

งานวิจัยนี้ศึกษาโครงสร้างทางกายภาพและอิเล็กทรอนิกส์ของโมเลกุลซิงค์โพลพรีน (zinc porphyrin) ที่ไฮโดรเจนที่ตำแหน่งเมโซแทนที่ด้วยหมู่แทนที่ชนิดต่างๆ ด้วยระเบียบวิธี density functional theory (DFT) พบว่าชนิดของหมู่แทนที่มีผลต่อระดับพลังงานนอกสุดของวงซิงค์โพลพรีน ซึ่งการใช้ระเบียบวิธี DFT/B3LYP/6-31G(d) สามารถอธิบายความแตกต่างที่เกิดจากชนิดของหมู่แทนที่ที่แทนที่ตำแหน่งเมโซของวงซิงค์โพลพรีนในระดับอิเล็กทรอนิกส์ได้ นอกจากนี้ศึกษาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนจากสถานะพื้นไปยังสถานะเร้าซึ่งสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสงช่วงยูวี-วิสิเบิล ของโมเลกุลซิงค์โพลพรีน ด้วยการประยุกต์ใช้การคำนวณแบบ Time Dependent-DFT method (TD-DFT) พบว่าระดับพลังงานและการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน ที่ได้จากผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีดังกล่าวให้ผลสอดคล้องกับผลที่ได้จากการทดลอง ซึ่งค่าที่คำนวณได้ของผลต่างของช่องว่างระดับพลังงาน HOMO-LUMO ของโมเลกุล Zinc (II) porphyrin, Zinc (II) meso-tetraphenyl porphyrin, [5, 10, 15, triphenyl-20-(2-(4-carboxyphenyl) ethynyl porphyrin Zinc (II)] และ [5, 10, 15, triphenyl-20-(2-(4-(2,2-dicarboxyvinyl)phenyl) ethynyl) porphyrin Zinc (II)] เท่ากับ 3.06, 2.99, 2.76 และ 2.67 eV ตามลำดับ

In the present work density functional theory (DFT) is applied to calculate geometries and electronic structures of asymmetric meso-substituted zinc porphyrin. The influences of the substituents in the zinc porphyrin ring on the energies of frontier molecular orbitals are evaluated. This is done by gradually increasing the amount of substituents in the investigated zinc porphyrin rings. The DFT/B3LYP/6-31G(d) used in this work is found to correctly describe the differences in electronic structures, which arise from differences in the location, number, and electronic effects of the substituents at the meso-positions of the zinc porphyrin ring. In addition, the applicability of the Time Dependent-DFT method (TD-DFT) for evaluating the one-electron transition energies, which correspond to the near UV-Visible absorptions of zinc porphyrin molecules, is investigated. The transition energies and the orbitals involved in electronic transitions are well reproduced by this method, as shown by comparing the results to our time dependent density functional calculations. The HOMO-LUMO energy gaps of Zinc (II) porphyrin, Zinc (II) meso-tetraphenyl porphyrin, [5, 10, 15, triphenyl-20-(2-(4-carboxyphenyl) ethynyl porphyrin Zinc (II)] and [5, 10, 15, triphenyl-20-(2-(4-(2,2-dicarboxy vinyl) phenyl) ethynyl) porphyrin Zinc (II)] are 3.06, 2.99, 2.76 and 2.67 eV, respectively.