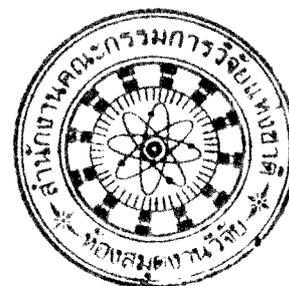
Scheme 3.7 การสังเคราะห์ Aryl-ethenylquinolinium benzenesulfonates (AEQ-An)



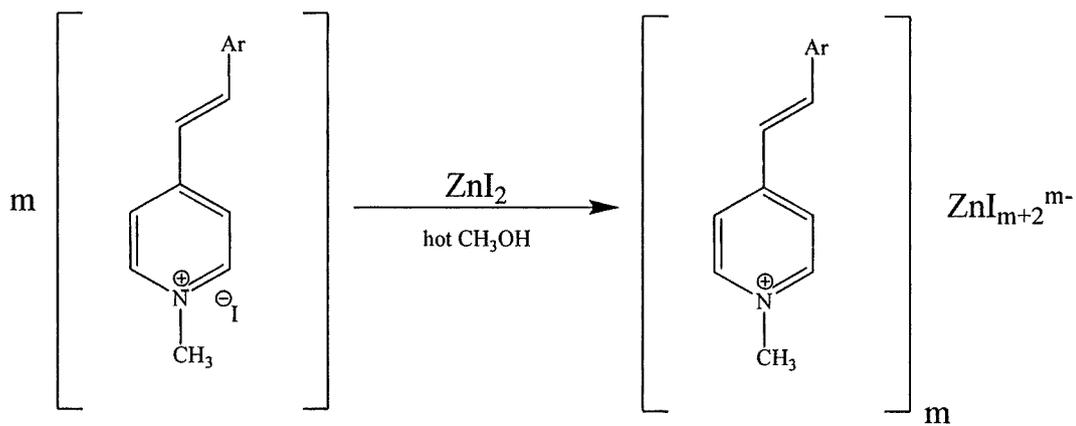
และ X = CH₃ (AEQ-I-An-Me) หรือ PAC-9
 Br (AEQ-I-An-Br) หรือ PAC-10
 Cl (AEQ-I-An-Cl) หรือ PAC-11
 และ OCH₃ (AEQ-I-An-OMe) หรือ PAC-12



และ X = CH₃ (AEQ-II-An-Me) หรือ PAC-13
 Br (AEQ-II-An-Br) หรือ PAC-14
 Cl (AEQ-II-An-Cl) หรือ PAC-15
 และ OCH₃ (AEQ-II-An-OMe) หรือ PAC-16



Scheme 3.8 การสังเคราะห์ Aryl ethenylpyridinium zinc iodide (AEP-ZnI)

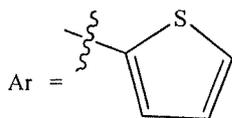


เมื่อ



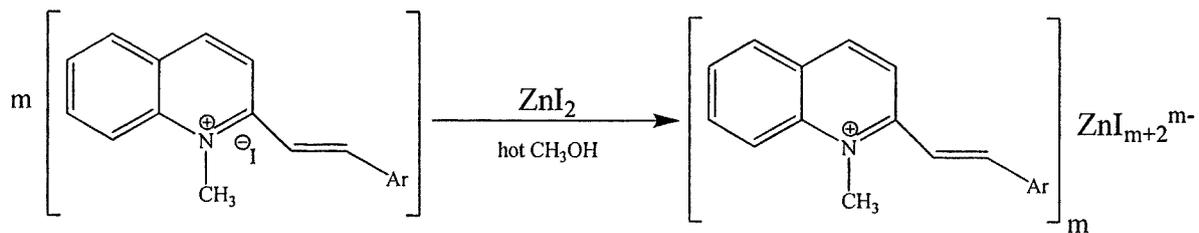
AEP-I-ZnI หรือ PAC-17

และ

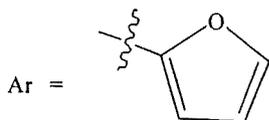


AEP-II-ZnI หรือ PAC-18

Scheme 3.9 การสังเคราะห์ Aryl ethenylquinolinium zinc iodide (AEQ-ZnI)

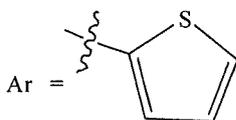


เมื่อ



(AEQ-I-ZnI) หรือ PAC-19

และ



(AEQ-II-ZnI) หรือ PAC-20

สถานที่ทำการวิจัยหรือเก็บข้อมูล

- ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ วิทยาเขตหาดใหญ่ จังหวัดสงขลา
- X-ray Crystallography Unit, School of Physics, Universiti Sains Malaysia, Penang, Malaysia

แผนการดำเนินงานตลอดโครงการวิจัย

