ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์ การศึกษาเชิงทฤษฎีของโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์และสมบัติเชิงแสงของฟลูโอรีนไวนิลีน โอลิโกเมอร์และอนุพันธ์

ผู้เขียน นายธนิสร ยาขันทิพย์

ปริญญา วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (เคมี)

คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ดร. นาวี กังวาลย์ ประธานกรรมการ
ดร. พิเชษฐ อนุรักษ์อุดม กรรมการ

บทคัดย่อ

สมบัติสภาวะพื้นของฟลูโอรีนไวนิลีน (PFV) โอลิโกเมอร์และอนุพันธ์ถูกศึกษาโดยทฤษฎีฟังชันความหนาแน่น (DFT) ด้วยระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d) พลังงานกระตุ้นที่ต่ำที่สุด (E_gs) และความยาวคลื่นที่ดูดกลืน (λ_{abs}) ถูกศึกษาโดยทฤษฎีฟังชันความหนาแน่นที่ขึ้นกับเวลา (TDDFT) และ ZINDO สมบัติสถานะถูกกระตุ้นถูกศึกษาโดยการใช้โครงแบบอันตรกิริยาเดี่ยว (CIS) ความยาวคลื่นที่ถูกปล่อย (λ_{ems}) ถูกวัดโดยการใช้ทฤษฎีฟังชันความหนาแน่นที่ขึ้นกับเวลา (TDDFT) และ ZINDO ด้วย เพื่อให้ได้มาของการประมาณค่าสมบัติ แนวคิดโอลิโกเมอร์ถูกประยุกต์โดยการลงจุดระหว่างสมบัติของการคำนวณและความยาวโซ่ผกผัน ที่ความยาวโซ่ไม่จำกัด ผลลัพธ์แสดงให้เห็นว่าการดัดแปรของฟลูโอรีนไวนิลีน (PFV) ฐาน โดยการเพิ่มวงแหวนแนพทาลีนและฟีนิลีนสามารถเพิ่มและลดช่องว่างพลังงานตามลำดับ เปรียบเทียบด้วยฟลูโอรีนไวนิลีน (PFV) ฐาน นอกจากนั้น หมู่แทนที่ตัวให้และตัวรับอิเล็กตรอนสามารถเพิ่มระดับพลังงาน HOMO และลดระดับพลังงาน LUMO ตามลำดับ ในการเพิ่มเติม ตำแหน่ง ออร์โท เมตา และพารา สามารถมีอิทธิพลต่อโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์และสมบัติเชิงแสงของโมเลกุลที่ศึกษา

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

Thesis Title Theoretical Studies of the Electronic Structure and Optical Properties of Oligomeric Fluorenevinylene and Its Derivatives

Author Mr. Thanisorn Yakhantip

Degree Master of Science (Chemistry)

Thesis Advisory Committee Dr. Nawee Kungwan Chairperson

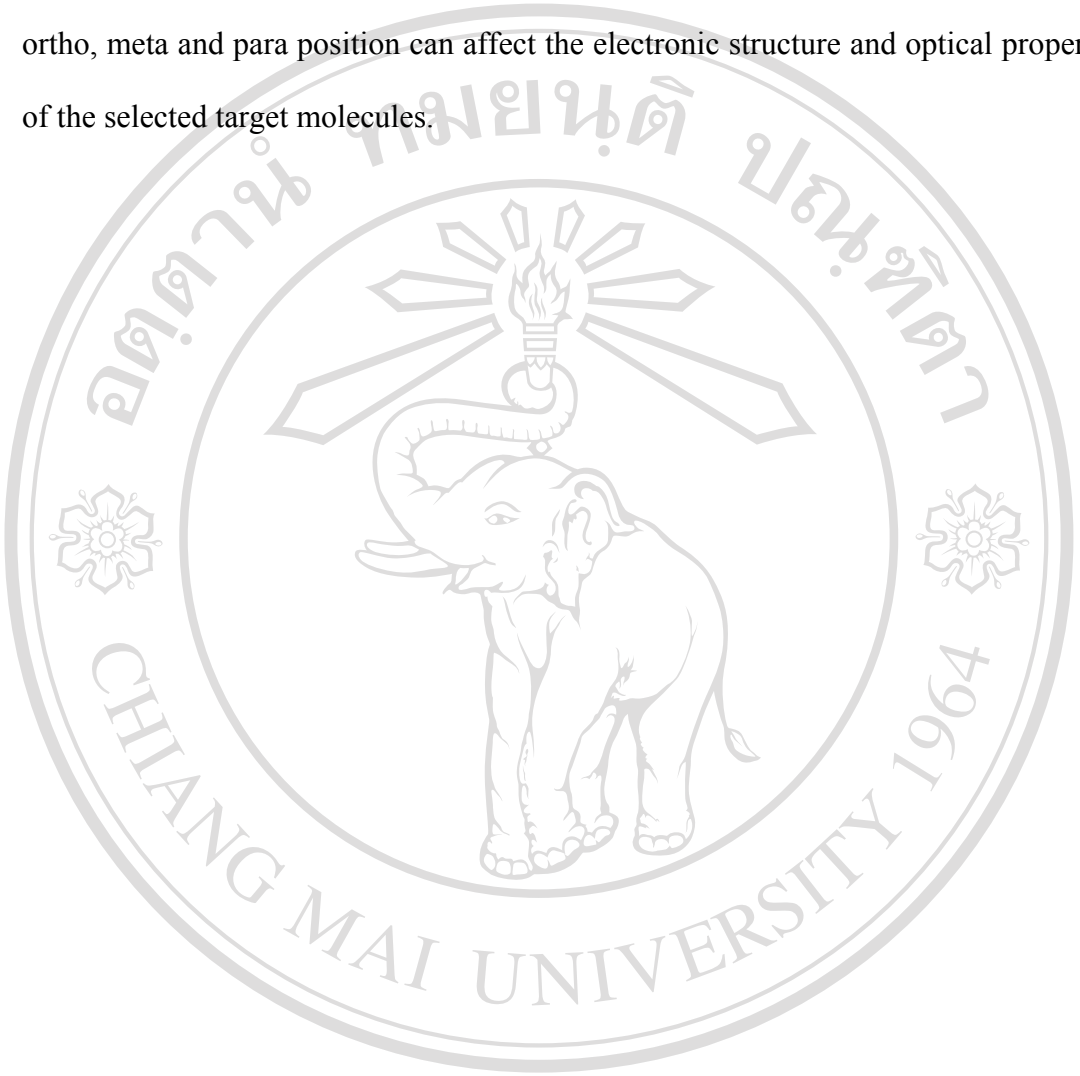
Dr. Piched Anuragudom Member

ABSTRACT

Ground state properties of oligomeric fluorenevinylene (PFV) and its derivatives were studied by density functional theory (DFT) with B3LYP/6-31G(d). The lowest excitation energies (E_gs) and the absorption wavelengths (λ_{abs}) were studied employing the time dependent density functional theory (TDDFT) and ZINDO. Excited state properties were studied using configuration interaction single (CIS). The emission wavelengths (λ_{ems}) were also determined using TDDFT and ZINDO. To obtain the estimation properties, an oligomer approach was applied by plotting the calculated properties with the inverse chain length assumed to the infinite. The results showed that the modification of PFV based by adding naphthalene and phenylene ring can increase and decrease energy gaps, respectively compared with

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

PFV based. Moreover, the electron donor and acceptor substitute groups can increase HOMO energy levels and decrease LUMO energy levels, respectively. In addition, ortho, meta and para position can affect the electronic structure and optical properties of the selected target molecules.



ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved