ตัดจากต้นฉบับ

ผลงานวิจัยดีเด่นของ
มหาวิทยาลัยมหิดล

มหาวิทยาลัยมหิดล
ปัญญาของแผ่นดิน

งานสารสนเทศงานวิจัย กองบริหารงานวิจัย
สำนักงานอธิการบดีมหาวิทยาลัยมหิดล
โทร. 02-849-6241-6 โทรสาร 02-849-6247
E-mail : dircopra@mahidol.ac.th

ผลของความเข้มข้นที่พื้นผิวของฟิล์มบางโมเลกุลพอร์ฟีนแบบชั้นเดียว : การจำลองพลศาสตร์เชิงโมเลกุลที่รอยต่อระดับนาโนระหว่างน้ำและก๊าซ

บทคัดย่อ

ในงานวิจัยนี้เราได้ทำการศึกษาผลของความเข้มข้นที่พื้นผิวต่อโครงสร้างและเสถียรภาพของฟิล์มบางโมเลกุลพอร์ฟีนแบบชั้นเดียวที่รอยต่อระหว่างน้ำกับก๊าซด้วยระเบียบวิธีการจำลองพลศาสตร์เชิงโมเลกุล โดยได้ทำการจำลองระบบที่มีความเข้มข้นที่พื้นผิวที่แตกต่างกัน 5 ความเข้มข้น โดยมีความสอดคล้องกับกราฟไอโซเทอมที่ได้จากค่าการทดลอง ผลจากการจำลองนั้นพบว่าการเพิ่มขึ้นของจำนวนโมเลกุลพอร์ฟีนที่พื้นผิวรอยต่อมีผลทำให้จำนวนโมเลกุลของน้ำที่บริเวณรอยต่อลดลงและยังทำให้แรงตึงผิวลดลงอีกด้วย ทั้งนี้ผลจากการคำนวณแรงตึงผิวที่ความเข้มข้น 5 ค่านั้น ได้แสดงถึงสภาวะของพื้นผิวในรูปแบบของก๊าซ สภาวะขยายตัว สภาวะควบแน่น และสภาวะการแตกสลายของฟิล์มโมเลกุล ยังได้พบอีกว่าอันตรกริยาแบบพันธะไฮโดรเจนระหว่างโมเลกุลพอร์ฟีนกับน้ำนั้นมีบทบาทสำคัญในการก่อตัวของชั้นฟิล์ม โดยเฉพาะที่ความเข้มข้นต่ำๆ

ติดต่อขอรายละเอียดเพิ่มเติม

หัวหน้าโครงการ : ผศ. ธีรเกียรติ์ เกิดเจริญ
ที่อยู่ : ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์
(วิทยาเขตพญาไท) มหาวิทยาลัยมหิดล
โทร : 0-2201-5770
Email : sctkc@mahidol.ac.th

รูป

ผู้ร่วมวิจัย :
ที่อยู่ :
โทร :
Email :

Mahidol University
Research Excellence

Research Management and Development
Office of the President
Tel : 02-849-6241-6 Fax : 02-849-6247
E-mail : dircopra@mahidol.ac.th

MAHIDOL UNIVERSITY
Wisdom of the Land

Effects of surface concentration on the porphine monolayers: Molecular simulations at the nanoscale water–gas interface

Abstract

The effect of surface concentration on the structure and stability of porphine (PH2) monolayers at the water–gas interface was studied by using molecular dynamics simulation. Five monolayer systems having different surface concentrations were investigated in order to cover a full range of the experimental pi–A isotherm. The simulation results show that increment of a number of the PH2 molecules not only affects the significantly decreasing water density at the interface but also the monolayer surface tensions. The calculated surface tensions of the five systems indicate that the monolayer phase transfer corresponding to gaseous, expanded, condensed, and collapsed phases are observed. The hydrogen bonding between water and the PH2 molecules at the interface plays an important role on the monolayer film formation, especially at the lower surface concentrations. The PH2 orientations for all surface concentrations, except the highest one, are favored to be the β-structure as observed in the copper porphyrazine (CuPz) monolayer.

For More Information

Name (PI) : Teerakiat Kerdcharoen
Address : Department of Physics, Faculty of Science (Phyathai campus), Mahidol University
Tel : 0-2201-5770
Email : sctkc@mahidol.ac.th

Picture

Name :
Address :
Tel :
Email :