



รายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์

การศึกษาโครงสร้างสารโดยวิธีการคำนวณเคมีควอนตัมและพัฒนาการสังเคราะห์
สีย้อมสารอินทรีย์ไวแสง ในกลุ่มของไซยาโนครีติกเอซิค ที่มีสมบัติเป็นตัวรับแสง
สำหรับเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์

A development of organic dyes sensitizers, quantum chemical
calculation and synthesis, of new cyanocrylic acid derivatives
for Dye-sensitized solar cell (DSSC)

ดารินี พรหมโยธิน

RCH

TA

418.9

TA5

๑4๒๗

เลขหมู่.....
เลขทะเบียน..... 131072
วัน,เดือน,ปี. 22 พ.ค. 2557

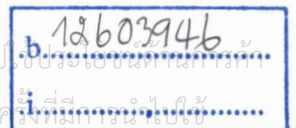
ได้รับทุนสนับสนุนงานวิจัยจากเงินงบประมาณแผ่นดิน ประจำปีงบประมาณ 2555

วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น เมื่อนำไปใช้โดยไม่ได้รับอนุญาตให้นำไปใช้

ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้ง



ชื่อโครงการ การศึกษาโครงสร้างสารโดยวิธีการคำนวณเคมีควอนตัมและพัฒนาการสังเคราะห์สีย้อม
สารอินทรีย์ไวแสง ในกลุ่มของไซยาโนครีติกเอซิค ที่มีสมบัติเป็นตัวรับแสงสำหรับเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์
แหล่งเงิน ทุนสนับสนุนการวิจัยจากสถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ประจำปีงบประมาณ 2555 จำนวนเงินที่ได้รับการสนับสนุน 339,200 บาท
ระยะเวลาทำการวิจัย 1 ปี ตั้งแต่ 1 ตุลาคม 2554 ถึง 30 กันยายน 2555
ชื่อ-สกุล หัวหน้าโครงการ ดารินี พรหมโยธิน วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง

บทคัดย่อ

การปรับปรุงโครงสร้างของสีย้อมไวแสงที่มีโครงสร้างพื้นฐานเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน-ตัวส่งผ่าน
อิเล็กตรอน-หมู่รับอิเล็กตรอน เริ่มจากการออกแบบโครงสร้างโมเลกุลด้วยระเบียบวิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์ โดย
ใช้ทฤษฎีความหนาแน่นอิเล็กตรอนเพื่อหาสีย้อมไวแสงโครงสร้างใหม่ที่คาดว่าจะมีค่าการดูดกลืนแสงสูง
สังเคราะห์ง่ายและมีความสามารถในการถ่ายเทอิเล็กตรอนที่ตรงกับสีย้อมกับโลหะออกไซด์ สีย้อมที่ใช้ศึกษา
มีหมู่รับอิเล็กตรอนเป็นไซยาโนครีติกเอซิคซึ่งทำหน้าที่เป็นหมู่รับอิเล็กตรอนและส่งผ่านอิเล็กตรอนไปยังโลหะ
ออกไซด์ได้ดี การเพิ่มประสิทธิภาพโครงสร้างสีย้อมไวแสงในการทดลองนี้มีสองส่วนคือการศึกษาอิทธิพลของ
หมู่ให้อิเล็กตรอนและการศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนและจำนวนของหมู่รับอิเล็กตรอน จากนั้นทำ
การสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่มีความเป็นไปได้จากการคำนวณ และนำไปประกอบเป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อม
ไวแสงเพื่อศึกษาหาค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ ในการสังเคราะห์สีย้อมไวแสงจะเลือกจาก
โครงสร้างที่มีความเป็นไปได้ที่จะใช้เป็นสีย้อมในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยสังเคราะห์ผ่านปฏิกิริยา
Suzuki reaction, Ullmann reaction และ Sonogashira coupling reaction ตัวอย่างสารที่สังเคราะห์ใน
งานวิจัยนี้ คือการสังเคราะห์สารในกลุ่มอนุพันธ์ของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrrole ที่มีหมู่ไซยาโนครีติกเอ
ซิคเป็นหมู่รับอิเล็กตรอน ค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ที่ได้ 1.10%

คำสำคัญ : การคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ สีย้อมสารอินทรีย์ไวแสง ไซยาโนครีติกเอซิค เซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

II

Research Title: A development of organic dyes sensitizers, quantum chemical calculation and synthesis, of new cyanoacrylic acid derivatives for Dye-sensitized solar cell (DSSC)

Researcher: Darinee Phromyothin College of Nanotechnology

ABSTRACT

An organic dyes base donor-linker-accepter system was designed and developed. The dye molecules consist of three parts, an electron-donor connected by the π -conjugated linker and an acceptor (cyanoacrylic acid). The electronic properties, absorption spectra and density of electron of the new structures of photosensitive-dyes were studied and improved by quantum chemical calculation (DFT/TD-DFT using cam-B3LYP method with 6-31G(d,p) basis set). The cyanoacrylic acceptor-based dyes were used to improve efficiency through donor and π -conjugate-linker modifications. The effective structures of photosensitive-dyes were synthesized and prepared the device to determine the performance of the dye sensitized solar cell. The syntheses were then investigated by using Suzuki reaction, Ullmann reaction and Sonogashira coupling reaction. For example, Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrrole derivative with cyanoacrylic acid as acceptor moiety, gave the photovoltaic conversion efficiency (η) of 1.10%

Keywords : Quantum chemical calculation, Organic dye sensitizer, Cyanoacrylic acid anchoring, Dye-sensitized solar cell

กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัยครั้งนี้ได้รับทุนสนับสนุนการวิจัยจากสถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง จากแหล่งทุนเงินงบประมาณประจำปีงบประมาณ พ.ศ. 2555 งานวิจัยฉบับนี้สำเร็จลุล่วงด้วยดีด้วยความร่วมมือของผู้ที่เกี่ยวข้องหลายฝ่ายโดยเฉพาะอย่างยิ่ง รศ.ดร.จิตติ หนูแก้ว ผศ. อนุชิต จารุณาววัฒน์ ดร. สิริพัฒน์ ประโทนเทพ และ ดร.วิรัตน์ เจริญบุญ ที่ให้ข้อเสนอแนะและแก้ปัญหาเกี่ยวกับงานวิจัยทำให้งานวิจัยสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี ขอขอบคุณ รศ.ดร.สุภา ทารหนองบัว และ ดร.ทรงวุฒิ สุรมิตร ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่ให้การสนับสนุนการทำงานวิจัยในทุกๆด้าน โดยเฉพาะการอนุเคราะห์ให้เครื่องมือวิเคราะห์ทางวิทยาศาสตร์ และโปรแกรมทางเคมีสำหรับการคำนวณ ขอขอบคุณ นางสาวนิสสรณ์ ปวรินทร์ พงษ์ นางสาวปวรวรรณ ธนากิจ และ นายภควัต จิตตระทาน นักศึกษาปริญญาโท และเจ้าหน้าที่วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีทุกคน สำหรับความสำเร็จของงานวิจัยนี้

ดารินี พรหมโยธิน
หัวหน้าโครงการวิจัย



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

IV

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	I
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	II
กิตติกรรมประกาศ.....	III
สารบัญ.....	IV
สารบัญตาราง.....	VI
สารบัญภาพ.....	VII
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา.....	2
1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย.....	2
1.3 ขอบเขตของการวิจัย.....	2
1.4 วิธีดำเนินการวิจัย.....	2
1.5 คำสำคัญของการวิจัย.....	3
1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	3
บทที่ 2 แนวคิด ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง/การทบทวนวรรณกรรม.....	4
2.1 แนวคิด ทฤษฎีหลักตามประเด็นให้ครอบคลุมเรื่องที่วิจัย.....	4
2.2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการทบทวนวรรณกรรม.....	5
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย.....	7
3.1 การคำนวณทางคอมพิวเตอร์.....	7
3.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสง.....	7
3.3 การประกอบเซลล์แสงอาทิตย์.....	8
บทที่ 4 ผลการวิจัย.....	10
4.1 การคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์.....	10
4.1.1 ศึกษาอิทธิพลของหมู่ฟังก์ชันที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอนของหมู่ในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล (Donor).....	10
4.1.2 ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนระบบ π -conjugate.....	13
4.1.3 ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มของไดฟีนิลอนีลีนและไดมethylอนีลีน.....	18
4.1.4 ศึกษาผลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในกลุ่มของไทโอพีนและไทเอโซที่มีผลต่อหมู่เอมีนที่เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	21
4.1.5 ศึกษาผลของจำนวนหมู่รับอิเล็กตรอนที่มีผลต่อหมู่ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole.....	23
4.2 การสังเคราะห์.....	25

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
4.2.1 การปรับปรุงประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงโดยการเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอน ในสีย้อมไวแสงในกลุ่ม triarylamine dyes.....	25
4.2.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอน (Electron donor) เป็นหมู่ฟีนอล (Phenol) และคาร์บาโซล (Carbazole).....	26
4.2.3 การปรับปรุงประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่ม อนุพันธ์ของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrrole.....	28
4.2.4 การสังเคราะห์โมเลกุลของสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มอนุพันธ์ของ 4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline.....	29
4.3 การสร้างเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงและการวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์.....	31
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัย.....	33
บรรณานุกรม/เอกสารอ้างอิง.....	35
ประวัตินักวิจัย.....	39

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
4.1 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	12
4.2 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสง.....	16
4.3 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์ที่แตกต่างกัน.....	17
4.4 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลในกลุ่มของไตรฟีนิลอนีนลินและไดเมทิลอนีนลิน.....	19
4.5 แสดงค่าการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในส่วนต่างๆ ของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า.....	22
4.6 แสดงค่าการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในส่วนต่างๆ ของโมเลกุลสี่ในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole ที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า.....	24
4.7 การวัดค่าพารามิเตอร์ต่างๆ และประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสี่ย้อมไวแสงโดยใช้สี่ย้อมจาก TC1 และ DTP_1 (ค่าเฉลี่ยจากเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสี่ย้อมไวแสง 3 เซลล์).....	32

VII

สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
1.1	โมเลกุลสี่ย้อมไวแสงประกอบด้วยโครงสร้างโมเลกุลหลัก 3 กลุ่ม.....	3
2.1	ตัวอย่างสี่ย้อมอินทรีย์ที่ประกอบด้วยโครงสร้างหมู่ให้อิเล็กตรอน ตัวส่งต่ออิเล็กตรอน และตัวรับอิเล็กตรอน และค่าแสดงประสิทธิภาพ (η) เมื่อประกอบเป็นเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์.....	6
4.1	แสดงโครงสร้างของสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	10
4.2	แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าของย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	10
4.3	แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	11
4.4	แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล.....	12
4.5	แสดงโครงสร้างของสี่ย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนวงแหวนเบนซีน.....	13
4.6	แสดงโครงสร้างของสี่ย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์.....	14
4.7	แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนวงแหวนเบนซีน ที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า.....	14
4.8	แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์ที่แตกต่างกันที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า.....	15
4.9	แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสี่ย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนวงแหวนเบนซีน	15
4.10	แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์ ที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนที่แตกต่างกัน.....	16
4.11	แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มของวงแหวนเบนซีนและสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์.....	17
4.12	แสดงโครงสร้างของสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มของไดฟีนิลอนีนลินและไดเมทิลอนีนลินที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน.....	18
4.13	แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนีนลินและไดเมทิลอนีนลิน....	18
4.14	แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสี่ย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มของไดฟีนิลอนีนลินและไดเมทิลอนีนลิน.....	19
4.15	แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนีนลินและไดเมทิลอนีนลิน.....	20
4.16	แสดงโครงสร้างสี่ย้อมไวแสงที่ศึกษา.....	21
4.17	แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า.....	21

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

VIII

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
4.18 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของโมเลกุลสี่ย้อมไวแสง.....	21
4.19 แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของสี่ย้อมไวแสง.....	22
4.20 แสดงโครงสร้างสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole.....	23
4.21 แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole ที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า.....	23
4.22 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสี่ย้อมไวแสงในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole ที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนหมู่รีบิเล็กตรอน.....	24
4.23 แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของโมเลกุล ในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole.....	25
4.24 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC1.....	25
4.25 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC-A.....	26
4.26 เปรียบเทียบค่าการดูดกลืนแสงระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณ (a) และค่าที่วัดได้จากการทดลอง (b)	26
4.27 ตัวอย่างผลการวิเคราะห์โครงสร้างสารตั้งต้นก่อนเกิด TC-A โดยใช้เทคนิค NMR.....	27
4.28 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC-B.....	27
4.29 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC-C และ TC-D.....	28
4.30 ขั้นตอนการสังเคราะห์โครงสร้างอนุพันธ์ของ DTP (A-D)	28
4.31 ตัวอย่างสาร DTP_C.....	29
4.32 ตัวอย่างผลการวิเคราะห์โครงสร้าง DTP_C ด้วยเทคนิค NMR.....	29
4.33 การสังเคราะห์กลุ่มอนุพันธ์ของ 4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline.....	29
4.34 การติดตามการเกิดปฏิกิริยาโดยใช้ Thin Layer Chromatography.....	29
4.35 แสดง column chromatography ที่ใช้ในการแยกสารที่ต้องการ และ TLC ที่ใช้ตรวจสอบ.....	30
4.36 ตัวอย่างผลการวิเคราะห์โครงสร้าง 5-(4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline)-2-thiophenecarboxaldehyde ที่สังเคราะห์ขึ้นโดยใช้เทคนิค NMR ตรวจสอบโครงสร้าง.....	31
4.37 ลักษณะสี่ย้อมที่สังเคราะห์ขึ้นบนฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์.....	31
4.38 กราฟกระแสและแรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสี่ย้อมไวแสงจากสี่ย้อมของTC1 และ DTP_1.....	32

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความสำคัญและที่มาของปัญหาที่ทำการวิจัย

พลังงานแสงอาทิตย์เป็นอีกทางเลือกหนึ่งของพลังงานทดแทน ที่สามารถนำมาใช้อย่างไม่หมดสิ้น มีศักยภาพสูง นอกจากนี้ยังเป็นพลังงานสะอาด และมีปริมาณมากมายมหาศาล ดังนั้นการพัฒนาการเปลี่ยนแปลงพลังงานแสงจากดวงอาทิตย์ให้นำมาใช้อย่างมีประสิทธิภาพ และก่อให้เกิดประโยชน์มากที่สุด จึงเป็นเรื่องสำคัญที่จะนำทรัพยากรหมุนเวียนนี้มาใช้อย่างคุ้มค่า นอกจากนี้ยังเป็นอีกหนึ่งหนทางในการเพิ่มความมั่นคงด้านพลังงานของประเทศและแก้ไขสภาพความไม่แน่นอนของราคาน้ำมัน เนื่องจากประเทศไทยยังจำเป็นต้องพึ่งพาการนำเข้าน้ำมันจากต่างประเทศ การใช้พลังงานแสงอาทิตย์แทนการใช้เชื้อเพลิงจากน้ำมันจะช่วยลดค่าใช้จ่ายเหล่านี้ได้เป็นจำนวนมาก

การเปลี่ยนพลังงานแสงอาทิตย์มาอยู่ในรูปที่สามารถใช้ประโยชน์ได้ จะอยู่ในรูปของเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ (Solar Cell) เทคโนโลยีการผลิตพลังงานจากแสงอาทิตย์ เริ่มต้นจาก สารกึ่งตัวนำซิลิคอน โดยมีหลักการคือ ซิลิคอนรับพลังงานโฟตอนจากแสงอาทิตย์ อิเล็กตรอนเมื่อได้รับพลังงานจะถูกกระตุ้นจากแถบวาเลนซ์ (Valence band) ไปยังแถบตัวนำ (Conduction band) และสร้างโฮล (Hole) ซึ่งมีประจุทางไฟฟ้าเป็นบวกการทำให้ตัวพาประจุแยกจากกันและเกิดกระแสของอิเล็กตรอนก่อให้เกิดเป็นพลังงาน ในปัจจุบันถึงแม้ว่าจะมีการใช้แผงเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ในการเก็บเกี่ยวประโยชน์จากแสงอาทิตย์ โดยเปลี่ยนพลังงานแสงเป็นพลังงานไฟฟ้า (สมบัติโฟโตโวลตาอิก) หรือเปลี่ยนเป็นพลังงานความร้อน ที่มีประสิทธิภาพ แต่ยังมีขีดจำกัดในเรื่องของราคาแพงของวัสดุต้นทุนคือซิลิคอนที่ต้องมีความบริสุทธิ์สูงมาก รวมทั้งมีกระบวนการผลิตหลายขั้นตอน ใช้เทคโนโลยีขั้นสูง ทำให้มีค่าใช้จ่ายในการผลิตสูงตามมา ดังนั้นจึงมีการพัฒนากระบวนการผลิตเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์โดยใช้วัสดุอื่นแทนที่ซิลิคอนเพื่อลดต้นทุนและลดกระบวนการผลิตที่ซับซ้อน เช่น การทำเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง (Dye-Sensitized Solar Cell, DSSC) ในเซลล์ประกอบด้วยสีย้อมไวแสง ระบบอิเล็กโทรไลต์และสารกึ่งตัวนำออกไซด์ แต่ปัญหาที่พบสำหรับเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ชนิดนี้คือยังมีประสิทธิภาพผู้เซลล์แสงอาทิตย์ที่ทำจากผลึกซิลิคอนไม่ได้ตั้งนั้นได้มีงานวิจัยมากมาย พยายามที่จะปรับปรุงแก้ปัญหาที่จุดนี้ เช่นการเพิ่มความสามารถในการดูดกลืนแสงของชั้นสี การพัฒนาความสามารถในการแลกเปลี่ยนอิเล็กตรอนของสารละลายอิเล็กโทรไลต์ การปรับปรุงคุณสมบัติของฟิล์มอนุภาคนาโนของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ เพื่อให้อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่ได้อย่างต่อเนื่อง ทำให้สามารถลดการรวมตัวกันระหว่างอิเล็กตรอนอิสระกับโมเลกุลของสีย้อม เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพให้เทียบเท่าเซลล์แสงอาทิตย์ซิลิคอน ดังนั้นทางผู้วิจัยจึงมีแนวคิดที่จะพัฒนาเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ชนิดนี้ โดยการเพิ่มประสิทธิภาพของสีย้อมสารอินทรีย์ โดยการปรับปรุงโครงสร้างสารอินทรีย์ โดยใช้เทคนิคการออกแบบโครงสร้างโมเลกุลโดยเคมีคอมพิวเตอร์ เพื่อหาสารโมเลกุลใหม่ที่ดีกว่าจะมีความสามารถในการถ่ายเทอิเล็กตรอนที่ดีระหว่างสีย้อมกับโลหะออกไซด์ สังเคราะห์ง่าย มีความทนทานสูง โดยใช้หมู่ไซยาโนคริลิกเอซิกเป็นตัวยึดเกาะกับโลหะออกไซด์(ไททาเนียมไดออกไซด์) และสังเคราะห์สารที่มีความสามารถดังกล่าว เพื่อเป็นอีกหนึ่งทางเลือกในการใช้ประติษฐ์เซลล์แสงอาทิตย์ เพื่อพัฒนาการประยุกต์ใช้พลังงานแสงอาทิตย์ให้เกิดประโยชน์สูงสุด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการวิจัย

1.2.1 ออกแบบโครงสร้างโมเลกุลสี่อ้อมสารอินทรีย์ไวแสง ที่มีสมบัติเป็นตัวรับแสงในโฟโตโวลตาอิก โดยใช้ระเบียบวิธีทางคำนวณเคมีควอนตัม

1.2.2 วิเคราะห์ และศึกษาสมบัติและการเปลี่ยนแปลงทางอิเล็กทรอนิกส์ของโมเลกุลสี่อ้อมสารอินทรีย์ไวแสง โดยการสร้างโมเดลจำลองโมเลกุลในคอมพิวเตอร์

1.2.3 สังเคราะห์โมเลกุลสี่อ้อมไวแสง ในกลุ่มอนุพันธ์ของไซยาโนครีลิคเอซิค จากโครงสร้างที่ผ่านการออกแบบแล้ว

1.2.4 เพื่อประดิษฐ์เซลล์แสงอาทิตย์จากสี่อ้อมสารอินทรีย์ไวแสง ที่สังเคราะห์ขึ้น

1.3 ขอบเขตของโครงการวิจัย

สารอินทรีย์นำไฟฟ้าในกลุ่มที่สนใจคืออนุพันธ์ของเอมีน และคาร์บารโซล ซึ่งเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน เกาะกับอนุพันธ์ของกลุ่มไทโอพีนที่ทำหน้าที่เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนสู่โมเลกุลไซยาโนครีลิคเอซิคซึ่งทำหน้าที่เป็นตัวรับอิเล็กตรอนและถ่ายเทประจุสู่ขั้วไฟฟ้า งานวิจัยนี้เน้นการเพิ่มความสามารถเกาะกับอนุภาคของไททานเนียมไดออกไซด์ของสี่อ้อม เพื่อเพิ่มความสามารถในการส่งต่อของอิเล็กตรอน โดยก่อนการสังเคราะห์สี่อ้อมจะออกแบบโครงสร้างโมเลกุลด้วยระเบียบวิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์ Time Dependent Density Functional Theory (TD-DFT) โดยการจำลองโครงสร้างโมเลกุล ศึกษาความเป็นไปได้ในการถ่ายเทประจุอิเล็กตรอนของชั้นสี่อ้อม เพื่อทำนายคุณสมบัติอิเล็กทรอนิกส์ค่าแถบการนำไฟฟ้าของสารที่ออกแบบด้วยคอมพิวเตอร์ ก่อนการสังเคราะห์จริง และเมื่อสังเคราะห์ได้แล้วจะนำสี่อ้อมที่ได้ไปประดิษฐ์เป็นเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ เพื่อปรับปรุงโครงสร้างสารให้ดียิ่งขึ้นต่อไป

1.4 วิธีดำเนินการวิจัย

โครงการวิจัยนี้ได้แบ่งขั้นตอนการทำงานวิจัยหลักเป็นสามส่วนคือ

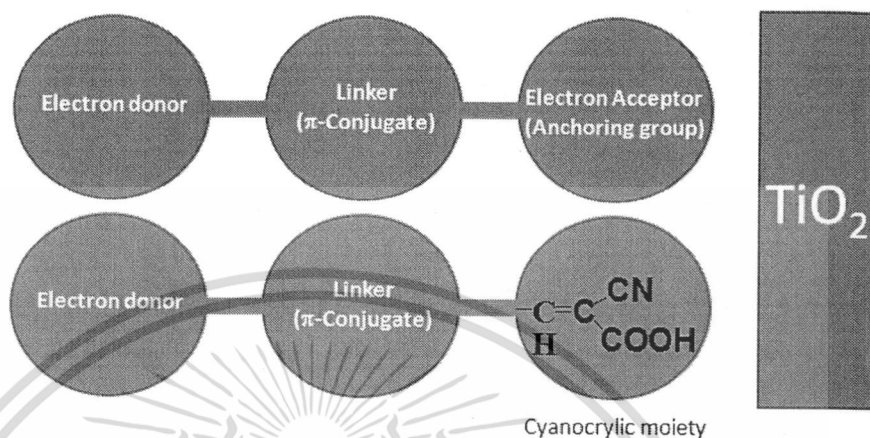
1.4.1 การศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของสี่อ้อมไวแสง โดยอาศัยระเบียบวิธีการคำนวณทางเคมีควอนตัม

ใช้เทคนิคการศึกษาออกแบบวัสดุศาสตร์โดยอาศัยการคำนวณบนเครื่องคอมพิวเตอร์ โดยคำนวณทั้งทางกลศาสตร์โมเลกุล และกลศาสตร์ควอนตัมเพื่อให้ได้โครงสร้างสามมิติที่มีพลังงานต่ำสุดแล้วนำไปคำนวณสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์โดยใช้ระเบียบวิธีทางควอนตัม Density Functional Theory (DFT) และ Time Dependent Density Functional Theory (TD-DFT) โดยอธิบายพฤติกรรมของอิเล็กตรอนด้วยในออร์บิทัล ด้วยเซตมูลฐาน (basis set) โดยจะพิจารณาการจัดเรียงตัวโครงสร้างของโมเลกุลทั้งในสถานะที่สถานะพื้น (Ground state ,สถานะก่อนโดนกระตุ้นด้วยแสง) และสถานะการกระตุ้น (Excited State) เมื่อโมเลกุลได้รับพลังงานจะเกิดการกระโดดของอิเล็กตรอนภายในโมเลกุล ทำให้เกิดการดูดกลืนแสงและการคายแสงของสาร จากข้อมูลที่ได้ทำให้ทราบสมบัติการดูดกลืนแสง และการเปล่งแสงของสาร ซึ่งเราสามารถใช้ในการทำนายสมบัติของสารก่อนทำการสังเคราะห์ เพื่อประหยัดเวลา ค่าใช้จ่าย และลดการสูญเสียสารเคมีโดยไม่จำเป็น

1.4.2 การสังเคราะห์โมเลกุลสี่อ้อมไวแสง

ในงานวิจัยนี้จะสังเคราะห์ในกลุ่มของไซยาโนครีลิคเอซิค ที่มีสมบัติในการยึดเกาะที่ดีกับไททานเนียมไดออกไซด์ทำให้เพิ่มประสิทธิภาพของการส่งผ่านประจุอิเล็กตรอน ภายในโครงสร้างโมเลกุลของสารสี่อ้อมไวแสงจะต้องประกอบไปด้วยสาร 3 กลุ่มคือ ตัวให้อิเล็กตรอน ตัวรับอิเล็กตรอน และ ตัวที่ใช้เอกสารเป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาค้นคว้า เมื่อนักวิทยาศาสตร์ไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ในการส่งต่ออิเล็กตรอนจากสีย้อมสู่โลหะออกไซด์ตามภาพที่ 1.1 ขั้นตอนการสังเคราะห์หลักคือการต่อสาร 3 กลุ่มเหล่านี้ให้เป็นโครงสร้างเดียวกัน



ภาพที่ 1.1 โมเลกุลสีย้อมไวแสงประกอบด้วยโครงสร้างโมเลกุลหลัก 3 กลุ่ม

1.4.3 การประกอบเซลล์แสงอาทิตย์

นำสีย้อมสารอินทรีย์ที่สังเคราะห์มาประกอบเซลล์โดยใช้ชั้นฟิล์มบางไททาเนียมไดออกไซด์ เป็นตัวกลางในการส่งผ่านอิเล็กตรอน และใช้สารละลายอิเล็กโทรไลต์ I^-/I_3^- เป็นตัวกลางสำหรับส่งผ่านประจุ และวัดกระแสที่ได้จากการให้ความต่างศักย์และนำไปคำนวณหาค่าประสิทธิภาพของเซลล์

1.5 คำสำคัญของงานวิจัย

Quantum chemical calculation, Organic dye sensitizer, Cyanocrylic acid anchoring, Dye-sensitized solar cell

1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

ผลการวิจัยจะเป็นข้อมูลพื้นฐานที่สำคัญ ที่ทำให้เข้าใจกลไกในการเพิ่มประสิทธิภาพการดูดกลืนแสงของโมเลกุลสารอินทรีย์ และการปรับปรุงโครงสร้างเคมีให้เหมาะสมกับวัตถุประสงค์ของการทำงาน และจะนำไปสู่การศึกษาและวิจัยต่อยอดได้ในด้านต่างๆได้ เช่นการสังเคราะห์สารใหม่ให้มีคุณสมบัติที่เหมาะสมต่อการนำไปใช้งานด้านนาโนเทคโนโลยี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 2

แนวคิด ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง/การทบทวนวรรณกรรม

2.1 แนวคิด ทฤษฎีหลักตามประเด็นให้ครอบคลุมเรื่องที่วิจัย

2.1.1 เซลล์พลังงานแสงอาทิตย์แบบสีย้อมไวแสง ประกอบไปด้วยองค์ประกอบหลัก คือ สีย้อมไวแสง อนุภาคของโลหะออกไซด์ อิเล็กโทรไลต์ และขั้วไฟฟ้า โดยแต่ละส่วนมีหน้าที่ดังนี้คือ

2.1.1.1 สีย้อมไวแสง (Dye-sensitizer) ทำหน้าที่ดูดกลืนพลังงานแสงอาทิตย์ โดยโมเลกุลสี ได้รับพลังงานโฟตอน จะปลดปล่อยอิเล็กตรอนออกมา จากสถานะพื้น (Ground State) ไปยังสถานะกระตุ้น (Excited State) และส่งผ่านอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้า (Conduction Band) ของอนุภาคโลหะออกไซด์

2.1.1.2 อนุภาคของโลหะออกไซด์ ทำหน้าที่รับอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมไวแสง และส่งอิเล็กตรอนไปยังขั้วแอโนดมักเป็นกลุ่มสารกึ่งตัวนำที่มีแถบพลังงานกว้าง (wide band gap semiconductor) และระดับพลังงานของขอบล่างของแถบการนำ (conduction band) ควรจะมีค่าน้อยกว่าค่าระดับพลังงานที่สถานะถูกกระตุ้น (Excited state) ของโมเลกุลของสีย้อม เพื่อทำให้เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนจากโมเลกุลของเม็ดสีมายังสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ได้

2.1.1.3 สารอิเล็กโทรไลต์ ทำหน้าที่ในการส่งผ่านอิเล็กตรอน (electron transfer) โดยขดเชยอิเล็กตรอนให้กับโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่ถูกกระตุ้นกลับสู่สถานะพื้น และรับอิเล็กตรอนคืนจากขั้วแคโทด ในสารละลายอิเล็กโทรไลต์จะอาศัยกระบวนการเกิดปฏิกิริยารีดอกซ์ (Reduction) และปฏิกิริยาออกซิเดชัน (Oxidation) หรือที่เรียกว่า ปฏิกิริยา รีดอกซ์ (Redox reaction)

2.1.1.4 ขั้วไฟฟ้าประกอบด้วยขั้วไฟฟ้าแอโนดและขั้วไฟฟ้าแคโทด โดยขั้วแอโนดทำหน้าที่ถ่ายโอนอิเล็กตรอนไปสู่วงจรภายนอกและขั้วไฟฟ้าแคโทดทำหน้าที่ให้อิเล็กตรอนกลับคืนสู่สารประกอบ อิเล็กโทรไลต์

2.1.2 การพัฒนาประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์สีย้อมไวแสงทำได้โดย

2.1.2.1 การพัฒนาสีย้อมไวแสง สีย้อมไวแสงที่ดีต้องมีสมบัติในการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วงความยาวคลื่นแสงตามองเห็น และครอบคลุมถึงช่วงใกล้อินฟราเรด เพื่อให้ดูดกลืนพลังงานคลื่นแสงอาทิตย์ให้ได้มากที่สุด และสามารถยึดเกาะกับพื้นผิวอนุภาคโลหะออกไซด์ได้ดี มีความเสถียรภาพเมื่ออยู่ในสภาวะที่ถูกออกซิไดซ์ สภาวะพื้นและสภาวะถูกกระตุ้น สามารถถ่ายเทอิเล็กตรอนระหว่างสีย้อมกับโลหะออกไซด์ได้ดี มีราคาถูกและไม่เป็นพิษกับสิ่งแวดล้อม ซึ่งงานวิจัยชิ้นนี้ผู้วิจัยมีความตั้งใจที่จะพัฒนาโครงสร้างสีย้อม ให้มีคุณสมบัติดังกล่าว โดยนำสารที่มีคุณสมบัติที่เหมาะสมมาสังเคราะห์โครงสร้างให้รวมกันเป็นโมเลกุลเดียวกัน เพื่อให้ง่ายต่อการนำไปใช้งานต่อไป

2.1.2.2 การพัฒนาสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ ต้องมีแถบพลังงานกว้าง ($>3\text{eV}$) มีรูพรุนสูงกระจายตัวสม่ำเสมอ พื้นผิวสัมผัสมาก ไม่ดูดกลืนแสงในช่วงที่ตามองเห็น มีค่าคงที่ของการนำไฟฟ้า (dielectric constant) ที่สูง มีความเสถียร ราคาถูกและไม่เป็นพิษต่อสิ่งแวดล้อม

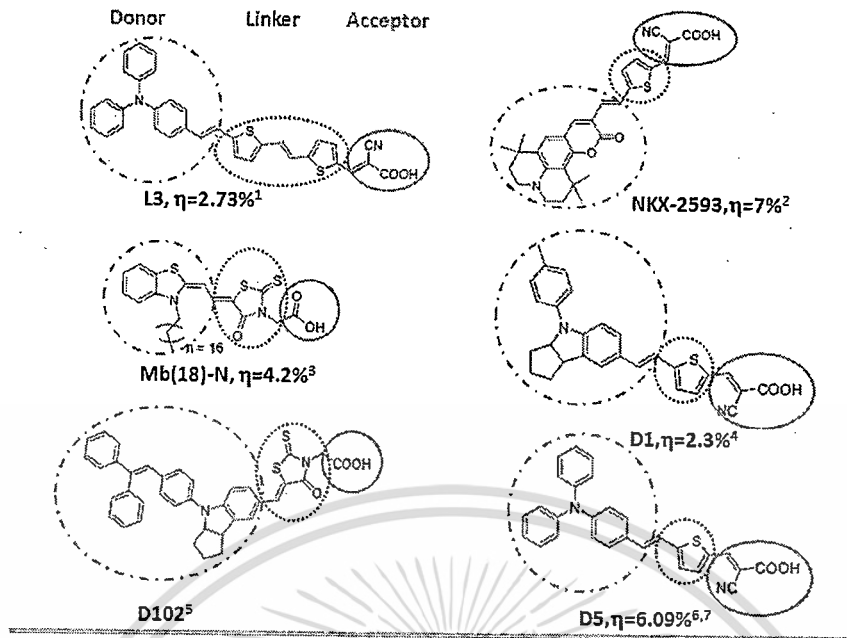
2.1.2.3 การพัฒนาสารละลายอิเล็กโทรไลต์ สมบัติของสารละลายอิเล็กโทรไลต์ในเซลล์แสงอาทิตย์ต้องมีสมบัติดังนี้ คือ ไม่มีการดูดกลืนแสงอาทิตย์ เกิดปฏิกิริยารีดอกซ์-ออกซิเดชันได้ง่าย มีความคงตัวสูง ไม่เกิดสารประกอบตัวใหม่ที่ไม่ต้องการขึ้นภายในเซลล์ และไม่ระเหยง่าย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการทบทวนวรรณกรรม

เซลล์พลังงานแสงอาทิตย์แบบสีย้อมไวแสงได้ถูกประดิษฐ์ขึ้นโดย ดร. เวย์น แคมป์เบลล์ กับ นักวิจัยในศูนย์วิจัยวัสดุคานาโนของมหาวิทยาลัย Massey ในปี 1991 ผลงานชิ้นนี้ได้รับความสนใจจาก นักวิจัยทั่วโลก เนื่องจากเซลล์ชนิดนี้ มีราคาต้นทุนที่ต่ำ สามารถบดงอได้ และมีศักยภาพที่จะนำมาพัฒนา ให้เพิ่มประสิทธิภาพต่อไปได้อีก โดยการปรับเปลี่ยนหมู่แทนที่ในโมเลกุล ซึ่งเป็นข้อได้เปรียบเมื่อเทียบกับ เซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ที่ทำจากซิลิคอน สีย้อมไวแสงที่นำมาใช้ดูดกลืนพลังงานแสงอาทิตย์มีหลาย ประเภท เช่น 1) สีย้อมไวแสงที่มีหมู่โลหะเป็นองค์ประกอบ เช่น สารประกอบเชิงซ้อนของโลหะรูเทเนียม สารประกอบเชิงซ้อนของโลหะแคดเมียม เซลีเนียม เทลูเรียม สีย้อมกลุ่มนี้ประสิทธิภาพในการเปลี่ยน พลังงานแสงอาทิตย์เป็นพลังงานไฟฟ้าได้ประมาณ 10% ซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์แบบ รอยต่อพีเอ็นของสารกึ่งตัวนำซิลิคอน แต่อย่างไรก็ตามสีย้อมไวแสงในกลุ่มนี้ก็มีข้อเสียคือ มีช่วงการ ดูดกลืนคลื่นแสงอาทิตย์ที่แคบ ราคาแพง และโลหะบางชนิดเป็นพิษต่อสิ่งแวดล้อม 2) สีย้อมที่สกัดได้จาก พืชที่มีสี เช่น สีสกัดดอกอัญชัญ, ข้าวเหนียวดำ, กระเจี๊ยบ, แครอทและลูกหมึก สีในกลุ่มนี้จะเป็น สารประกอบประเภท สารคลอโรฟิลล์, แอนโทไซยานิน, แคโรทีนอยด์, แทนนิน หรืออื่นๆ สีในกลุ่มนี้มีข้อดีคือ หาได้ง่ายในธรรมชาติ ราคาถูก เป็นพืชต่ำ แต่ให้ประสิทธิภาพค่อนข้างดีแต่ต่ำกว่าสีย้อมไวแสงที่มีหมู่โลหะ เป็นองค์ประกอบ และนอกจากนี้สารกลุ่มนี้ส่วนใหญ่จะไม่เสถียรเมื่อโดนความร้อน เมื่อประกอบเป็นเซลล์ พลังงานแสงอาทิตย์แล้ว จะให้อายุการใช้งานค่อนข้างสั้น 3) สีย้อมไวแสงสารอินทรีย์สังเคราะห์ เช่น กลุ่ม พอลิเมอร์นำไฟฟ้าหรือกลุ่มสารอินทรีย์ที่ประกอบด้วยพันธะคู่สลับเดี่ยวในโครงสร้าง สารอินทรีย์กลุ่มนี้ มีความสามารถในการนำไฟฟ้าและสามารถทำการปรับเปลี่ยนสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติอิเล็กทรอนิกส์ เมื่อได้รับพลังงานแสง จึงสามารถนำมาใช้เป็นตัวดูดกลืนแสงอาทิตย์ได้ สีกลุ่มนี้มีข้อดีคือมีความทนทานต่อ ความดันและความร้อน แต่ก็มีข้อเสียคือ เซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ในกลุ่มนี้ยังมีประสิทธิภาพไม่ดี ดังนั้นได้ มีงานวิจัยหลายๆชิ้นพยายามที่จะปรับปรุงปัญหาตรงนี้ เช่นการปรับปรุงโครงสร้างของสารอินทรีย์ให้ สามารถยึดเกาะกับโลหะออกไซด์ได้ดีมากขึ้น หรือการปรับปรุงโครงสร้างให้สารกลุ่มนี้สามารถดูดกลืนแสง ในช่วงที่กว้างมากขึ้น เช่นเพิ่มการดูดกลืนในช่วงความยาวคลื่นช่วงใกล้อินฟราเรด (near IR) ในงานวิจัยนี้ได้ สนใจที่จะสังเคราะห์สารอินทรีย์ที่สามารถดูดกลืนแสงได้ดีในช่วงคลื่นความยาวแสงดวงอาทิตย์ โดย ปรับปรุงโครงสร้างสารอินทรีย์ โดยต่อหมู่โมเลกุลสารที่มีข้อดีต่างๆ กันเข้าด้วยกัน และออกแบบรูปร่าง โมเลกุลของสาร ปรับปรุงโครงสร้างของโมเลกุลให้จำเพาะต่อการดูดกลืนมากขึ้น เพื่อให้สารอินทรีย์ ที่มี ความสามารถในการดูดกลืนแสงที่กว้าง และสามารถส่งผ่านอิเล็กตรอนได้ดี ภายในโครงสร้างจะต้อง ประกอบด้วย หมู่ให้อิเล็กตรอน(Electron Donor) ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน(Linker) และตัวรับอิเล็กตรอน (Electron Acceptor) ที่สามารถส่งผ่านอิเล็กตรอนสู่โลหะออกไซด์ได้ดี ตัวอย่างโครงสร้างสารกลุ่มนี้ตามภาพ ที่ 2.1

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาพที่ 2.1 ตัวอย่างสีย้อมอินทรีย์ที่ประกอบด้วยโครงสร้างหมู่ให้อิเล็กตรอน ตัวส่งต่ออิเล็กตรอน และตัวรับอิเล็กตรอน และค่าแสดงประสิทธิภาพ (η) เมื่อประกอบเป็นเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ที่มาจาก Hagfeldt และคณะ, Chemical Reviews 2010, 110, 6595.

