

Project Code: BRG/21/2544

Project Title: A Study of Electronic Structures of Molecular Devices by Organic Thin Film  
Examination and Computer Modeling

Investigator : Asst.Prof. Tanakorn Osotchan

Asst.Prof. Teerakiat Kerdcharoen

Asst.Prof. Toemsak Srikirin,

Dr. Udom Robkob

Capability Building Unit for NanoScience and Nanotechnology, Mahidol University

E-mail Address: sctos@mahidol.ac.th

Project Period: 15 June 2001 to 30 November 2010

In this research project, the electronic structure of molecular devices for carbon nanotube was investigated by molecular computer simulation. The effect of end of nanotube was evaluated. Hydrogen bonds were added in case of open end while the half sphere surface similar to that in C<sub>60</sub> molecule was used at the end of capped nanotube. The carbon bond lengths in these open and capped carbon nanotubes were modified depending on the chiral vector index (n,m). In order to understand the application of carbon nanotube in high efficiency lithium ion battery, the interactions between a lithium ion or lithium atom and carbon nanotube was examined by placing the lithium ion or atom at various positions both inside and outside carbon nanotube. It was found that along the radius direction there are some particular positions which exhibit relatively low energy. This position can probably be the place for trapping the lithium ion with carbon nanotube. By varying the position along the nanotube axis, it indicates the possibility of transfer the lithium ion or atom in and out carbon nanotube.

This research project was also studied the electronic structure of highly molecular order thin film which prepared by LB technique. The highly molecular order can be achieved by the hydrophobic and hydrophilic behaviors at each end of the molecule. However in order to achieve the applicable thin film fabrication process and applicable products, the electrical conduction in conjugated polymer molecules was investigated for their potential application in new marketing of plastic electronics. The thin film was prepared by spin coating technique which can be applied to the mass production in the industrial scale. Polyphenylene-vinylene, polyfluorene and its copolymer were conjugate polymer molecules used in this study. During the current pass through these polymer layers, the red and blue light can emit from these polymer molecules, respectively. The calculated electronic structure of conjugated polymer can be used to determine the wavelength of emitted light. The molecular modeling can also be used to indicate the stability of these polymer molecules.

**Keywords:** Electronic structure, Molecular Device, Organic thin film

รหัสโครงการ : BRG/21/2544

ชื่อโครงการ : การศึกษาโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของอุปกรณ์โมเลกุลด้วยการตรวจสอบแผ่นฟิล์มบางอินทรีย์และคอมพิวเตอร์โมเดลลิง

ชื่อหัวข้อวิจัย : ผศ.ดร. ธนากร โอสดาจันทร์ ผศ.ดร. ชีรเกียรติ์ เกิดเจริญ  
ผศ.ดร. เต็มศักดิ์ ศรีศิริรินทร์ ดร.อุดม รอบคอบ

หน่วยสร้างเสริมศักยภาพทางนาโนศาสตร์และนาโนเทคโนโลยี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล  
ระยะเวลาโครงการ : 15 มิถุนายน 2544 ถึงวันที่ 30 พฤศจิกายน 2553

ในโครงการวิจัยนี้ ได้ทำการศึกษาโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของท่อคาร์บอนนาโนด้วยการคำนวณแบบจำลองโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์ ได้มีการศึกษาผลของปลายท่อที่มีลักษณะเปิดด้วยการเพิ่มพันธะไฮโดรเจนและการสร้างท่อปลายปิดด้วยโครงสร้างคล้ายครึ่งทรงกลมของโมเลกุล C60 ได้พบว่าการปิดและเปิดปลายท่อมีผลต่อความยาวพันธะคาร์บอนภายในของท่อนาโนและโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ก็มีการเปลี่ยนแปลงด้วย ซึ่งขึ้นกับดัชนิ ( $n, m$ ) ของท่อคาร์บอนนาโน จากนั้นจึงได้ศึกษาอันตรกิริยาของลิเทียมอะตอมและลิเทียมไอออนที่วางในตำแหน่งต่าง ๆ ทั้งข้างนอกและข้างในท่อคาร์บอนนาโนเพื่อช่วยทำให้มีความเข้าใจในการประยุกต์ใช้ท่อคาร์บอนนาโนเป็นตัวเก็บประจุไฟฟ้าในลิเทียมแบตเตอรี่ประสิทธิภาพสูง โดยพบว่าการวางตามแนวรัศมีของท่อนาโนจะมีตำแหน่งเฉพาะบางค่าที่จะทำให้ท่อคาร์บอนนาโนมีพลังงานต่ำกว่าบริเวณอื่น ซึ่งน่าจะเป็นตำแหน่งที่สามารถกักเก็บลิเทียมไอออนในโครงสร้างท่อคาร์บอนนาโนได้ การศึกษาตำแหน่งของลิเทียมในแนวแกนโมเลกุลท่อคาร์บอนนาโนจะทำให้สามารถทราบความเป็นไปได้ของการเลื่อนเข้าออกของลิเทียมได้

ในโครงการวิจัยนี้ยังได้มีการศึกษาโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของอุปกรณ์โมเลกุลด้วยการตรวจสอบสมบัติของแผ่นฟิล์มบางอินทรีย์ที่เตรียมให้มีการเรียงตัวของโมเลกุลอย่างเป็นระเบียบด้วยเทคนิคการเตรียมฟิล์มแบบ LB ซึ่งมีการควบคุมการจัดเรียงตัวของโมเลกุลด้วยสมบัติการชอบและไม่ชอบน้ำในปลายแต่ละด้านของโมเลกุล ทำให้สามารถกำหนดจำนวนและทิศทางของการจัดวางโมเลกุลได้ อย่างไรก็ตามในการประยุกต์ใช้ได้จริงได้มีการศึกษาสมบัติการนำไฟฟ้าของโมเลกุลสายโซ่คอนจูเกตพอลิเมอร์ที่สามารถนำไฟฟ้าได้ด้วยการเตรียมฟิล์มบางโดยวิธีสปินเคลือบ ซึ่งเป็นวิธีการที่สามารถประยุกต์ใช้ได้กับระบบการผลิตในอุตสาหกรรม โดยได้ศึกษาการนำไฟฟ้าของคอนจูเกตพอลิเมอร์พีนีลีนวินิลีน และพอลิฟูลออรีน รวมทั้งพอลิเมอร์ประกอบ ซึ่งชั้นฟิล์มบางพอลิเมอร์เหล่านี้เมื่อมีการนำไฟฟ้าจะสามารถเปล่งแสงสีแดงและสีน้ำเงินออกจากโมเลกุลเหล่านี้ได้ตามลำดับ การคำนวณโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของโมเลกุลพอลิเมอร์เหล่านี้ จะสามารถใช้ประมาณความยาวคลื่นของแสงที่เปล่งออกมาได้จากค่าความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน นอกจากนี้การคำนวณแบบจำลองโมเลกุลยังใช้เป็นตัวกำหนดความเสถียรของโมเลกุลพอลิเมอร์เหล่านี้ได้อีกด้วย

คำหลัก : โครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ อุปกรณ์โมเลกุล ฟิล์มบางอินทรีย์