

รหัสโครงการ: RMU5380017

ชื่อโครงการ: การจัดเรียงตัวและสมบัติทางแสงของอนุพันธ์พอลิไธโอฟินในสภาวะแวดล้อมต่างๆ

ชื่อนักวิจัย: ผศ.ดร. รักษาดิ ไตรผล

E-mail Address: rakchartt@nu.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 15 มิถุนายน 2553 ถึง 14 มิถุนายน 2556

บทคัดย่อ

ปัจจัยระดับโมเลกุล เช่นการเข้าจับกันภายในหรือระหว่างโมเลกุลและรูปร่างของโมเลกุล มีผลอย่างมากต่อสมบัติของคอนจูเกตพอลิเมอร์ ในการศึกษานี้ได้ทำการเหนี่ยวนำให้ regioregular poly(3-octylthiophene) (*rr*-P3OT) เกิดการเปลี่ยนแปลงรูปร่างด้วยการใช้ตัวทำละลายที่ไม่ดี คือ โซลโคเฮกเซนและเฮกเซน เมื่อสายโซ่แบบยืดออกของ *rr*-P3OT ในคลอโรเบนซีนเปลี่ยนไปเป็นแบบม้วนตัวในโซลโคเฮกเซน พบว่ามีผลทำให้เกิดการลดลงของความยาวของการเกิดคอนจูเกชัน เทียบเท่ากับการสั้นลงของหน่วยไธโอฟินประมาณ 6 ถึง 9 หน่วย ส่วนในเฮกเซนนั้นสายโซ่พอลิเมอร์เกิดการเข้าซ้อนทับกันภายในโมเลกุล(*intrachain aggregates*) ส่งผลให้ความยาวของการเกิดคอนจูเกชันมีค่าสูงขึ้น นอกจากนี้ยังได้ทำการศึกษาสมบัติทางแสงของ *rr*-P3OT aggregates ในระบบอื่นๆด้วย ผลจากการศึกษาแสดงให้เห็นว่า aggregates ที่คายแสงไม่ได้ จะเกิดขึ้นเมื่อสายโซ่พอลิเมอร์เข้ามาจับกันในช่วงแรก การลดลงของความสามารถในการละลายทำให้พอลิเมอร์จับกันแน่นมากขึ้น ซึ่งส่งผลทำให้เกิด aggregates ที่คายแสงได้ สเปกตรากการคายแสงของ aggregates ชนิดนี้จะเกิดขึ้นในช่วงพลังงานต่ำกว่าของโมเลกุลเดี่ยว สมบัติการดูดกลืนแสงของ aggregates ทั้งสองชนิดนี้มีลักษณะแตกต่างกันเล็กน้อย นอกจากนี้ยังพบอีกว่าปริมาณและสมบัติของ aggregates ขึ้นอยู่กับเงื่อนไขของการเตรียมเช่นชนิดของตัวทำละลาย เป็นต้น ในส่วนสุดท้ายของการศึกษานี้ได้ทำการเตรียมอนุภาคนาโนของคอนจูเกตพอลิเมอร์ในน้ำด้วยวิธี *reprecipitation* ซึ่งการเตรียมในวิธีนี้เกี่ยวข้องกับการฉีดสารละลายพอลิเมอร์ในตัวทำละลายอินทรีย์ เข้าไปในตัวกลางน้ำที่มีปริมาณมากเกินพอ การศึกษานี้แสดงให้เห็นว่าความสามารถในการละลายน้ำของตัวทำละลายเริ่มต้นเป็นปัจจัยหลักที่มีผลต่อกลไกการเกิดอนุภาคนาโนของคอนจูเกตพอลิเมอร์ จากการใช้ไดคลอโรมีเทนและเตตระไฮโดรฟิวเรนเป็นตัวทำละลายเริ่มต้นนั้น พบว่ามีผลทำให้ได้อนุภาคนาโนของคอนจูเกตพอลิเมอร์ที่มีขนาดและสมบัติที่แตกต่างกันอย่างมาก

คำหลัก: conformation; conjugated polymer; photophysics; chain organization; solvent effect; nanoparticles

Project Code: RMU5380017

Project Title: Chain organization and photophysical properties of polythiophene derivatives in different local environments

Investigator: Asst. Prof. Dr. Rakchart Traiphol

E-mail Address: rakchartt@nu.ac.th

Project Period: 15 June 2010 to 14 June 2013

Abstract

Molecular parameters such as interchain/intrachain aggregation and individual chain conformation affect the properties of conjugated polymers significantly. In this study, the conformational change of regioregular poly(3-octylthiophene) (*rr*-P3OT) is induced using cyclohexane and hexane as poor solvents. When the extended *rr*-P3OT chain in chlorobenzene transforms into coiled conformation in cyclohexane, the decrease of conjugation length is comparable to the shortening of 6 to 9 thiophene units. In hexane, the dense packing of thiophene units causes intrachain aggregation, resulting in the increase of conjugation length. We also explore the photophysical properties of *rr*-P3OT aggregates in different systems. Our results show that the non-emissive aggregates form in the early stage of interchain association, resulting in the formation of three redshift peaks in absorption spectrum. Further decrease of solvent quality forces dense packing of polymeric segments within the aggregates, which in turn causes the formation of emissive aggregates. The PL emission of this aggregate occurs at lower energy region compared to that of the non-aggregated chains. The non-emissive and emissive aggregates exhibit slightly different absorption bands. The amount and photophysical properties of aggregates also depend on the preparing condition such as the initial solvent. In the last part of this study, we prepare conjugated polymer nanoparticles (CPN) in water via reprecipitation technique, involving the injection of polymer solution in organic solvents into an excess amount of water. We demonstrate that water solubility of the initial solvent is a major factor dictating mechanism of the CPN formation. The use of dichloromethane and tetrahydrofuran as initial solvents provides the CPN with different sizes and properties.

Keywords: conformation; conjugated polymer; photophysics; chain organization; solvent effect; nanoparticles