จากข้อมูลข้างต้นพบว่า การเพิ่มประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ที่ใช้สารอินทรีย์สามารถทำได้โดยการนำเอาสารที่เป็นหมู่คอนจูเกตไปผสมกับสารชนิดอื่นที่มีคุณสมบัติเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ทำให้ไม่เกิดปรากฏการณ์รวมกันของประจุ และสามารถถ่ายเทประจุส่งต่อไปสู่ขั้วไฟฟ้าให้มากที่สุด ดังนั้นในงานวิจัยนี้จะเป็นการออกแบบ และทำการสังเคราะห์สารอินทรีย์ เพื่อเป็นการปรับปรุงคุณภาพและเพิ่มประสิทธิภาพของเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์

บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย

ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัยจะเริ่มต้นจากการศึกษางานวิจัยต่างๆ ที่เกี่ยวข้องกับเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงทั้งในด้านการคำนวณแบบจำลองของสีย้อมไวแสงทางคอมพิวเตอร์ การสังเคราะห์โมเลกุลของสีย้อมจากนั้นศึกษาหากลุ่มของสีย้อมที่น่าสนใจ เพื่อนำมาปรับปรุงโครงสร้างเพื่อพัฒนาประสิทธิภาพของโมเลกุลสีย้อมไวแสง โดยเริ่มต้นจากการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ เพื่อทำนายค่าการดูดกลืนแสง แลพบพลังงานต้องห้ามและความหนาแน่นอิเล็กตรอนที่สถานะพื้นและสถานะเร้า เพื่อเป็นการทำนายผลว่ามีความเหมาะสมที่จะนำมาสังเคราะห์หรือไม่ จากนั้นทำการสังเคราะห์โมเลกุลของสีย้อมไวแสง

3.1 การคำนวณทางคอมพิวเตอร์

การคำนวณที่ใช้ทั้งหมดเป็นการคำนวณผ่านโปรแกรม Gaussian09 โดยใช้ทฤษฎีความหนาแน่นอิเล็กตรอน (Density Functional Theory) และวิธีการคำนวณโดยใช้ระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d) เพื่อหาโครงสร้างที่ถูกต้องที่สถานะพื้น (ground state) แล้วนำโครงสร้างนี้ไปใช้ในการคำนวณค่าพลังงานที่สถานะเร้าเมื่อโมเลกุลถูกกระตุ้นตั้งแต่ระดับชั้นพลังงานสถานะเร้าที่ 1-10 โดยใช้ทฤษฎีความหนาแน่นอิเล็กตรอน (TD-Density Functional Theory) และวิธีการคำนวณโดยใช้สมการระเบียบวิธี cam-B3LYP/6-31G(d) เพื่อนำไปใช้ทำการดูดกลืนแสง แลพบพลังงานต้องห้ามและความหนาแน่นอิเล็กตรอน เพื่อศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน, ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน และหมู่รับอิเล็กตรอน ที่มีผลต่อค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสง ซึ่งส่งผลต่อค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

3.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสง

หลังจากคำนวณเพื่อทำนายการดูดกลืนแสงแลพบพลังงานต้องห้ามและความหนาแน่นอิเล็กตรอนซึ่งส่งผลต่อค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงแล้ว เราจะทำการสังเคราะห์โครงสร้างของสีย้อมที่มีความเป็นไปได้ที่จะใช้เป็นสีย้อมในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง ปฏิกริยาที่ใช้ในการสังเคราะห์สีย้อมไวแสงในงานวิจัยนี้ มี 3 ปฏิกริยาหลักๆ คือ Suzuki reaction, Ullmann reaction และ Sonogashira coupling reaction โดยการสังเคราะห์ จะมีทั้งในการปรับปรุงประสิทธิภาพจากการเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอนและการเพิ่มตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนระบบ π -conjugate โดยปฏิกริยาการสังเคราะห์ หมู่ให้อิเล็กตรอนเริ่มจากการเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอนแก่ส่วนที่เป็น หมู่ให้อิเล็กตรอนโดยใช้ปฏิกริยา โบรมิเนชัน(bromination) เพื่อทำปฏิกริยารวมตัวกับส่วนที่เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนส่วนปฏิกริยาการสังเคราะห์ ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ปฏิกริยาจะเริ่มจากการนำหมู่ให้อิเล็กตรอนทำปฏิกริยารวมตัวกับตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน และหลังจากได้โครงสร้างที่ถูกต้องจากการตรวจสอบด้วยเทคนิค NMR แล้ว ขั้นสุดท้ายทำการเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันจากแอลดีไฮด์ (aldehyde) เป็นไซยาโนคริลิกเอซิด (cyanoacrylic acid)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง

1. 4-Diphenylaminobenzaldehyde
2. Carbazole
3. N-Bromosucinamide
4. 4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline
5. 2,5-Dibromothiophene
6. 3,3'-Dibromo-2,2'-bithiophene
7. (2-methylbutyl)amine
8. Sodium tertbutyloxide
9. 2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthy
10. 4-formylphenylboronic acid
11. Tetrabutylammoniumbromide
12. Potassiumcarbonate
13. (Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))
14. Tetrakis(triphenylphophine)palladiumdichloride
15. Copper iodide
16. Cyanoacetic acid
17. Piperidene
18. Triethylamine
19. Ammonium chloride
20. Ammoniumacetate
21. THF
22. Chloroform
23. Acetic acid
24. Acetonitrile
25. Dichloromethane
26. Hexane
27. Siliga gel

3.3 การประกอบเซลล์แสงอาทิตย์

ขั้นตอนในการเตรียมเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

3.3.1 ตัดกระจกนำไฟฟ้าให้มีขนาด 1 x 2 เซนติเมตร เพื่อใช้เป็นขั้วแคโทด (Cathode) และแอโนด (Anode)

3.3.2 เริ่มจากการเตรียมขั้วแอโนด โดยนำกระจกที่ตัดได้ขนาดที่ต้องการแล้วมาสกรีนด้วย TiO_2 เป็นจำนวนทั้งหมด 5 ชั้น ซึ่งเป็นค่าที่เหมาะสม โดยการสกรีนทีละชั้น และนำไปให้ความร้อนที่ประมาณ 90 องศาเซลเซียส จากนั้นนำมาพักไว้ให้เย็นจึงทำการสกรีนชั้นถัดไป โดยเมื่อสกรีนครบ 5 ชั้นแล้ว สกรีนทับชั้นสุดท้ายด้วย Scattering TiO_2 เพื่อช่วยในการกระเจิงแสงเพื่อช่วยเพิ่มโอกาสการตกกระทบของแสงไปยังสีย้อมไวแสงจากการทดลองสกรีนที่จำนวนชั้นต่างๆ ตั้งแต่ 1 - 7 ชั้น จากนั้นทำการเอ็กซเรย์เป็นเอกสารทงส่วนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น เมืออนุญาตให้มาใช้ประโยชน์ในการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

วิเคราะห์ด้วยเทคนิค Scanning Electron Microscopes (SEM)แล้วพบว่าการสกรีน TiO_2 เป็นจำนวน 5 ชั้น เป็นจำนวนที่เหมาะสมที่สุดคือฟิล์มมีความหนามากที่สุดขณะที่ฟิล์มยังคงมีความเสถียร ไม่เกิดรอยแตกร้าว

3.3.3 สกรีน Platinum ลงบนกระจกนำไฟฟ้าอีกด้าน 1 ชั้นโดยมีขนาดฟิล์มใหญ่กว่า TiO_2 เพื่อใช้เป็นขั้วแคโทดจากนั้นนำกระจกนำไฟฟ้าที่สกรีนด้วย TiO_2 และ Platinum แล้วเผาในเตาเผาที่อุณหภูมิ 500 องศาเซลเซียส เพื่อไล่สารอินทรีย์ออกจากฟิล์ม TiO_2 และ Platinum

3.3.4 นำกระจกนำไฟฟ้าที่สกรีนด้วย TiO_2 มาแช่ลงในสีย้อมซึ่งอยู่ในตัวทำละลาย เป็นเวลา 24 ชั่วโมง แล้วประกอบเป็นเซลล์แสงอาทิตย์โดยใช้พาราฟิล์มที่มีลักษณะเป็นวงแหวนสี่เหลี่ยม เป็นตัวกั้นระหว่างขั้วสองขั้ว โดยมีสารละลายอิเล็กโทรไลต์เป็น I^-/I_3^- เพื่อทำการส่งผ่านอิเล็กตรอนระหว่างขั้วทั้งสองขั้ว

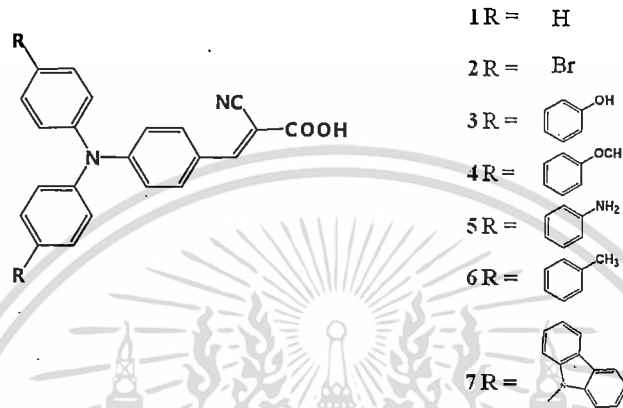


เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 4 ผลการวิจัย

4.1 การคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

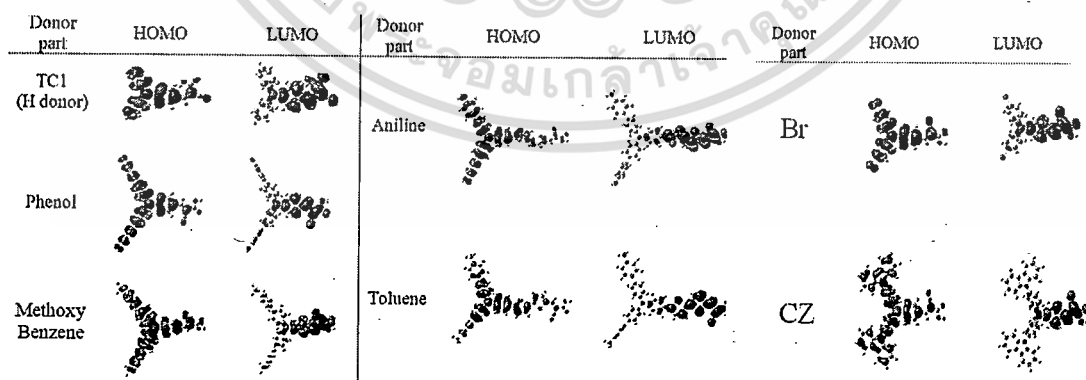
4.1.1 ศึกษาอิทธิพลของหมู่ฟังก์ชันที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอนของหมู่ในลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล (Donor)



ภาพที่ 4.1 แสดงโครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน

ในการทดลองนี้การศึกษาการกระจายอิเล็กตรอนที่เปลี่ยนแปลงไปเมื่ออนุพันธ์ของไตรฟีนิลไซยาโนคริลิกเอซิดมีการแทนที่ตำแหน่งพารา โดยหมู่แทนที่ที่ศึกษาได้แก่ ไฮโดรเจน โบรมีน ฟีนอล เมทอกซีเบนซีน โทลูอีน อนิลีน และ คาบาริล

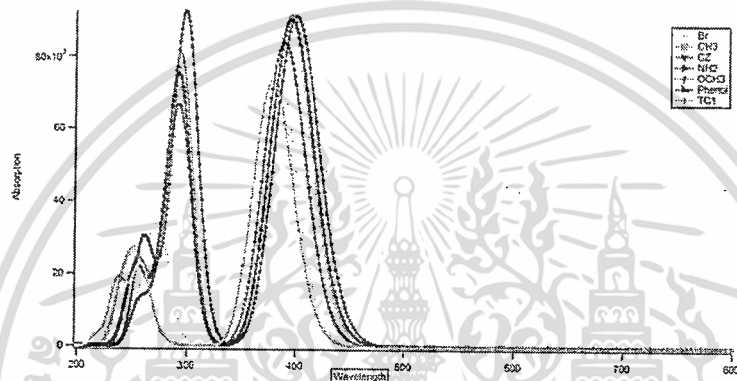
4.1.1.1 โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)



ภาพที่ 4.2 แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าของย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

ภาพที่ 4.2 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนและกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลและเมื่อโมเลกุลของสีย้อมไวแสงได้รับการกระตุ้น อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนไปยังอีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งเรียกว่าหมู่รับอิเล็กตรอนการเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเช่นนี้ เป็นลักษณะสำคัญของสีย้อมที่จะสามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ TiO_2 และยังเป็นปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงอีกด้วย

4.1.1.2 ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



ภาพที่ 4.3 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิลที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน

จากภาพที่ 4.3 พบว่าเมื่อเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นหมู่โอรมาติกที่มีหมู่ฟังก์ชันต่างกันเช่น โทลูอิน อนิลิน ฟีนอล คาบาริโซลและเมทอกซีเบนซีน จะทำให้สีย้อมไวแสงมีช่วงการดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่นที่มากขึ้น สามารถดูดกลืนแสงได้ดีขึ้น และในงานวิจัยนี้พบว่าอนิลินเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ให้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีค่ามากที่สุด จึงสามารถดูดกลืนแสงในช่วงกว้างที่สุด อีกทั้งยังมีค่าแถบพลังงานต้องห้ามต่ำที่สุดจึงใช้พลังงานในการกระตุ้นน้อยที่สุดในการกระตุ้นอิเล็กตรอนในสีย้อมไวแสง

4.1.1.3 ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

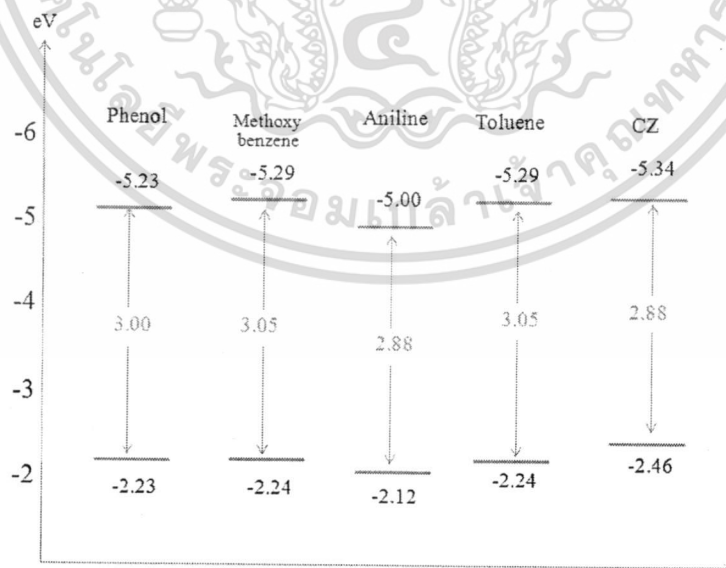
จากผลการคำนวณการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าพบว่า สีย้อมทุกโครงสร้าง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปในแนวทางเดียวกันหมด นั่นก็คือมีการเคลื่อนที่จากบริเวณส่วนที่เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนไปยังส่วนของหมู่รับอิเล็กตรอนโดยโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นอนิลินและคาบาริโซลอิเล็กตรอนจะมีแนวโน้มการเคลื่อนที่มายังบริเวณหมู่รับอิเล็กตรอนมากที่สุด คือความแตกต่างระหว่าง HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) และ LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) เท่ากับ 53% และ 56% ตามลำดับ และในส่วนของ หมู่ให้อิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลงของอิเล็กตรอนมากที่สุดเช่นกัน คือ มีการเปลี่ยนแปลงอิเล็กตรอนเท่ากับ 33% และ 56% ตามลำดับดังนั้นจึงสรุปได้ว่าอนิลินและคาบาริโซลเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่สามารถส่งผ่านอิเล็กตรอนไปสู่โลหะ TiO_2 ได้มากที่สุด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.1 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสี้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

Functional group of aromatic donor	State	Donor	Triphenyl	Linker	Acceptor
H	HOMO	-	89	-	11
	LUMO		37		63
Br	HOMO	6	83	-	12
	LUMO	0	40		60
OH	HOMO	19	72	-	9
	LUMO	1	39		60
OCH ₃	HOMO	12	78	-	10
	LUMO	1	39		60
NH ₂	HOMO	34	59	-	7
	LUMO	1	39		60
CH ₃	HOMO	12	78	-	10
	LUMO	1	39		60
CZ	HOMO	56	40	-	4
	LUMO	0	39		60

