246719

ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ

246719

MRG5180287 ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร

สกว
TRF

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ

โครงการ การศึกษาสมบัติไดนามิกส์ที่สภาวะกระตุ้นของสารตัวนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มของอนุพันธ์พอลีคาร์บาโซล โดยวิธีคำนวณทางเคมีทฤษฎีและระเบียบวิธีทางสเปคโทรสโคปี

(Theoretical and spectroscopic investigation on the dynamic excited state properties of the conducting polymer in the class of carbazole derivatives)

โดย ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร และคณะ

กรกฎาคม 2553

b00251151

ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ

246719

สัญญาเลขที่ MRG5180287

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ

โครงการ การศึกษาสมบัติไดนามิกส์ที่สภาวะกระตุ้นของสารตัวนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้าในกลุ่มของอนุพันธ์พอลีคาร์บาโซล โดยวิธีคำนวณทางเคมีทฤษฎีและระเบียบวิธีทางสเปคโทรสโคปี

(Theoretical and spectroscopic investigation on the dynamic excited state properties of the conducting polymer in the class of carbazole derivatives)

คณะผู้วิจัย

ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ ห้องสมุดงานวิจัย

สนับสนุนโดยสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา(สกอ.) และ

สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.)

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย สกอ. และ สกว.ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

สัญญาเลขที่ MRG5180287
โครงการ การศึกษาสมบัติไดนามิกส์ที่สภาวะกระตุ้นของสารตัวนำพอลิเมอร์นำไฟฟ้าใน กลุ่มของอนุพันธ์พอลีคาร์บาโซล โดยวิธีคำนวณทางเคมีทฤษฏีและระเบียบวิธีทางสเปคโทร สโคปี
ผู้วิจัย ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร
นักวิจัยที่ปรึกษา รศ.ดร.สุภา หารหนองบัว

246719

บทคัดย่อ

การวิจัยนี้เป็นการศึกษาสมบัติไดนามิกส์ที่สภาวะกระตุ้นของสารพอลิเมอร์นำไฟฟ้าใน กลุ่มของอนุพันธ์พอลีคาร์บาโซล ด้วยระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัม เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและอิเลกโทรนิกทั้งในสภาวะพื้นและสภาวะถูกกระตุ้น ผลการศึกษาพบว่าโครงสร้างที่สภาวะถูกกระตุ้นมีโครงสร้างเป็นแบบควินอยด์ ซึ่งทำให้โครงสร้างที่สภาวะถูกกระตุ้นมีความความเป็นระนาบมากว่าที่สภาวะพื้นที่มีโครงสร้างเป็นแบบอะโรมาติก สำหรับสมบัติการดูดกลืนแสงและการคายแสงถูกศึกษาด้วยระเบียบวิธีคำนวณทางเดนซิตี้ฟังก์ชั่นนอลที่ขึ้นกับเวลา โดยค่าที่ได้ค่าพลังงานการคายแสงจากการทดลองของ (Cz-co-Cz), (Cz-co-Fl) และ (Cz-co-Th) มีค่า 2.76, 2.63 และ 2.25 eV, ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบค่าจากการคำนวณสามารถทำนายค่าพลังงานการเรืองแสงได้ 2.84, 3.91 และ 2.43 eV, ตามลำดับ ซึ่งได้ข้อมูลที่สอดคล้องกับผลการศึกษาด้วยการทดลอง นอกจากนี้ยังได้แสดงค่าทำนาย ค่าครึ่งชีวิตในการคายแสงของ (Cz-co-Cz), (Cz-co-Fl) และ (Cz-co-Th) มีค่าเท่ากับ 0.52, 0.47, and 0.99 ns ซึ่งสามารถอธิบายสมบัติการดูดกลืนแสงและการคายแสงของสารพอลิเมอร์นำไฟฟ้าใน กลุ่มของอนุพันธ์พอลีคาร์บาโซลได้ การศึกษานี้สรุปว่าการคำนวณทางเคมีควอนตัมมีประโยชน์ในการเข้าใจกลไกในการเกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนในโมเลกุลอนุพันธ์ของพอลีคาร์บาโซล ซึ่งทำให้เราสามารถออกแบบโมเลกุลตัวใหม่ที่สามารถมีประสิทุภาพในการค่าการดูดกลืนพลังงานแสงต่อไป

คำสำคัญ พอลิเมอร์นำไฟฟ้า อนุพันธ์พอลีคาร์บาโซล ระเบียบวิธีคำนวณทางเดนซิตี้ฟังก์ชั่นนอลที่ขึ้นกับเวลา การดูดกลืนแสง การเรืองแสง ค่าครึ่งชีวิตในการเรืองแสง

สัญญาเลขที่ MRG5180287

Grant No. MRG5180287

Title Theoretical and spectroscopic investigation on the dynamic excited state properties of the conducting polymer in the class of carbazole derivatives

Researcher Dr.Songwut Suramitr

Mentor Assoc. Prof.Dr.Supa Hannongbua

Abstract 246719

The electronic excitation transitions of carbazole-based oligomers, $(Cz\text{-}co\text{-}Cz)_N$, $(Cz\text{-}co\text{-}Fl)_N$ and $(Cz\text{-}co\text{-}Th)_N$ (N = 2-4) were investigated using density functional theory (DFT) and time-dependent (TD) DFT methods. Our results show that the calculated ground state geometries favourfavor a more aromatic, planer structure, while the electronically excited geometries favourfavor a quinoidic type structure. Absorption and fluorescence energies have been obtained from TD-B3LYP/SVP calculations performed on the S1 optimized geometries and are in excellent agreement with experimental data. The experimental fluorescence excitation energies for $(Cz\text{-}co\text{-}Cz)_4$, $(Cz\text{-}co\text{-}Fl)_4$ and $(Cz\text{-}co\text{-}Th)_4$ (2.76, 2.632.63, and 2.25 eV, respectively) correspond closely with the predicted S_1 transitions (2.84, 3.91 and 2.43 eV, respectively). We also report the predicted radiative lifetimes (0.52, 0.470.52, 0.47, and 0.99 ns for $(Cz\text{-}co\text{-}Cz)_N$, $(Cz\text{-}co\text{-}Fl)_N$ and $(Cz\text{-}co\text{-}Th)_N$, discuss the origin of the small stoke shift of the carbazole based oligomers and the magnitude of bathochromic shifts. We conclude by discussing the benefits of theoretical calculations, which can provide critical structural and electronic understanding of excitation-relaxationexcitation–relaxation phenomena that can be exploited in design of novel optical materials.

Keywords: Conducting polymer Carbazole-based, Time-depnedence density functional theory (TDDFT), Absorption, Fluorescence, Radiative lifetimes

สัญญาเลขที่ MRG5180287

กิตติกรรมประกาศ

การวิจัยในโครงการนี้ได้รับทุนสนับสนุนการวิจัยจากสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา (สกอ.) และสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) โดยความร่วมมือของมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ที่สนับสนุนในด้านสถานที่และวัสดุต่างๆในการทำวิจัย คณะผู้วิจัยขอขอบคุณสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัยและมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ที่สนับสนุนและให้โอกาสในการทำการวิจัยครั้งนี้

ผู้วิจัยขอขอบคุณ รศ.ดร. สุภา หารหนองบัว คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่เสียสละเวลารับเป็นนักวิจัยที่ปรึกษาในโครงงานวิจัยนี้ ซึ่งช่วยสนับสนุน แนะนำเกี่ยวกับการทำงานวิจัย การแก้ไขปัญหาที่เกิดขึ้นและให้กำลังใจในการทำงานวิจัยตลอดเวลา

นอกจากนี้ผู้วิจัยขอขอบคุณบุคลากรในสังกัดภาควิชา คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่ช่วยสนันสนุนในการทำงานวิจัยในทุกๆด้านด้วยดี มา ณ ที่นี้ด้วย

ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร
หัวหน้าโครงการ

สัญญาเลขที่ MRG5180287

สารบัญ

หน้า

a)	หน้าสรุปโครงการ (Executive Summary)	1
b)	ผลการวิจัย	12
c)	ผลลัพธ์ที่ได้ (output)	25
d)	ภาคผนวก	26