4.1.1.4 แถบพลังงานต้องห้าม



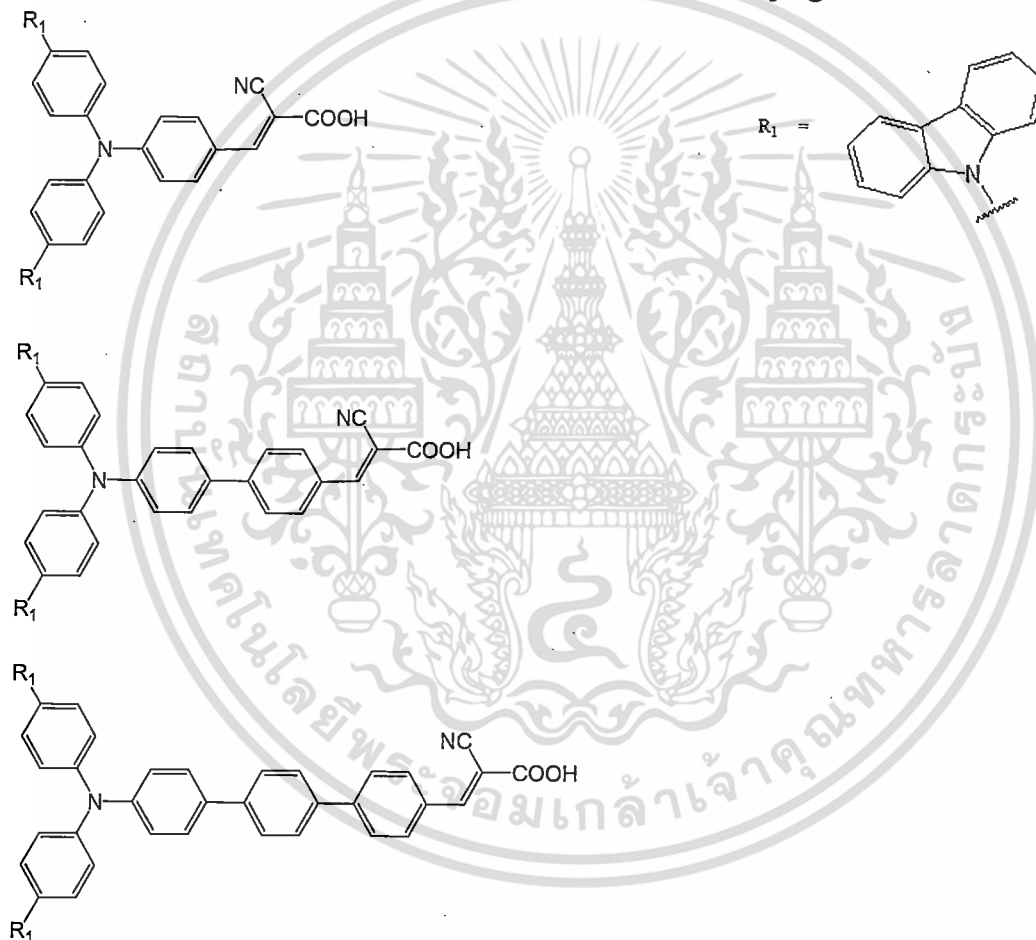
ภาพที่ 4.4 แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของสี้อมไวแสงในกลุ่มอนุพันธ์ของไตรฟีนิล

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็นแถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า ซึ่งจากกราฟ พบว่าเมื่อโมเลกุลที่มีอนิลินและคาบาร์โซลเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนจะทำให้ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่าน้อยที่สุด คือ 2.88 eV จึงเป็นเหตุผลอีกข้อหนึ่งที่ทำให้สามารถทำนายได้ว่าอนิลินและคาบาร์โซลเป็นหนึ่งในหมู่ให้อิเล็กตรอนที่เหมาะสมในการสังเคราะห์สีย้อมไวแสง

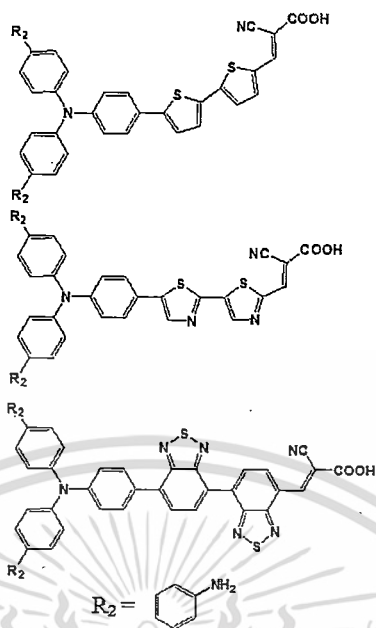
หลังจากการศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในหัวข้อที่ผ่านมาแล้ว จึงนำข้อมูลที่ได้จากการทดลองข้างต้นมาศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนระบบ π -conjugate โดยใช้หมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นอนิลินและคาบาร์โซล

4.1.2 ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนระบบ π -conjugate



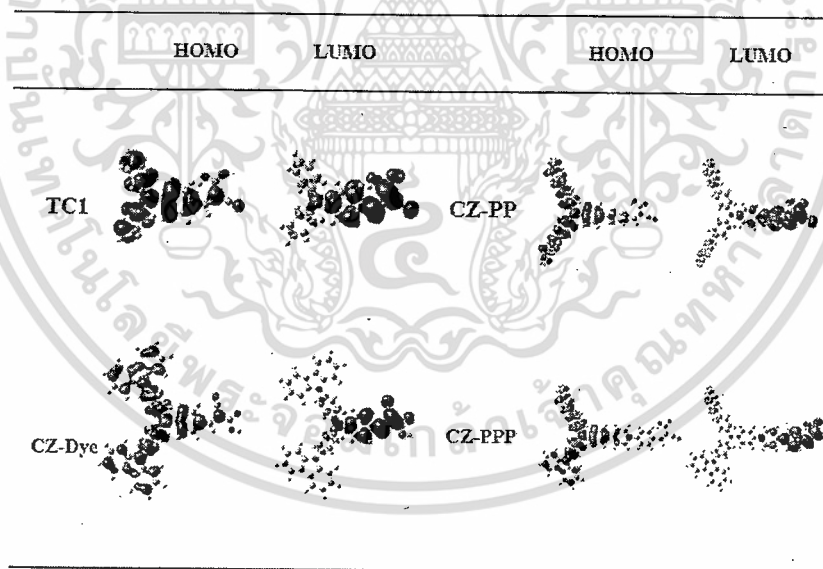
ภาพที่ 4.5 แสดงโครงสร้างของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนวงแหวนเบนซีน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



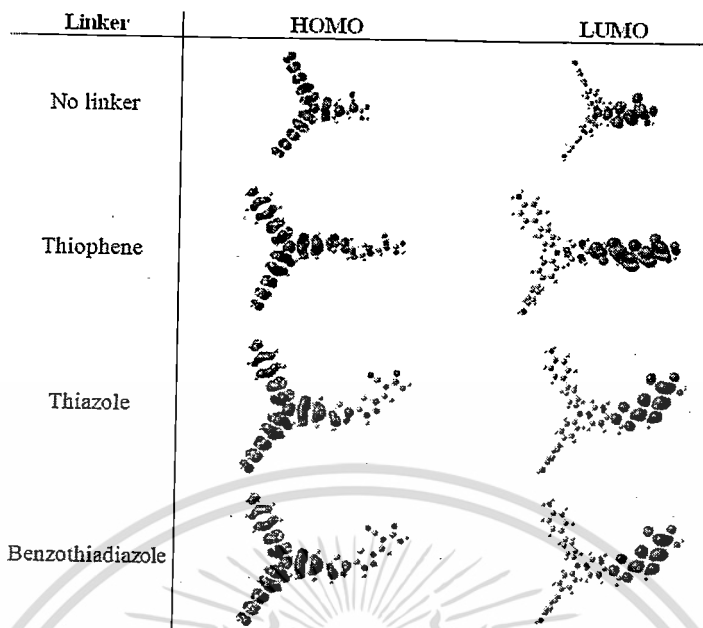
ภาพที่ 4.6 แสดงโครงสร้างของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์

4.1.2.1 โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)



ภาพที่ 4.7 แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนวงแหวนเบนซีน ที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า

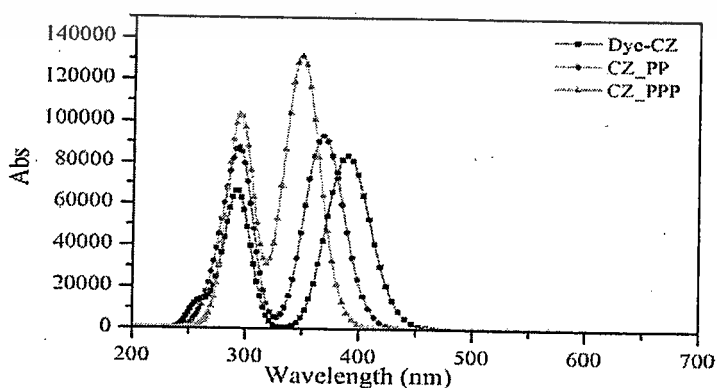
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาพที่ 4.8 แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสี้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์ที่แตกต่างกันที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า

ภาพที่ 4.7 และ 4.8 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสี้อมที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของ หมู่อิเล็กตรอนและหมู่อิเล็กตรอน และโมเลกุลของสี้อมไวแสงได้รับพลังงาน อิเล็กตรอนจะถูกกระตุ้นจากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ผ่านตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนไปยังหมู่อิเล็กตรอนการเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเช่นนี้ เป็นลักษณะสำคัญของสี้อมที่สามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ TiO_2 และยังเป็นปรากฏการณ์สำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสี้อมไวแสงอีกด้วยซึ่งผลที่ได้เป็นไปในแนวทางเดียวกันกับการศึกษาอิทธิพลของหมู่อิเล็กตรอน

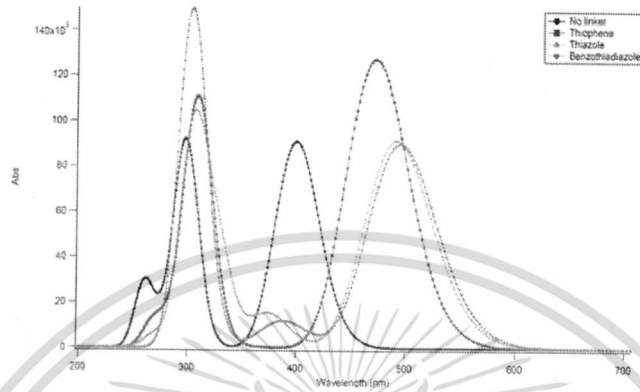
4.1.2.2 ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



ภาพที่ 4.9 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสี้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนวงแหวนเบนซีน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนลิขสิทธิ์สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น เมื่อผู้ใช้เห็นข้อบกพร่องในการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกหนึ่งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากภาพที่ 4.9 พบว่าเมื่อสีย้อมไวแสงมีตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์เป็นวงแหวนเบนซีน การเพิ่มขึ้นของจำนวนวงแหวนเบนซีน มีผลทำให้โมเลกุลของสีย้อมไวแสงมีช่วงการดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่นที่น้อยลงตามลำดับ จึงส่งผลให้ประสิทธิภาพของสีย้อมลดลงวงแหวนเบนซีนจึงไม่เหมาะสมในการใช้เป็น ตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ของสีย้อมไวแสง



ภาพที่ 4.10 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์ที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ที่แตกต่างกัน

จากภาพที่ 4.10 พบว่าเมื่อเพิ่มตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์เป็นหมู่ไทโอพีนซึ่งอยู่ระหว่างหมู่ไตรฟีนิลและหมู่อิเล็กทรอนิกส์ไวแสงมีช่วงการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นมากขึ้น อีกทั้งมีความเข้มในการดูดกลืนแสงสูงอีกด้วย แต่การเปลี่ยนตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์จากไทโอพีนเป็นไทเอโซ (Thiazole) และ เบนโซไทเอโซ (Benzothiadiazole) สีย้อมไวแสงจะมีช่วงการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นมากขึ้นเพียงเล็กน้อยเท่านั้น แต่อย่างไรก็ตามไทโอพีนมีความเข้มในการดูดกลืนแสงที่สูงกว่า จึงไม่สามารถสรุปได้อย่างแน่นอนว่าการใช้ ตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ชนิดใดจะส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงได้ดีกว่ากัน

4.1.2.3 ความหนาแน่นของสถานะ (Density of state)

ตารางที่ 4.2 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กทรอนิกส์แต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสง

Dyes	State	Donor	Triphenyl	Linker	Acceptor
TC1	LUMO	-	37	-	63
	HOMO	-	89	-	11
CZ- DYE	LUMO	0	39	-	60
	HOMO	56	40	-	4
CZ-PP	LUMO	0	8	32	60
	HOMO	49	49	2	1
CZ-PPP	LUMO	0	2	39	59
	HOMO	43	54	3	0

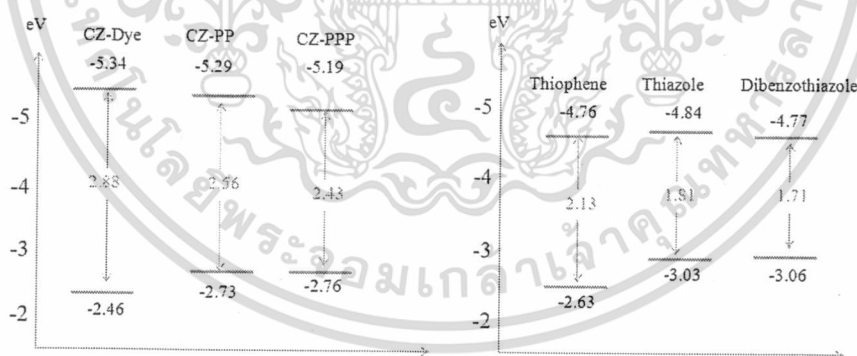
เอกสารนี้เป็นเอกสารทสวงวนวสสำหรับกรเชงนเพอกรศกษเทอนน เมอนุญตเทนเบเชษบระโชนต่านกรค้
ไม่วกรณใดจท่งส่น อีกรท่งห้มมให้ดตเปลงเนือหา และดอ้ออ้งอิงถึงเจ้าของเอกสารทกรครั้งที่มีกรน้ไปใช้

ตารางที่ 4.3 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในกลุ่มสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์ที่แตกต่างกัน

Functional group of aromatic donor	State	Donor	Triphenyl Linker	Acceptor
NH ₂	HOMO	23	65	11
(with thiophene linker)	LUMO	0	6	53
NH ₂	HOMO	27	65	8
(with thiazole linker)	LUMO	0	5	51
NH ₂	HOMO	68	26	6
(with benzothiadiazole linker)	LUMO	4	0	75

เมื่อเพิ่มไทโอฟีนในส่วนของ ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ในโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสง การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนยังคงมีแนวโน้มในการเคลื่อนที่จาก หมู่อิเล็กตรอนส่งผ่าน ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ไปยังส่วนของ หมู่อิเล็กตรอนเหมือนเดิม โดยสีย้อมไวแสงที่ดี ที่สภาวะ LUMO อิเล็กตรอนควรอยู่ในส่วนของ หมู่อิเล็กตรอนมากที่สุดซึ่งทั้งไทโอฟีนและไทเอโซ ให้ผลเช่นนั้น แต่ในส่วนของ เบนโซไทเอโซอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวกันอยู่ในส่วนของ ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน มากกว่า แทนที่จะอยู่ในส่วนของ หมู่อิเล็กตรอนจึงไม่ส่งผลดีต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

4.1.2.4 แถบพลังงานต้องห้าม



ภาพที่ 4.11 แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของสีย้อมไวแสงในกลุ่มของวงแหวนเบนซีนและสารประกอบเฮเทอโรไซคลิกของอะตอมซัลเฟอร์

จากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็นแถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า ซึ่งจากกราฟด้านซ้ายมือ พบว่าเมื่อสีย้อมมีความยาวของวงแหวนเบนซีนเพิ่มขึ้น จะทำให้ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่าน้อยลง แต่เนื่องด้วยค่าการดูดกลืนแสงที่มีช่วงความยาวคลื่นน้อยลงมาก จึงไม่สามารถสรุปได้ว่าสีย้อมที่มี ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน เป็นวงแหวนเบนซีนนั้น ทำให้เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า

ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

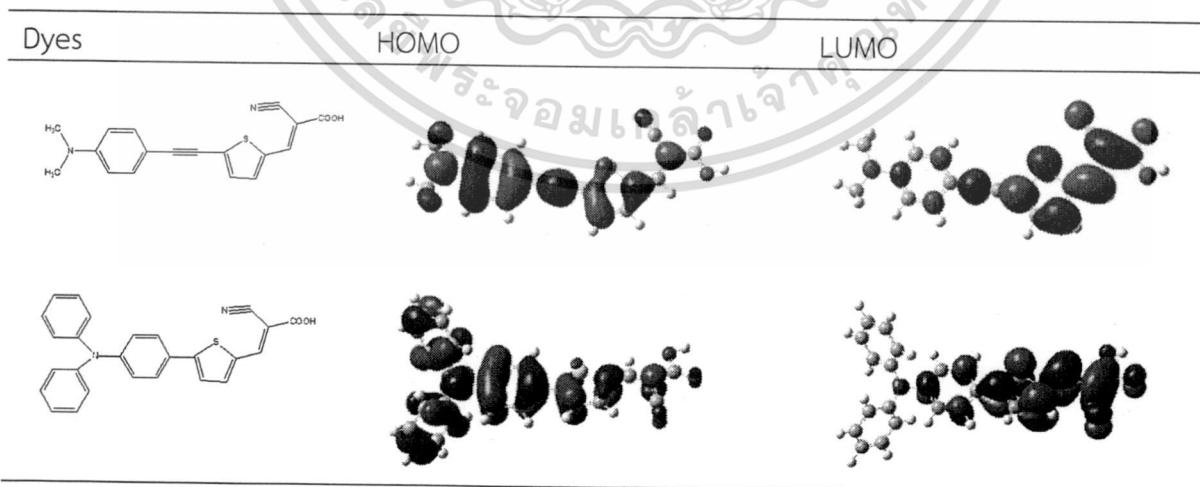
ประสิทธิภาพของสีย้อมเพิ่มขึ้นหรือไม่ ส่วนการใช้ไดเบนโซไทเอโซเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนนั้น ทำให้แถบพลังงานต้องห้ามลดลงจริง แต่ที่สภาวะเร้า อิเล็กตรอนส่วนใหญ่อยู่ในโมเลกุลของสีย้อมส่วนที่เป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน มากกว่า และเมื่อเปรียบเทียบการใช้ไทโอฟินเป็น ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน โมเลกุลของสีย้อมไวแสง ค่าความเข้มการดูดกลืนแสงมีค่าสูงมากกว่าจึงเป็นเหตุผลที่ทำให้ไม่สามารถทำนายได้ว่าตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ตัวใด ระหว่างไทโอฟินและไดเบนโซไทเอโซ เหมาะสมที่จะใช้ในสีย้อมไวแสงมากกว่ากัน ส่วนไทเอโซนั้น มีค่าช่วงการดูดกลืนแสงที่กว้างมากขึ้น การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนก็เป็นไปในทิศทางที่เหมาะสม อีกทั้งยังมีแถบพลังงานต้องห้ามที่ลดลงอีกด้วยไทเอโซจึงเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ที่ค่อนข้างเหมาะสมที่สุดในการทดลองนี้

4.1.3 ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มของไดฟีนิลอนีลินและไดเมทิลอนีลิน



ภาพที่ 4.12 แสดงโครงสร้างของสีย้อมไวแสงในกลุ่มของไดฟีนิลอนีลินและไดเมทิลอนีลินที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอน

4.1.3.1 โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

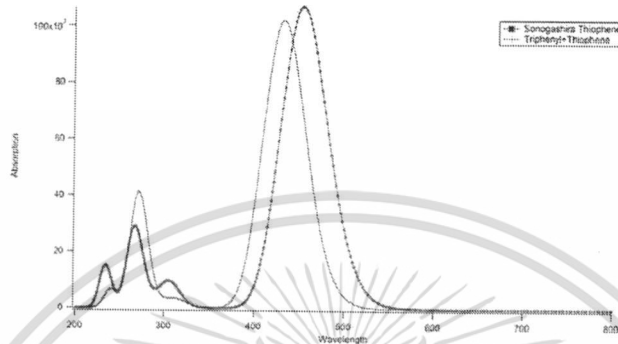


ภาพที่ 4.13 แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนีลินและไดเมทิลอนีลิน

ภาพที่ 4.12 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของ หมู่ให้อิเล็กตรอนนั้นได้พิจารณาว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

นิลोनินและไดเมทิลอนินตามลำดับ และเมื่อโมเลกุลได้รับพลังงาน อิเล็กตรอนจะถูกกระตุ้นจากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ไปยังหมู่รับอิเล็กตรอนซึ่งอยู่อีกด้านหนึ่งของโมเลกุลซึ่งทำหน้าที่ยึดติดกับฟิล์มบางของสารกึ่งตัวนำโลหะออกไซด์ (TiO_2)

4.1.3.2 ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



ภาพที่ 4.14 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มของไดฟีนิลอนินและไดเมทิลอนิน

จากภาพที่ 4.13 พบว่าเมื่อสีย้อมทั้งสองโมเลกุล มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ที่เหมือนกันคือไทโอฟินแต่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนต่างกันนั้น ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นไดเมทิลอนินมีช่วงการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากกว่าไดฟีนิลอนิน ทั้งนี้เนื่องมาจากพันธะ π -conjugate ที่ยาวกว่า นั่นเอง

4.1.3.3 ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

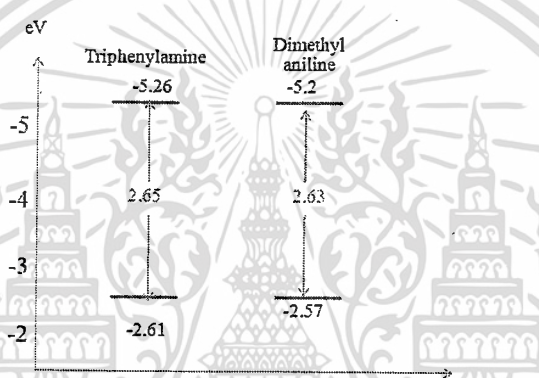
ตารางที่ 4.4 ตารางแสดงเปอร์เซ็นต์ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่ละส่วนของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนินและไดเมทิลอนิน

Molecule	State	Donor	Linker	Acceptor
	HOMO	58	32	10
	LUMO	9	46	46
	HOMO	81	12	7
	LUMO	14	37	50

จากผลการคำนวณการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้าพบว่า สีย้อมทั้งสองโครงสร้าง มีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปในแนวทางเดียวกัน นั่นก็คือมีการเคลื่อนที่การคำนวณไม่ต่างกันสักเท่าไหร่ อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากบริเวณส่วนที่เป็น หมูให้อิเล็กตรอนไปยังส่วนของหมูรับอิเล็กตรอนโดยพบว่าโครงสร้างของโมเลกุลสี ย้อมไวแสงที่มี หมูให้อิเล็กตรอนเป็นไดฟีนิลอนีนลินมีการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนมากกว่า ทั้งบริเวณ หมูให้อิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลงที่ 67% และหมูรับอิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลงที่ 43% ส่วนโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มี หมูให้อิเล็กตรอนเป็นไดเมทิลอนีนลิน มีการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่น อิเล็กตรอนน้อยกว่าคือที่บริเวณ หมูให้อิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลง 49% และบริเวณหมูรับอิเล็กตรอนมี การเปลี่ยนแปลง 36% ถึงแม้ว่าการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มีหมูให้อิเล็กตรอน เป็น ไดฟีนิลอนีนลินนั้นจะมีความเหมาะสมมากกว่า แต่อย่างไรก็ตามสีย้อมไวแสงโมเลกุลนี้ มีค่าการดูดกลืน แสงในช่วงที่น้อยกว่า ทำให้ไม่สามารถบอกประสิทธิภาพของสีย้อมทั้งสองโมเลกุลนี้ได้อย่างแน่นอน อน แต่ โมเลกุลสีย้อมไวแสงทั้งสอง สามารถใช้เป็นสีย้อมไวแสงในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงได้

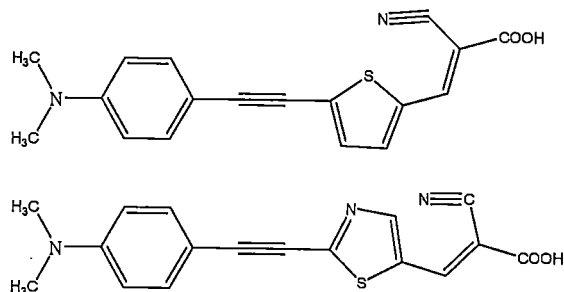
4.1.3.4 แถบพลังงานต้องห้าม



ภาพที่ 4.15 แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของโมเลกุลในกลุ่มของไดฟีนิลอนีนลินและไดเมทิลอนีนลิน

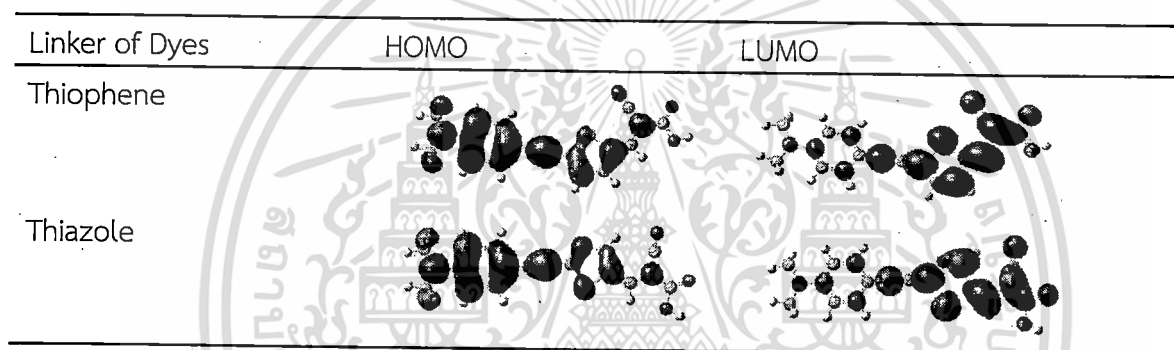
จากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็น แถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นขึ้นไปสู่สถานะเร้า ซึ่ง จากกราฟ พบว่าโครงสร้างของโมเลกุลสีย้อมไวแสงทั้งสองโมเลกุลมีค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้น อิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้า มีค่าไม่ต่างกันมากนัก โดยโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มี หมูให้อิเล็กตรอนเป็นได เมทิลอนีนลิน มีค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นน้อยกว่าจากค่าการดูดกลืนแสง การกระจายตัวของ อิเล็กตรอน และค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นของสีย้อมไวแสงทั้งสองชนิด สามารถทำนายได้คร่าวๆ ว่า โมเลกุลสีย้อมไวแสงที่มี หมูให้อิเล็กตรอนเป็นไดเมทิลอนีนลิน มีความเหมาะสมที่จะใช้เป็นสีย้อมไวแสงใน เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงมากกว่า เนื่องจากค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากกว่า และ ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นมีค่าน้อยกว่า อีกทั้งยังมีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในลักษณะที่เหมาะสมคือ จาก หมูให้อิเล็กตรอนไปยังบริเวณ หมูรับอิเล็กตรอนอีกด้วย

4.1.4 ศึกษาผลของตัวส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ในกลุ่มของไทโอพีนและไทเอโซที่มีผลต่อหมู่เอมีนที่เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน



ภาพที่ 4.16 แสดงโครงสร้างสีย้อมไวแสงที่ศึกษา

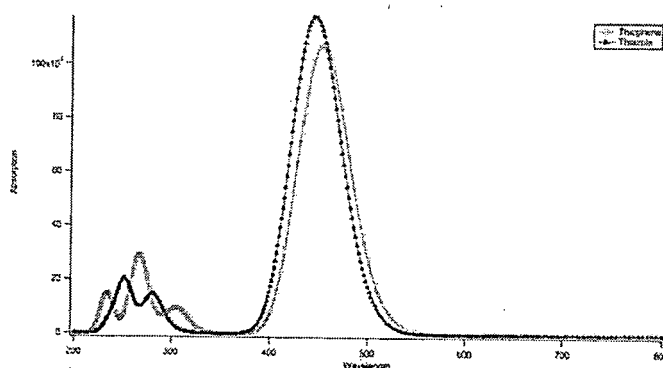
4.1.4.1 โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)



ภาพที่ 4.17 แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลสีย้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า

ภาพที่ 4.16 แสดงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลสีย้อมที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า โดยที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนและเมื่อโมเลกุลถูกกระตุ้นอิเล็กตรอนจะถูกกระตุ้นจากสภาวะพื้นไปสู่สภาวะเร้า โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ไปยังหมู่รับอิเล็กตรอน

4.1.4.2 ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



เอกสารนี้เป็นเอกสาร ภาพที่ 4.18 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของโมเลกุลสีย้อมไวแสงนำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กราฟแสดงค่าการดูดกลืนแสงได้มาจากการคำนวณค่าพลังงานที่สภาวะเฝ้าจากภาพที่ 4.18 พบว่าเมื่อใช้ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นไทโอฟีนจะได้ค่าการดูดกลืนแสงในช่วงที่ความยาวคลื่นมากกว่าการใช้ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นไทเอโซ ทำให้ทำนายได้ว่าไทโอฟีนให้ค่าประสิทธิภาพที่ดีกว่า

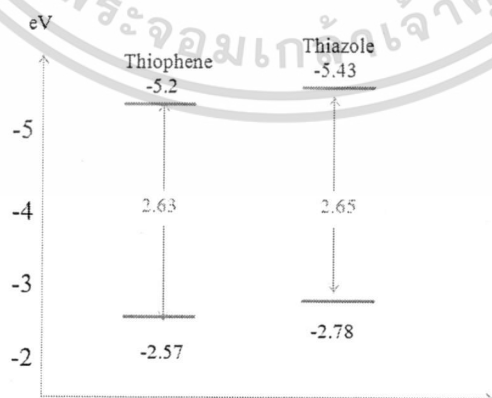
4.1.4.3 ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

ตารางที่ 4.5 แสดงค่าการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในส่วนต่างๆ ของโมเลกุลสี้อมไวแสงที่สภาวะพื้นและสภาวะเฝ้า

Linker of Dyes	State	Donor	Linker	Acceptor
Thiophene	HOMO	58	32	10
	LUMO	9	46	46
Thiazole	HOMO	66	26	7
	LUMO	16	38	46

จากค่าการกระจายตัวของอิเล็กตรอนที่สภาวะพื้นและสภาวะเฝ้า พบว่าอิเล็กตรอนของสี้อมไวแสงทั้งสองโมเลกุลมีแนวโน้มการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนจากบริเวณส่วนที่เป็น หมู่อิเล็กตรอนผ่าน ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนไปยังหมู่อิเล็กตรอนซึ่งเป็นลักษณะสำคัญซึ่งส่งผลต่อประสิทธิภาพของสี้อมไวแสงโดยการใช้ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน เป็นไทเอโซนั้นอิเล็กตรอนในส่วนของ หมู่อิเล็กตรอนมีแนวโน้มการเปลี่ยนแปลงอิเล็กตรอนมากกว่าไทโอฟีนส่วนการเปลี่ยนแปลงอิเล็กตรอนที่บริเวณส่วนของ หมู่อิเล็กตรอนไม่แตกต่างกันมากนัก สี้อมทั้งสองโมเลกุลนี้ จึงเหมาะสมที่จะใช้เป็นสี้อมไวแสงในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสี้อมไวแสง

4.1.4.4 แถบพลังงานต้องห้าม

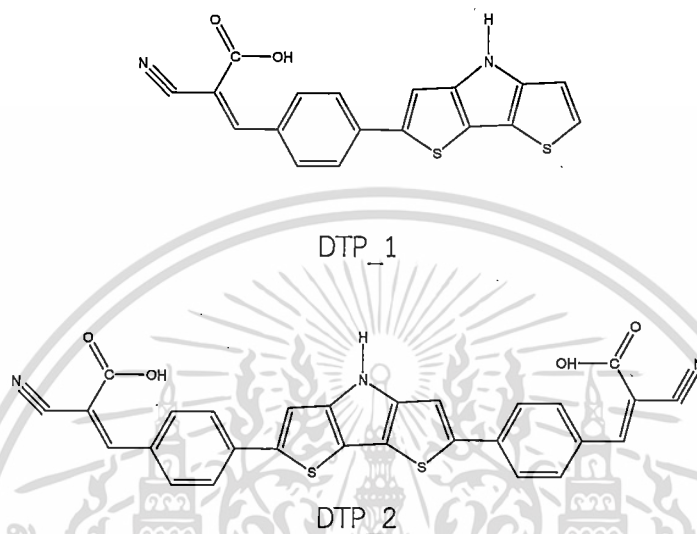


ภาพที่ 4.19 แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของสี้อมไวแสง

จากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงาน HOMO และ LUMO แสดงให้เห็นแถบพลังงานต้องห้าม ซึ่งเป็นค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากสภาวะพื้นขึ้นไปสู่สภาวะเฝ้า ซึ่งไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากกราฟพบว่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นของสีย้อมทั้งสองโมเลกุลที่มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ต่างกันมีค่าใกล้เคียงกัน โดย ไทโอฟีนมีค่าน้อยกว่าไทเอโซเพียงเล็กน้อยเท่านั้น สีย้อมทั้งสองโมเลกุลนี้จึงสามารถใช้เป็นสีย้อมไวแสงที่มีประสิทธิภาพที่ใกล้เคียงกันในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง

4.1.5 ศึกษาผลของจำนวน หมู่รับอิเล็กตรอนที่มีผลต่อหมู่ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole



ภาพที่ 4.20 แสดงโครงสร้างสีย้อมไวแสงในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole

4.1.5.1 โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ (The electron structure)

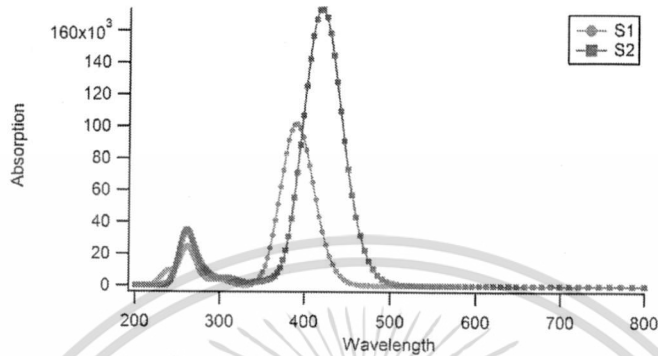
Molecule	HOMO	LUMO
DTP_1		
DTP_2		

ภาพที่ 4.21 แสดง Frontier Molecular orbital ของโมเลกุลในกลุ่มของ Dithieno [3,2-b;2',3' d] pyrole ที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า

จากภาพแสดงถึงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลของสารในสภาวะพื้น การกระจายตัวของอิเล็กตรอนจะอยู่ที่ส่วน หมู่ให้อิเล็กตรอนและเมื่อมีพลังงานมากระตุ้นการกระจายตัว เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นอนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ของอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากส่วนหมู่ให้อิเล็กตรอนไปส่วนของ หมู่รับอิเล็กตรอนซึ่งจะเห็นว่าการที่มีหมู่รับอิเล็กตรอนสองข้างที่สถานะกระตุ้นอิเล็กตรอนจะกระจายตัวไปที่ส่วนหมู่รับอิเล็กตรอนเพียงด้านเดียว

4.1.5.2 ค่าการดูดกลืนพลังงานแสง



ภาพที่ 4.22 แสดงค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสงในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole ที่ใช้ศึกษาอิทธิพลของจำนวนหมู่รับอิเล็กตรอน

ปริมาณของ π -conjugate จะส่งผลต่อการเคลื่อนที่ของกราฟการดูดกลืนแสงพบว่าจำนวนของหมู่ หมู่รับอิเล็กตรอนชนิดเดียวกันแต่มีปริมาณเพิ่มขึ้น ส่งผลต่อเคลื่อนที่ของกราฟไปทางด้านที่มีพลังงานที่มากขึ้น

4.1.5.3 ความหนาแน่นสถานะ (Density of state)

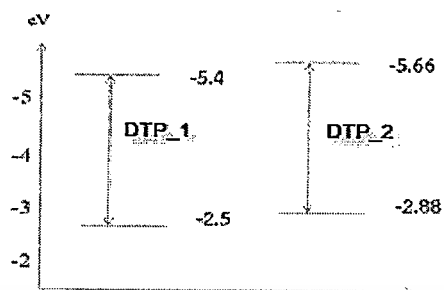
ตารางที่ 4.6 แสดงค่าการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในส่วนต่างๆ ของโมเลกุลสี่ในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole ที่สภาวะพื้นและสภาวะเร้า

Molecule	State	Acceptor	Linker1	Donor	Linker1	Acceptor
DTP_1	HOMO	5	14	82	-	-
	LUMO	58	29	13	-	-
DTP_2	HOMO	3	10	72	12	4
	LUMO	31	21	17	12	18

ค่าการกระจายตัวของอิเล็กตรอนจะพบว่าที่สภาวะพื้นอิเล็กตรอนจะกระจายตัวในส่วนของ หมู่ให้อิเล็กตรอนแต่เมื่อมีพลังงานมากกระตุ้น พบว่า การกระจายตัวของอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ไปหมู่รับอิเล็กตรอนซึ่งเมื่อจำนวน หมู่รับอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น จะส่งผลให้เกิดการแย่งชิงอิเล็กตรอนกันภายในโครงสร้าง จะเห็นได้จากค่าเปอร์เซ็นต์การกระจายตัวในตารางที่ 4.6

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.1.5.4 แถบพลังงานต้องห้าม



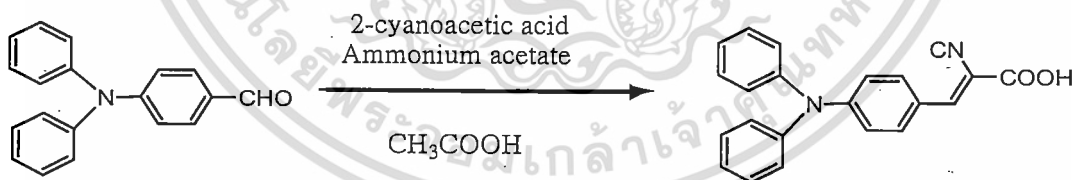
ภาพที่ 4.23 แสดงแถบพลังงานต้องห้ามของโมเลกุล ในกลุ่มของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrole

จากกราฟพบว่าเมื่อมีการเปลี่ยนแปลงจำนวนของหมู่รับอิเล็กตรอนพบว่า DTP_1 จะมีค่าพลังงานในการกระตุ้นของอิเล็กตรอนมีค่า 2.9 eV และ DTP_2 มีค่าพลังงานในการกระตุ้นของอิเล็กตรอนมีค่า 2.78 eV

4.2 การสังเคราะห์

จากการทำนายสมบัติของโมเลกุลสารโดยวิธีเคมีคอมพิวเตอร์จะเห็นได้ว่าการเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอนแก่ไดฟีนีลนิตรีนจะเพิ่มการกระจายของอิเล็กตรอนมาสู่หมู่รับอิเล็กตรอนมากขึ้น เพื่อเพิ่มการจับเกาะกับ TiO_2 ให้ดียิ่งขึ้น จึงนำไปสู่ขั้นตอนการสังเคราะห์

4.2.1 การปรับปรุงประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงโดยการเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอนในสีย้อมไวแสงในกลุ่ม triarylamine dyes

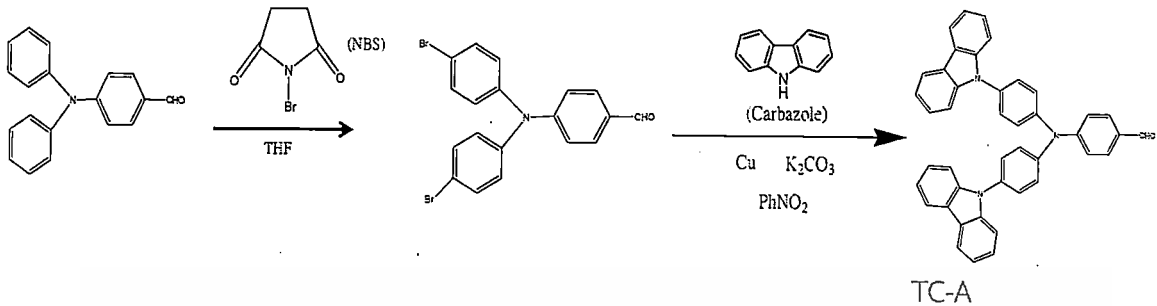


ภาพที่ 4.24 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC1

ในการสังเคราะห์นี้เริ่มต้นจากการสังเคราะห์สีย้อมไวแสงตัวพื้นฐาน TC1 ซึ่งยังไม่ผ่านการปรับปรุงโครงสร้างใดๆ เพื่อใช้เป็นตัวเปรียบเทียบพื้นฐานของสีย้อมไวแสง ปฏิกริยาเป็นการเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันเพียงขั้นตอนเดียวเท่านั้น โดยปฏิกริยาเริ่มต้นจาก 4-diphenylamino benzaldehyde ทำปฏิกริยากับ cyanoacetic acid (CNCH_2COOH) และแอมโมเนียมอะซิเตต ($\text{CH}_3\text{COONH}_4$) โดยใช้กรดอะซิติกเป็นตัวทำละลาย โดยผลิตภัณฑ์ที่ได้มีลักษณะเป็นผงสีส้มเข้ม

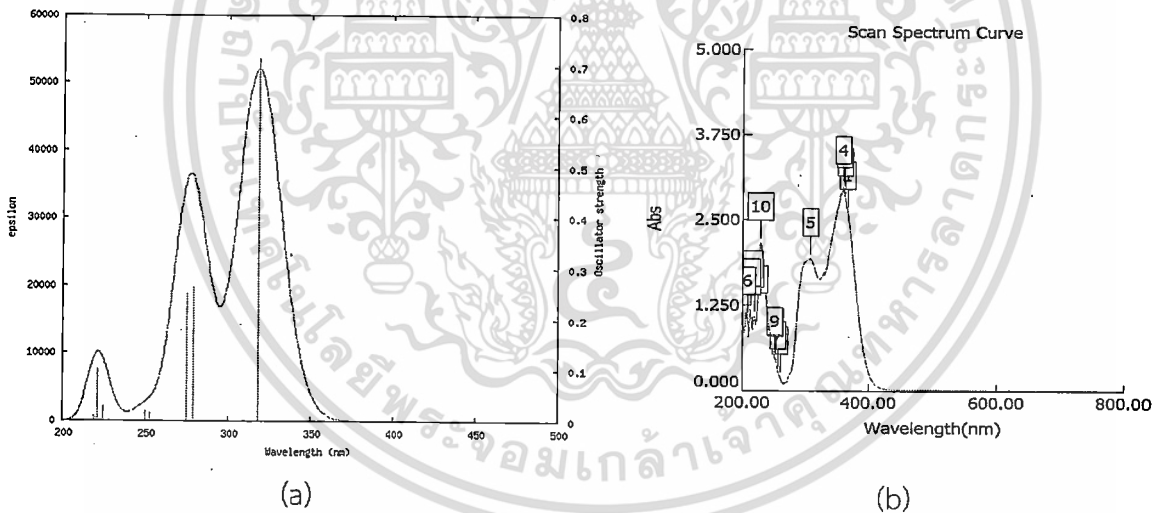
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.2.2 การสังเคราะห์สีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอน (Electron donor) เป็นหมู่ฟีนอล (Phenol) และคาร์บาโซล (Carbazole)



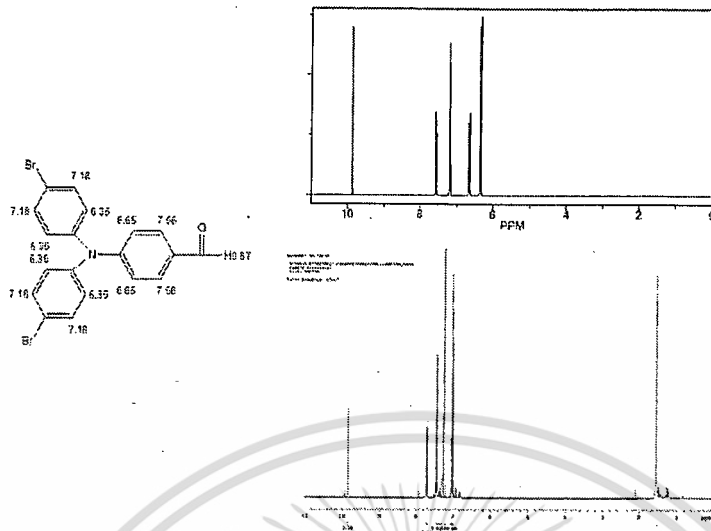
ภาพที่ 4.25 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC-A

การสังเคราะห์เริ่มจากการทำปฏิกิริยา bromination ที่บริเวณตำแหน่งพารา (para-) ของหมู่ triphenylamine โดยเริ่มต้นจาก 4-diphenylamino benzaldehyde 1 mol ทำปฏิกิริยากับ NBS 2 mol เพื่อให้ Br เข้าทำปฏิกิริยา 2 ตำแหน่ง โดยใช้ตัวทำละลายเป็น THF ภายใต้สภาวะไนโตรเจน ที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 4 ชั่วโมง จากนั้นตรวจสอบโครงสร้าง TC-A ที่ได้โดยการวัดค่าการดูดกลืนแสง และเทคนิค NMR พบว่าค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการคำนวณและที่ได้จากการทดลองมีผลที่สอดคล้องกัน



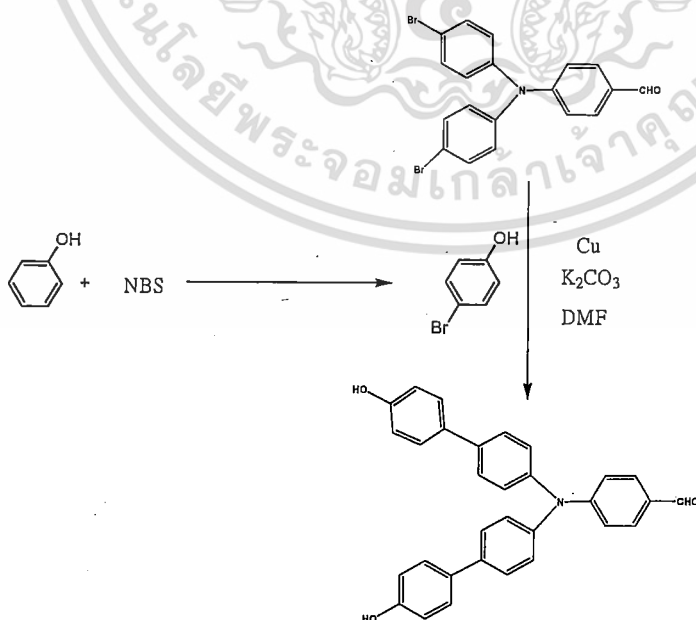
ภาพที่ 4.26 เปรียบเทียบค่าการดูดกลืนแสงระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณ (a) และค่าที่วัดได้จากการทดลอง (b)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาพที่ 4.27 ตัวอย่างผลการวิเคราะห์โครงสร้างสารตั้งต้นก่อนเกิด TC-A โดยใช้เทคนิค NMR

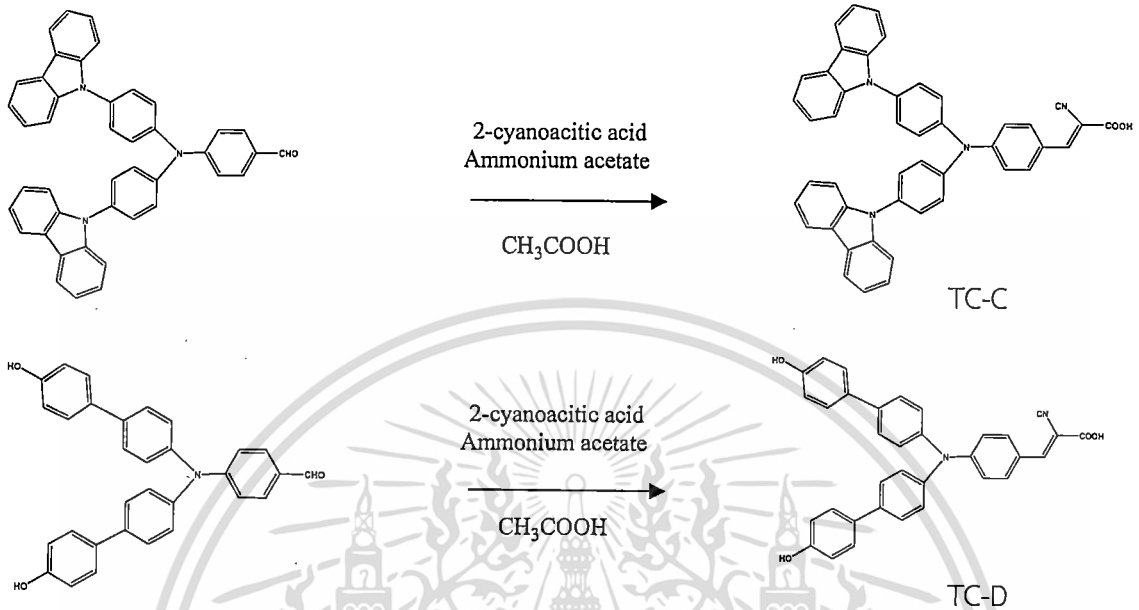
หลังจากการวิเคราะห์โครงสร้างที่มีหมู่โบรมีนเกาะที่ตำแหน่งพาราทั้งสองตำแหน่งแล้ว จากนั้นนำสารที่ได้มาทำปฏิกิริยากับ คาบาร์โซล โดยใช้ Ullmann reaction มีตัวเร่งปฏิกิริยาเป็น Copper ในสารละลาย K_2CO_3 โดยใช้ไนโตรเบนซีนเป็นตัวทำละลาย ทำปฏิกิริยา Reflux 24 ชั่วโมง นำผลิตภัณฑ์ที่ได้มาแยกสารโดย Column Chromatography ซึ่งถ้า หมู่ให้อิเล็กตรอนเป็น Phenol จะต้องต่อ Br เข้าที่โครงสร้างโดยทำปฏิกิริยากับ NBS ก่อนเป็นเวลา 4 ชั่วโมงก่อน ดังนี้



ภาพที่ 4.28 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC-B

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนลิขสิทธิ์ซึ่งมีลิขสิทธิ์โดยเจ้าของเอกสารผู้นี้ อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

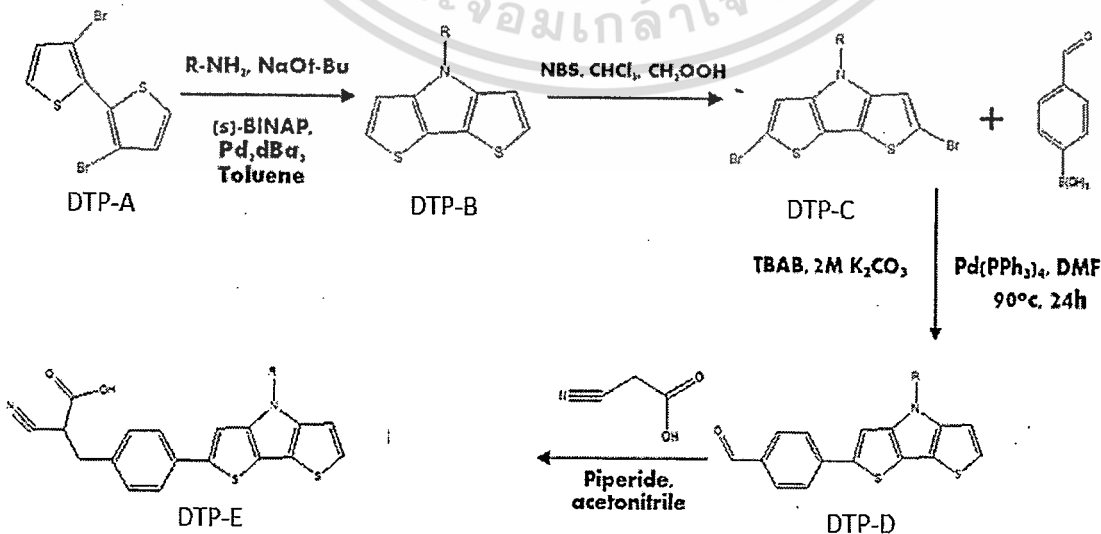
จากนั้นทำปฏิกิริยาเพื่อเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันโดยใช้ cyanoacetic acid และ Ammonium acetate โดยมีกรดอะซิติกเป็นตัวทำละลายทำปฏิกิริยาที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 4 ชั่วโมง ภายใต้สภาวะไนโตรเจนก็จะได้สีย้อมไวแสงที่ต้องการ



ภาพที่ 4.29 ขั้นตอนการสังเคราะห์สาร TC-C และ TC-D

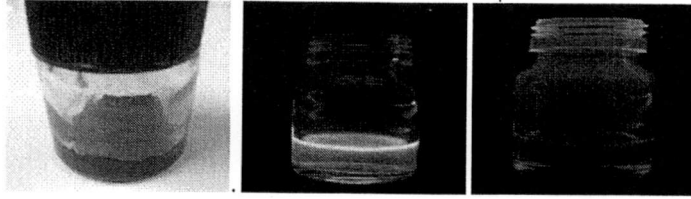
4.2.3 การปรับปรุงประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มอนุพันธ์ของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrrole

จากการศึกษาการทำนายสมบัติโมเลกุลสารโดยใช้เคมีคอมพิวเตอร์ข้างต้นในหัวข้อ 4.1.5 จะเห็นได้ว่าการเพิ่มจำนวนของหมู่รับอิเล็กตรอนไม่ได้เพิ่มความสามารถในการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนจากหมู่ให้อิเล็กตรอนมายังหมู่รับอิเล็กตรอน ดังนั้นส่วนนี้จึงต้องการสังเคราะห์ในส่วนของ DTP_1 เท่านั้น

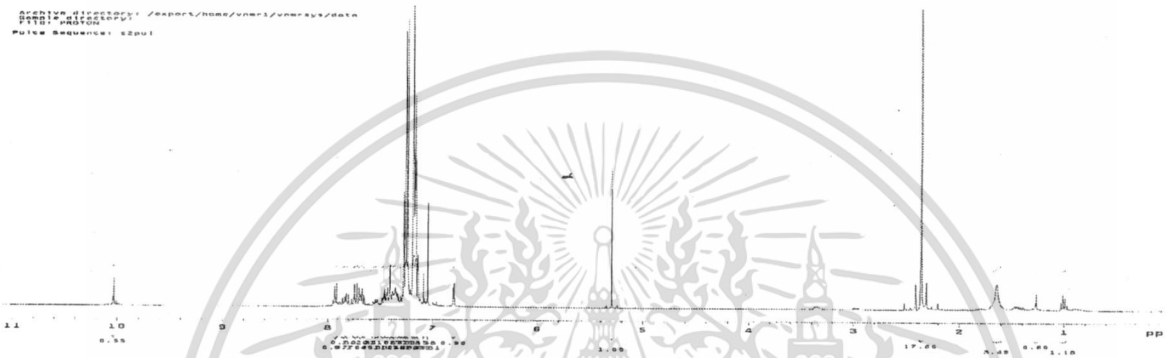


เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาพที่ 4.30 ขั้นตอนการสังเคราะห์โครงสร้างอนุพันธ์ของ DTP (A-D)



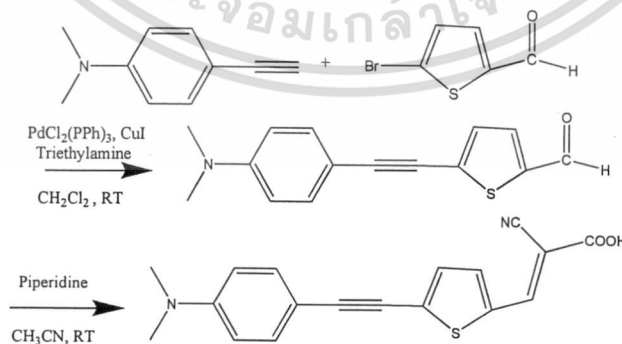
ภาพที่ 4.31 ตัวอย่างสาร DTP_C



ภาพที่ 4.32 ตัวอย่างผลการวิเคราะห์โครงสร้าง DTP_C ด้วยเทคนิค NMR

4.2.4 การสังเคราะห์โมเลกุลของสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มอนุพันธ์ของ 4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline

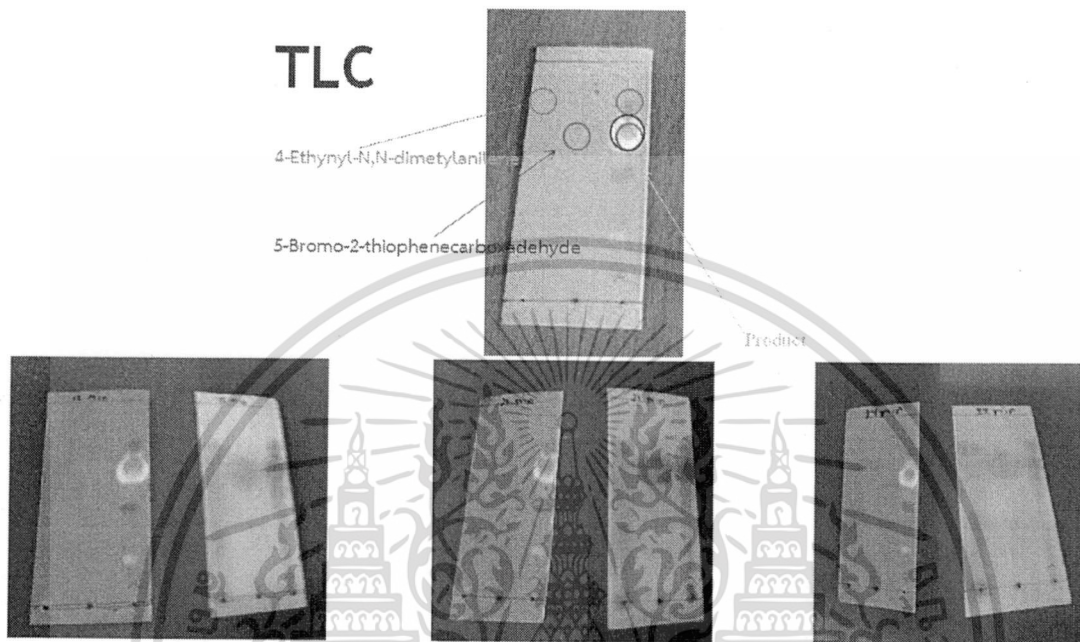
จากการศึกษาการทำนายสมบัติโมเลกุลสารโดยใช้เคมีคอมพิวเตอร์โดยศึกษาผลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนในหัวข้อ 4.1.3 และ 4.1.4 จะเห็นว่าทุกโมเลกุลมีสมบัติเป็นสีย้อมไวแสงได้ ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงเลือก 5-(4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline)-2-thiophenecarboxaldehyde มาเป็นตัวอย่างศึกษา



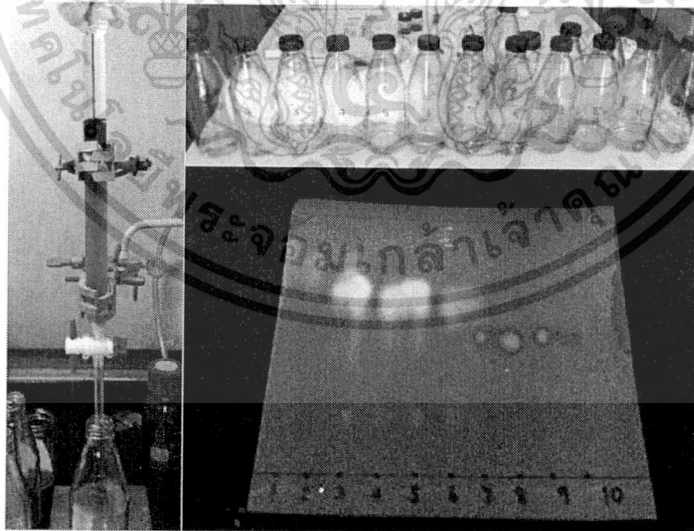
ภาพที่ 4.33 การสังเคราะห์กลุ่มอนุพันธ์ของ 4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline

4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline ทำปฏิกิริยากับ 5-bromo-2-thiophenecarboxaldehyde โดยใช้ปฏิกิริยา Sonogashira coupling มี Bis(triphenylphosphine)palladium ไม่ว่าการณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

dichloride และ Copper iodide เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาทำปฏิกิริยาภายใต้สภาวะเบสโดยใช้ Triethylamine และมี Dichloromethane เป็นตัวทำละลาย การสังเคราะห์จะทำภายใต้สภาวะสูญญากาศ ตั้งปฏิกิริยาโดยใช้ไมโครเวฟ กำลังไฟ 170 วัตต์ เป็นเวลา 27 นาที ติดตามปฏิกิริยาที่ดำเนินไปจาก Thin Layer Chromatography

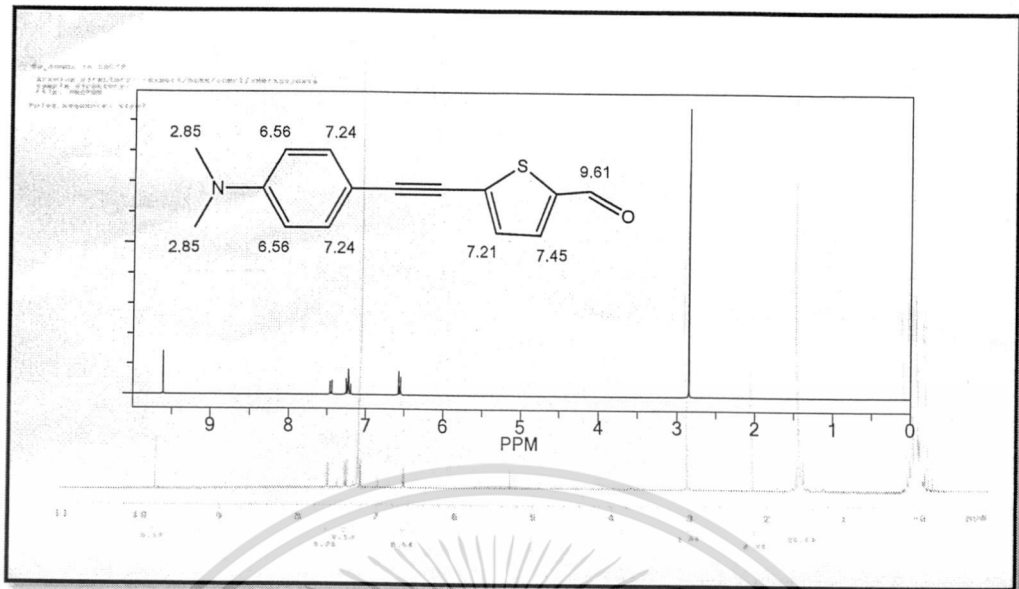


ภาพที่4.34 การติดตามการเกิดปฏิกิริยาโดยใช้ Thin Layer Chromatography



ภาพที่4.35 แสดง column chromatography ที่ใช้ในการแยกสารที่ต้องการ และ TLC ที่ใช้ตรวจสอบ

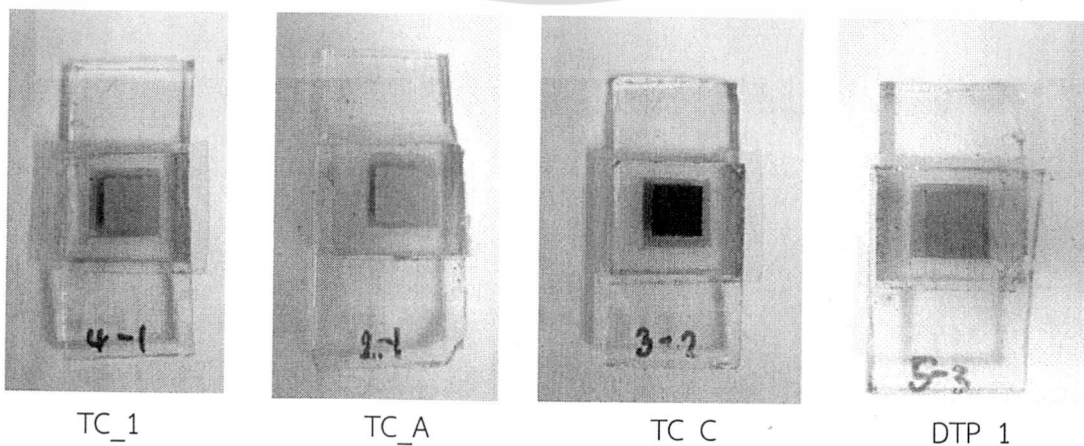
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



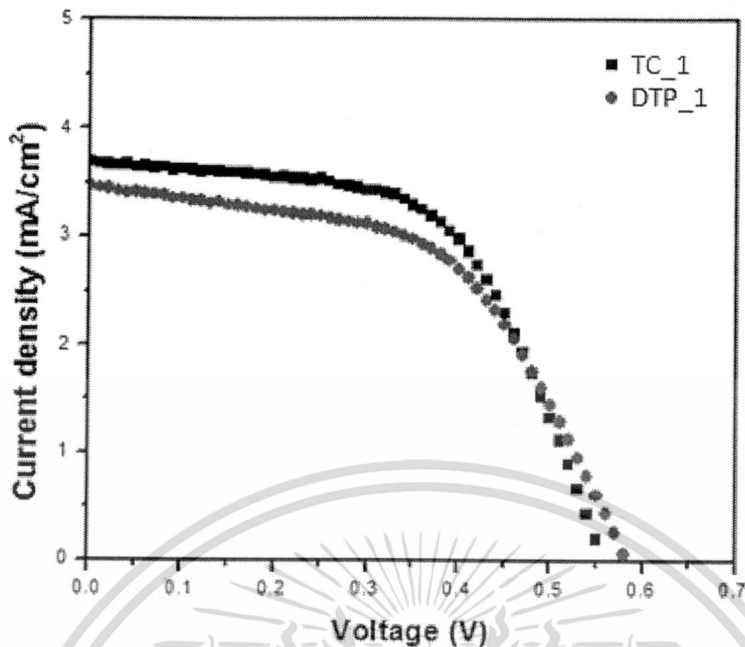
ภาพที่ 4.36 ตัวอย่างผลการวิเคราะห์ที่โครงสร้าง 5-(4-Ethynyl-N,N-dimethylaniline)-2-thiophenecarboxaldehyde ที่สังเคราะห์ขึ้นโดยใช้เทคนิค NMR ตรวจสอบโครงสร้าง

4.3 การสร้างเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง และการวัดประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์

การสร้างเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง จะเตรียมขั้วไฟฟ้าทำงานจากการเตรียมฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์ด้วยวิธีการพิมพ์แบบสกรีนจำนวน 5 ชั้นและนำไปเผาที่อุณหภูมิสูง จากนั้นทิ้งไว้ให้เย็นที่อุณหภูมิห้อง แล้วจึงแช่ฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์ที่ไดลงในสีย้อมเป็นเวลา 24 ชั่วโมง ซึ่งฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์จะทำซ้ำทั้งหมด 3 เซลล์จากนั้นนำขึ้นมาประกอบกับขั้วแพททินัมซึ่งเป็นขั้วไฟฟ้าแคโทดแล้วทำการเติมสารละลายอิเล็กโทรไลต์ระหว่างขั้วไฟฟ้า จะได้เป็นเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง เซลล์แสงอาทิตย์จากสีย้อมสามารถวัดค่าประสิทธิภาพโดยเครื่องโซลาร์ซิมูเลเตอร์ (Solarsimulator Instrument) ของบริษัท SOLAR LIGHT ประเทศสหรัฐอเมริกาที่แหล่งกำเนิดแสงมาตรฐาน A.M. 1.5 ที่ความเข้มแสง 100 มิลลิวัตต์ต่อตารางเซนติเมตร ณ อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส วัดค่ากระแสและแรงดันไฟฟ้าด้วย Keithley 2400 electrometer



เอกสารนี้เป็นเอกสารภาพที่ 4.37 ลักษณะสีย้อมที่สังเคราะห์ขึ้นบนฟิล์มไททาเนียมไดออกไซด์ ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาพที่ 4.38 กราฟกระแสและแรงดันไฟฟ้าของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงจากสีย้อมของ TC1 และ DTP_1

เมื่อทดสอบสร้างเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์และนำไปวัดหาค่าความหนาแน่นกระแสต่อพื้นที่ของสารสังเคราะห์ทั้ง 4 ตัวพบว่า TC_A และ TC_C ไม่ให้ค่ากระแสเกิดขึ้น อาจเนื่องมาจากช่วงพลังงานการกระตุ้นของโมเลกุลไม่สอดคล้องกับ TiO_2 ดังนั้นจึงรายงานผลเฉพาะสาร TC_1 และ DTP_1 เท่านั้น จากตารางที่ 4.7 แสดงค่ากระแสไฟฟ้าลัดวงจร (J_{sc}) แรงดันวงจรเปิด (V_{oc}) ฟิลด์แฟกเตอร์ (FF) และค่าประสิทธิภาพ (η) ของเซลล์แสงอาทิตย์ โดยเซลล์แสงอาทิตย์ TC_1 มีค่า J_{sc} 3.69 มิลลิแอมแปร์ต่อพื้นที่ซึ่งมีค่าสูงกว่า DTP_1, ค่า V_{oc} 0.56 โวลต์, ค่า FF คือ 0.58 และค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์เท่ากับ 1.20% DTP_1 มีค่า J_{sc} 3.47 มิลลิแอมแปร์ต่อพื้นที่, ค่า V_{oc} 0.58 โวลต์, ค่า FF เท่ากับ 0.54 และค่าประสิทธิภาพเท่ากับ 1.10% จะเห็นได้ว่าค่าประสิทธิภาพของสารทั้งสองมีค่าไม่แตกต่างกันมากนัก แต่อย่างไรก็ตามสาร DTP_1 สามารถถูกปรับปรุงโครงสร้างเพิ่มเติมได้ เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของเซลล์พลังงานแสงอาทิตย์ เช่น การเพิ่มหมู่ให้อิเล็กตรอนที่เป็นหมู่คาร์บาโซล หรือ การเพิ่มตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเช่นไทโอเฟน เพื่อเพิ่มระบบ π -conjugate ในโครงสร้าง

ตารางที่ 4.7 การวัดค่าพารามิเตอร์ต่างๆและประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงโดยใช้สีย้อมจาก TC1 และ DTP_1 (ค่าเฉลี่ยจากเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง 3 เซลล์)

Dyes	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	Fill Factor	Efficiency (%)
TC1	3.69 ± 0.03	0.56 ± 0.00	0.58 ± 0.04	1.20 ± 0.08
DTP_1	3.47 ± 0.08	0.58 ± 0.01	0.54 ± 0.02	1.10 ± 0.04

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 5

สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

จากการศึกษาอิทธิพลของหมู่ฟังก์ชันที่ส่งผลต่อการกระจายอิเล็กตรอนของหมู่ในกลุ่มอนุพันธ์ของ ไตรฟีนิล (Donor) โดยมีการเปรียบเทียบหมู่ฟังก์ชันเป็น โทลูอิน อนิลีน ฟีนอล คาบาร์โซลและเมทอกซีเบนซีน พบว่าการกระทำของอิเล็กตรอนในส่วนของ donor ไป acceptor เป็นในลักษณะที่คล้ายกัน แต่การเพิ่มหมู่โรมาติกที่มีหมู่ฟังก์ชันทำให้ช่วงการดูดกลืนพลังงานจะมีช่วงกว้างขึ้นโดยพบว่าอนิลีนจะมีค่าการดูดกลืนแสงช่วงที่กว้างที่สุดจึงใช้พลังงานในการกระตุ้นน้อยที่สุดในการกระตุ้นอิเล็กตรอนในสีย้อมไวแสงและความหนาแน่นที่สถานะที่สถานะกระตุ้นของอนิลีนและคาบาร์โซลเท่ากับ 53% และ 56% มากตามลำดับ รวมกับค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่าน้อยที่สุด คือ 2.88 eV เท่ากัน ส่งผลให้อนิลีนและคาบาร์โซลเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่เหมาะสมที่สุด

การศึกษาอิทธิพลของตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนระบบ π -conjugate ที่มีผลต่อค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมไวแสง เป็นส่วนที่สำคัญของสีย้อมที่จะสามารถส่งอิเล็กตรอนไปยังแถบการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ โลหะออกไซด์ TiO_2 ซึ่งส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงอีกด้วยเมื่อสีย้อมไวแสงมีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นวงแหวนเบนซีนทำให้ช่วงการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่น้อยลงแต่เมื่อความยาวของวงแหวนเบนซีนเพิ่มขึ้น จะทำให้ค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนขึ้นไปสู่สถานะเร้ามีค่าน้อยลง และเมื่อเปลี่ยนเป็น ไทโอฟิน ไทเอโซและ เบนโซไทเอโซ พบว่า ไทเอโซมีค่าช่วงการดูดกลืนแสงที่กว้างมากขึ้น การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนไปส่วนของหมู่รับอิเล็กตรอนที่ดี อีกทั้งยังมีแถบพลังงานต้องห้ามที่ลดลงอีกด้วยไทเอโซจึงเป็นตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ค่อนข้างเหมาะสมที่สุด

เมื่อเปรียบเทียบสีย้อมสองโมเลกุลที่มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ที่เหมือนกันคือไทโอฟินแต่ในส่วนของหมู่ให้อิเล็กตรอนต่างกันนั้น ค่าการดูดกลืนแสงของสีย้อมที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนเป็นโดเมทิลอนิลีน นั้นมีช่วงการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากกว่าไดฟีนิลอนิลีน ทั้งนี้เนื่องมาจากพันธะ π -conjugate ที่ยาวกว่า แต่อย่างไรก็ตามสีย้อมที่มีตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนเป็นไดฟีนิลอนิลีนมีการส่งผ่านอิเล็กตรอนไปยังหมู่รับอิเล็กตรอนที่ดีกว่า ส่วนค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้น ไม่แตกต่างกันอย่างชัดเจน ทำให้ไม่สามารถตัดสินค่าประสิทธิภาพของสีย้อมได้อย่างแน่นอน

จากการศึกษาผลของจำนวน หมู่รับอิเล็กตรอนโดยศึกษาการมีหมู่รับอิเล็กตรอนหนึ่งหมู่และ สองหมู่ พบว่าการมีหมู่รับอิเล็กตรอนสองหมู่ทำให้สีย้อมมีค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มากกว่าเนื่องจากปริมาณที่เพิ่มขึ้นของ π -conjugate โดยสถานะกระตุ้นอิเล็กตรอนจะกระจายตัวไปที่ส่วน หมู่รับอิเล็กตรอนเพียงด้านเดียวส่วนค่าพลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นของสีย้อมที่มีหมู่รับอิเล็กตรอน 2 หมู่ จะมีค่าน้อยกว่า

การสังเคราะห์สีย้อมไวแสง จะเลือกสังเคราะห์จากโครงสร้างที่มีความเป็นไปได้ที่จะใช้เป็นสีย้อมในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง โดยสังเคราะห์ผ่านปฏิกิริยา Suzuki reaction, Ullmann reaction และ Sonogashira coupling reaction โดยการสังเคราะห์เริ่มจากปฏิกิริยา bromination เพื่อทำปฏิกิริยารวมตัวกับส่วนที่เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน จากนั้นทำปฏิกิริยารวมตัวกับส่วนที่เป็น หมู่ให้อิเล็กตรอน ส่วนปฏิกิริยาการสังเคราะห์ ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน ปฏิกิริยาจะเริ่มจากการนำหมู่ให้อิเล็กตรอนทำปฏิกิริยารวมตัวกับ ตัวส่งผ่านอิเล็กตรอน และหลังจากได้โครงสร้างที่ต้องการจากการตรวจสอบด้วยเทคนิค NMR แล้ว ขั้นสุดท้ายทำการเปลี่ยนหมู่ฟังก์ชันจากแอลดีไฮด์เป็นไฮยาโนคริลิกเอซิด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาค้นคว้าเท่านั้น เมื่อนำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า

ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การปรับปรุงประสิทธิภาพของสีย้อมไวแสงที่มีหมู่ให้อิเล็กตรอนในกลุ่มอนุพันธ์ของ Dithieno[3,2-b;2',3'-d]pyrrole จากผลการศึกษาของหมู่รับอิเล็กตรอน ที่มี DTP เป็นหมู่ให้อิเล็กตรอน เมื่อเทียบกับ ไตโทโอฟินจะเป็นหมู่ให้อิเล็กตรอนที่ดีกว่าเป็นผลมาจากอิเล็กตรอนอิสระที่เพิ่มขึ้นจากอะตอมไนโตรเจน N และมีวงโรมาติกเป็นส่วนเชื่อมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน ซึ่งจากผลการศึกษาตัวส่งผ่านอิเล็กตรอนระบบ π -conjugate ปริมาณวงเบนซีนที่เพิ่มขึ้นทำให้ช่วงการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่น้อยลงและผลของจำนวนหมู่รับอิเล็กตรอนจะส่งผลให้เกิดการแย่งชิงอิเล็กตรอนมีผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสง ดังนั้นจึงได้มีการปรับปรุงโครงสร้างของสารที่สังเคราะห์เป็น DTP_1 ให้มีปริมาณวงเบนซีนและหมู่รับอิเล็กตรอนลดลง เพื่อให้ประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดสีย้อมไวแสงดีขึ้น ซึ่งสามารถยืนยันได้จากค่าประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์ที่ได้ 1.10%



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เอกสารอ้างอิง

1. Beaujuge, P. M. & Reynolds, J. R. (2010). Color Control in π -Conjugated Organic Polymers for Use in Electrochromic Devices. *Chemical Reviews* 110(1): 268-320.
2. Chang, Y. J. & Chow, T. J. (2009a). Dye-sensitized solar cell utilizing organic dyads containing triarylene conjugates. *Tetrahedron* 65(24): 4726-4734.
3. Chang, Y. J. & Chow, T. J. (2009b). Triaryl linked donor acceptor dyads for high-performance dye-sensitized solar cells. *Tetrahedron* 65(46): 9626-9632.
4. Chaurasia, S., Chen, Y.-C., Chou, H.-H., Wen, Y.-S. & Lin, J. T. (2012). Coplanar indenofluorene-based organic dyes for dye-sensitized solar cells. *Tetrahedron* 68(38): 7755-7762.
5. Cheng, X., Liang, M., Sun, S., Shi, Y., Ma, Z., Sun, Z. & Xue, S. (2012). Synthesis and photovoltaic properties of organic sensitizers containing electron-deficient and electron-rich fused thiophene for dye-sensitized solar cells. *Tetrahedron* 68(27-28): 5375-5385.
6. Chou, H.-H., Hsu, C.-Y., Hsu, Y.-C., Lin, Y.-S., Lin, J. T. & Tsai, C. (2012). Dipolar organic pyridyl dyes for dye-sensitized solar cell applications. *Tetrahedron* 68(2): 767-773.
7. Funabiki, K., Mase, H., Saito, Y., Otsuka, A., Hibino, A., Tanaka, N., Miura, H., Himori, Y., Yoshida, T., Kubota, Y. & Matsui, M. (2012). Design of NIR-Absorbing Simple Asymmetric Squaraine Dyes Carrying Indoline Moieties for Use in Dye-Sensitized Solar Cells with Pt-Free Electrodes. *Organic Letters* 14(5): 1246-1249.
8. Günes, S., Neugebauer, H. & Sariciftci, N. S. (2007). Conjugated Polymer-Based Organic Solar Cells. *Chemical Reviews* 107(4): 1324-1338.
9. Hagberg, D. P., Edvinsson, T., Marinado, T., Boschloo, G., Hagfeldt, A. & Sun, L. (2006). A novel organic chromophore for dye-sensitized nanostructured solar cells. *Chemical Communications* (21): 2245-2247.
10. Hagfeldt, A., Boschloo, G., Sun, L., Kloo, L. & Pettersson, H. (2010). Dye-Sensitized Solar Cells. *Chemical Reviews* 110(11): 6595-6663.
11. Hara, K., Kurashige, M., Dan-oh, Y., Kasada, C., Shinpo, A., Suga, S., Sayama, K. & Arakawa, H. (2003). Design of new coumarin dyes having thiophene moieties for highly efficient organic-dye-sensitized solar cells. *New Journal of Chemistry* 27(5): 783-785.
12. Hong, Y., Liao, J.-Y., Fu, J., Kuang, D.-B., Meier, H., Su, C.-Y. & Cao, D. (2012). Performance of dye-sensitized solar cells based on novel sensitizers bearing asymmetric double D- π -A chains with arylamines as donors. *Dyes and Pigments* 94(3): 481-489.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

13. Horiuchi, T., Miura, H., Sumioka, K. & Uchida, S. (2004). High Efficiency of Dye-Sensitized Solar Cells Based on Metal-Free Indoline Dyes. *Journal of the American Chemical Society* 126(39): 12218-12219.
14. Howie, W. H., Claeysens, F., Miura, H. & Peter, L. M. (2008). Characterization of Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells Utilizing High Absorption Coefficient Metal-Free Organic Dyes. *Journal of the American Chemical Society* 130(4): 1367-1375.
15. Hu, Z.-Y., Fort, A., Barzoukas, M., Jen, A. K. Y., Barlow, S. & Marder, S. R. (2004). Trends in Optical Nonlinearity and Thermal Stability in Electrooptic Chromophores Based upon the 3-(Dicyanomethylene)-2,3-dihydrobenzothiophene-1, 1-dioxide Acceptor. *The Journal of Physical Chemistry B* 108(25): 8626-8630.
16. Kamat, P. V., Tvrđy, K., Baker, D. R. & Radich, J. G. (2010). Beyond Photovoltaics: Semiconductor Nanoarchitectures for Liquid-Junction Solar Cells. *Chemical Reviews* 110(11): 6664-6688.
17. Kim, D., Lee, J. K., Kang, S. O. & Ko, J. (2007). Molecular engineering of organic dyes containing N-aryl carbazole moiety for solar cell. *Tetrahedron* 63(9): 1913-1922.
18. Lee, W., Yang, Y., Cho, N., Ko, J. & Hong, J.-I. (2012). Functionalized organic dyes containing a phenanthroimidazole donor for dye-sensitized solar cell applications. *Tetrahedron* 68(27-28): 5590-5598.
19. Lin, L.-Y., Tsai, C.-H., Wong, K.-T., Huang, T.-W., Hsieh, L., Liu, S.-H., Lin, H.-W., Wu, C.-C., Chou, S.-H., Chen, S.-H. & Tsai, A.-I. (2010). Organic Dyes Containing Coplanar Diphenyl-Substituted Dithienosilole Core for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells. *The Journal of Organic Chemistry* 75(14): 4778-4785.
20. Lin, Y.-D. & Chow, T. J. (2012). Fluorine substituent effect on organic dyes for sensitized solar cells. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 230(1): 47-54.
21. Liu, J., Wang, K., Zhang, X., Li, C. & You, X. Triazine dyes as photosensitizers for dye-sensitized solar cells. *Tetrahedron* (0).
22. Melucci, M., Barbarella, G., Zambianchi, M., Di Pietro, P. & Bongini, A. (2004). Solution-Phase Microwave-Assisted Synthesis of Unsubstituted and Modified α -Quinque- and Sexithiophenes. *The Journal of Organic Chemistry* 69(14): 4821-4828.
23. Menzel, R., Ogermann, D., Kupfer, S., Weiß, D., Görls, H., Kleinermanns, K., González, L. & Beckert, R. (2012). 4-Methoxy-1,3-thiazole based donor-acceptor dyes: Characterization, X-ray structure, DFT calculations and test as sensitizers for DSSC. *Dyes and Pigments* 94(3): 512-524.
24. Meyer, G. J. (2010). The 2010 Millennium Technology Grand Prize: Dye-Sensitized Solar Cells. *ACS Nano* 4(8): 4337-4343.
25. Mishra, A., Behera, R. K., Behera, P. K., Mishra, B. K. & Behera, G. B. (2000). Cyanines during the 1990s: A Review. *Chemical Reviews* 100(6): 1973-2012.

26. Navacchia, M. L., Melucci, M., Favaretto, L., Zanelli, A., Gazzano, M., Bongini, A. & Barbarella, G. (2008). Alkylsulfanyl-Bridged Bithienyl Cores for Simultaneous Tuning of Electronic, Filming, and Thermal Properties of Oligothiophenes. *Organic Letters* 10(17): 3665-3668.
27. O'Regan, B. & Gratzel, M. (1991). A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films. *Nature* 353(6346): 737-740.
28. Ramkumar, S., Manoharan, S. & Anandan, S. (2012). Synthesis of D-(π -A)₂ organic chromophores for dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments* 94(3): 503-511.
29. Sahu, D., Padhy, H., Patra, D., Yin, J.-F., Hsu, Y.-C., Lin, J.-T. S., Lu, K.-L., Wei, K.-H. & Lin, H.-C. (2011). Synthesis and applications of novel acceptor-donor-acceptor organic dyes with dithienopyrrole- and fluorene-cores for dye-sensitized solar cells. *Tetrahedron* 67(2): 303-311.
30. Sayama, K., Hara, K., Mori, N., Satsuki, M., Suga, S., Tsukagoshi, S., Abe, Y., Sugihara, H. & Arakawa, H. (2000). Photosensitization of a porous TiO electrode with merocyanine dyes containing a carboxyl group and a long alkyl chain. *Chemical Communications* (13): 1173-1174.
31. Shen, P., Liu, X., Jiang, S., Wang, L., Yi, L., Ye, D., Zhao, B. & Tan, S. (2012). Synthesis of new N, N-diphenylhydrazone dyes for solar cells: Effects of thiophene-derived π -conjugated bridge. *Dyes and Pigments* 92(3): 1042-1051.
32. Srinivas, K., Sivakumar, G., Ramesh Kumar, C., Ananth Reddy, M., Bhanuprakash, K., Rao, V. J., Chen, C.-W., Hsu, Y.-C. & Lin, J. T. (2011). Novel 1,3,4-oxadiazole derivatives as efficient sensitizers for dye-sensitized solar cells: A combined experimental and computational study. *Synthetic Metals* 161(15-16): 1671-1681.
33. Teng, C., Yang, X., Yang, C., Tian, H., Li, S., Wang, X., Hagfeldt, A. & Sun, L. (2010). Influence of Triple Bonds as π -Spacer Units in Metal-Free Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry C* 114(25): 11305-11313.
34. Wang, T., Han, J., Zhang, Z., Xu, B., Huang, J. & Su, J. (2012). Bistriphenylamine-substituted fluoranthene derivatives as electroluminescent emitters and dye-sensitized solar cells. *Tetrahedron* 68(50): 10372-10377.
35. Wang, Y., Wang, D., Xu, C., Wang, R., Han, J. & Feng, S. (2011). Click polymerization: Synthesis of novel σ - π conjugated organosilicon polymers. *Journal of Organometallic Chemistry* 696(18): 3000-3005.
36. Wang, Z.-S., Koumura, N., Cui, Y., Takahashi, M., Sekiguchi, H., Mori, A., Kubo, T., Furube, A. & Hara, K. (2008). Hexylthiophene-Functionalized Carbazole Dyes for Efficient Molecular Photovoltaics: Tuning of Solar-Cell Performance by Structural Modification. *Chemistry of Materials* 20(12): 3993-4003.

37. Welmaker, G. S. & Sabalski, J. E. (2004). A process for the preparation of 1,2,3,4,8,9,10,10a-octahydro-7bH-cyclopenta[b][1,4]diazepino[6,7,1-hi]indole. *Tetrahedron Letters* 45(25): 4851-4854.
38. Zhang, F., Luo, Y.-h., Song, J.-s., Guo, X.-z., Liu, W.-l., Ma, C.-p., Huang, Y., Ge, M.-f., Bo, Z. & Meng, Q.-B. (2009). Triphenylamine-based dyes for dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments* 81(3): 224-230.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ข้อมูลประวัติคณะผู้วิจัย

ประวัติส่วนตัว

ชื่อ-สกุลดารินี พรหมโยธิน

ตำแหน่งปัจจุบันอาจารย์

วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ถ.ฉลองกรุง เขตลาดกระบัง กรุงเทพฯ 10520

หมายเลขติดต่อ 02-326-4111 ต่อ 3034 โทรสาร 02-3264733

ประวัติการศึกษา

ชื่อย่อปริญญา	สาขา	สถาบันที่จบ	ปีที่จบ
วท.บ.	เคมี	มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์	2544
วท.ม.	เคมีเชิงฟิสิกส์	มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์	2547
ปร.ด.	เคมี	มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์	2552

สาขาวิชาการที่มีความชำนาญพิเศษ (แตกต่างจากวุฒิการศึกษา) ระบุสาขาวิชาการ
Computational chemistry, Computer aided design, Organic synthesis,
Natural product extraction,

ผลงานวิจัย

1. Saiphon Songarsa, Shuleewan Rajviroongit, Darinee Sae-Tang, Supa Hannongbua, Kanyawim Kirtikara, and Prasat Kittakoop :New Racemosol Derivatives as Potent Cyclooxygenase (COX) Inhibitors. CHEMISTRY &BIODIVERSITY , Vol. 2 (2005) 1635-1647.
2. Darinee Sae-Tang, Prasat Kittakoop and Supa Hannongbua. Role of Key Residue Specific to Cyclooxygenase II : An ONIOM Study. Monatshefte fuer Chemie (2009), 140(12), 1533-1541.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3. Darinee Sae-Tang, Nahoum Antony, Sumalee Kamchonwongpaisan, Simon Mackay and Supa Hannongbua. Comparison Interaction Energy of Mycolic Acid Cyclopropane Synthase as Tuberculosis Target with SAM and SAH cofactors and Sinefungin Inhibitor: A Quantum Chemical Calculation (submitted, Medical Medicinal Chemistry Letters)
4. Pratoomrat Tongkate, Darinee S. Phromyothin and Jitapa Sumranjita. Copper(II) ion-sensing mechanism of 2.5-phenylene vinylene derivatives: Syntheses and theoretical calculations. *Tetrahedron* Vol. 18 (2012) 3329-3325.
5. Pongthep Prajongtat, Darinee Sae-Tang Phromyothin and Supa Hannongbua. Key Role of Hydrazine to the Interaction between Oxaloacetic against Phosphoenolpyruvic Carboxykinase (PEPCK): ONIOM Calculations to the Journal of Molecular Modeling. (submitted, Journal of Molecular Modeling)

ผลงานวิชาการอื่น ๆ (ย้อนหลัง 5 ปี)

1. Darinee Sae-Tang, Nahoun Anthony, Sumalee Kamchonwongpaisan, Supa Hannongbua, G.D. Coxon and Simon Mackay. Cyclopropane Synthases as Targets in Antituberculosis Drug Design Key Residue Identification Using Ab initio Methodologies, ScotCHEM Computational Chemistry Symposium , St Andrews university, Scotland , 4 April 2007.
2. Darinee Sae-Tang, Nahoun Anthony, Sumalee Kamchonwongpaisan, Supa Hannongbua and Simon Mackay. Quantum Chemical Calculations Study of Cofactors Fragment in Interaction Energy of Cyclopropane Synthase, German-Thai Symposium on nanoscience and nanotechnology, The Tide resort, Chonburi, Thailand, 26-28 September 2007.
3. Darinee Sae-Tang, Prasat Kittakoop, Sumalee Kamchonwongpaisan and Supa Hannongbua. Quantum Chemical Calculations on Succinate dehydrogenase/ Substrate-Inhibitor Interaction, Second Annual Symposium of Protein Society of Thailand, Chulabhorn Research Institute Conference Center Bangkok, Thailand, 20-21 September 2007.
4. Darinee Sae-Tang, Nahoun Anthony, Sumalee Kamchonwongpaisan, Simon Mackay and Supa Hannongbua. Binding Energy Calculation of Cyclopropane Synthase Enzymes between Cofactors and Their Active Site: ONIOM Study, Pure and

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นิยมนำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Applied Chemistry International Conference 2008, Bangkok, Thailand, 30 January – 1 February 2008.

5. Pongthep Prajongtat, Darinee Sae-Tang, Phronphimon Maitarad, Patchreenart Saparpakorn and Supa Hannongbua. Interaction Energies of Oxaloacetate and Binding Site of Phosphoenolpyruvate Carboxykinase (PEPCK) by MP2 Calculations, Pure and Applied Chemistry International Conference 2008, Sofital Centara Grand Bangkok, Thailand, 30 January – 1 February 2008.
6. Darinee Sae-Tang, Prasat Kittakoop, Supa Hannongbua. An ONIOM Study on Succinate Dehydrogenase/Substrate-Inhibitor Interaction, The 12th Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Ubon Rajathanee University, Thailand, 27-29 March 2008.
7. Darinee Sae-Tang, Sumalee Kamchonwongpaisan, Nahoum Anthony, Simon Mackay and Supa Hannongbua. Effect of Water Molecule in Cyclopropane Synthase Cofactor Binding Site by Quantum Chemical Calculations, The 13th Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Kasetsart University, Thailand, 25-27 March 2009.
8. Darinee Sae-Tang, Masayoshi Takayanagi, Masataka Nagaoka and Supa Hannongbua. Solvation Models: A Correction Binding Energy on Mycolic acid Cyclopropane Synthase Cofactor Binding Site by MD-ONIOM Calculations, Annual Meeting of TRF Senior Research Scholars, Mahasarakham University, 19 – 21 October 2009.
9. Jitapa Sumranjit, Pratoomrat Tongkate, and Darinee Sae-tang: Metal ion-sensing mechanism of 2,5-phenylene vinylene derivatives: Syntheses and theoretical calculations, 241st ACS National Meeting, USA, North America, 27-31 March 2011.
10. Darinee Sae-Tang, Masayoshi Takayanagi, Masataka Nagaoka and Supa Hannongbua. Solvation Models: A Correction Binding Energy on Mycolic acid Cyclopropane Synthase Cofactor Binding Site by MD-ONIOM Calculations, The 15th Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Bangkok University, Thailand, 30 March -1 April 2011.
11. Nissorn Pavarinpong, Wirat Jarernboon, Sirapat Pratontep, Darinee S. Phromyothin. Effect of Solvents Extraction of Achiote Seeds for Dye-sensitized Solar

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Cells, Structural and Electronic Properties, based on DFT calculations, 14th Asian Chemical Congress 2011, Thailand, 5-8 September 2011.

12. Pakawat Chittratan, Wirat Jarernboon, Darinee Sae-tang Phromyothin. Theoretical Investigation of Phenol as an Electron Donor of Dye sensitizer Using DFT calculation. Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2012), Thailand, 11-13 January 2012.
13. Nissorn Pavarinpong, Wirat Jarernboon, Sirapat Pratontep, Darinee Sae-tang Phromyothin. Theoretical Investigation on Achiote Dyes Structure for Dye-sensitized Solar Cell, Geometries and Electronic, based on DFT calculations. Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2012), Thailand, 11-13 January 2012.
14. Prawonwan Thanakit, Sirapat Pratontep, Darinee Sae-tang Phromyothin. Theoretical Study of the Photophysical Properties of Novel Fluorescent Thieno-Pyrrole Derivatives. Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2012), Thailand, 11-13 January 2012.
15. P. Chittratan, W. Jarernboon, D. Sae-Tang Phromyothin. Effects of Donor Moieties of Triphenylamine Based Organic Dyes: Application in Dye-Sensitized Solar Cells. Siam Physics Congress SPC2012, 9-12 May 2012.
16. P. Thanakit, S. Pratontep and D. Sae-Tang Phromyothin. Carbazole Derivatives Chemosensor: Synthesis and Quantum Chemical Calculations. Siam Physics Congress SPC2012, 9-12 May 2012.
17. N. Pavarinpong, S. Saekow, W. Maiakgree, S. Pimanpang, S. Pratontep, D. Sae-tang Phromyothin, W. Jarernboon and V. Amornkitbamrung. Polymer Electrolyte Based on Polyethylene Oxide for Dye-Sensitized Solar Cells Application. Siam Physics Congress SPC2012, 9-12 May 2012.
18. Chompoonuch Tancharoen, Kanokorn Sudto, Ratsupa Thammaphorn, Darinee Phromyothin, Yan Hua Qin, Pachareenart Saparpakorn, Srunya Vajrodaya, Supanna Techasakul, Kornkanok Ingkaninan, Hui-Ming Ge, Ren Xiang Tan, Supa Hannongbua, Search for Bioactive Compounds from Dipterocarpaceae Plant in Thailand, Against HIV-1 Reverse Transcriptase, Acetylcholinesterase and Antimicrobial Activities, IOCD International Conference on Functional Molecules in Nature, Nanjing, PR China, 22-24 September 2012.

19. Kanokorn Sudto, Chompoonuch Tanchaen, Darinee Phromyothin, Yan Hua Qin, Srunya Vajrodaya, Supanna Techasaku, , Hui-Ming Ge, Ren Xiang Tan, Supa Hannongbua, Antimicrobial activity of Hopeahainol C from stem bark of *Shorea roxburghii* G. Don, 2012 IOCD International Conference on Functional Molecules in Nature, Nanjing, PR China, 22-24 September 2012.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้