

**DEVELOPMENT OF ELECTRONIC NOSE SYSTEM BASED
ON OPTICALLY-ACTIVE ORGANIC THIN FILM SENSORS
AND MOLECULAR DESIGN**



SUMANA KLADSOMBOON

**A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF DOCTOR OF PHILOSOPHY (PHYSICS)
FACULTY OF GRADUATE STUDIES
MAHIDOL UNIVERSITY**

2013

COPYRIGHT OF MAHIDOL UNIVERSITY

DEVELOPMENT OF ELECTRONIC NOSE SYSTEM BASED ON OPTICALLY-ACTIVE ORGANIC THIN FILM SENSORS AND MOLECULAR DESIGN

SUMANA KLADSOMBOON 5237031 SCPY/D

Ph.D. (PHYSICS)

THESIS ADVISORY COMMITTEE: TEERAKIAT KERDCHAROEN, Ph.D. (PHYSICAL CHEMISTRY), ADISORN TUANTRANONT, Ph.D. (ELECTRICAL ENGINEERING), THEERAPORN PUNTHEERANURAK, Ph.D. (MOLECULAR GENETICS AND GENETIC ENGINEERING), PETER LIEBERZEIT, Ph.D. (CHEMISTRY)

ABSTRACT

The sense of smell is an important sense for human in daily life. Many researchers have been trying to fabricate a device that mimics the human olfactory system, called "Electronic nose" (e-nose). This instrument comprises an array of gas sensor, a transducer and a pattern recognition analysis. In this thesis, organic thin film gas sensors have been fabricated from organic dyes, namely, metalloporphyrin (MP) and metallo-phthalocyanine (MPc). Both compounds have been used as sensing materials for volatile organic compounds (VOC) based on optical detection. The interaction energy and the charge transfer between sensing materials and VOC molecules were investigated by the density functional theory (DFT) with the B3LYP 6-31G* basis set. The objective of this thesis is to investigate various kinds of optical gas sensors, for example, mixtures layer of MP and MPc, nanocomposite between MP and multiwall carbon nanotube (MWCNT) and molecularly imprinted polymer (MIP) mixed MPc. Optical technique was used as the transducer to transform the physical properties of sensing material to the electronic signal. Two types of optical e-nose have been explored. The first type employed the UV-vis spectrophotometer to monitor optical spectral changes of the area integral under absorption spectrum. The second type employed light-emitting diodes (LEDs) as the light source and CMOS photodetector was as transducer. The latter e-nose system was invented as a portable device. Finally, the principal component analysis (PCA) was performed as the pattern recognition to investigate the performance of our e-nose systems. The results confirmed that both e-noses successfully classified VOCs vapor based on optically-active organic thin films.

KEY WORDS: PORPHYRINS / PHTHALOCYANINES / OPTICAL GAS SENSOR/ E-NOSE/ DENSITY FUNCTIONAL THEORY

104 pages

การพัฒนาารบบจมูกอิเล็กทรอนิกส์โดยใช้ฟิล์มบางของสารอินทรีย์ชนิดที่ไวต่อแสง
และการสร้างแบบจำลองโมเลกุล

DEVELOPMENT OF ELECTRONIC NOSE SYSTEM BASED ON OPTICALLY-ACTIVE
ORGANIC THIN FILM SENSORS AND MOLECULAR DESIGN

ศุมนากลัดสมบูรณ์ 5237031 SCPY/D

ปร.ด. (ฟิสิกส์)

คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์: ชีรเกียรติ์ เกิดเจริญ, Ph.D. (PHYSICAL CHEMISTRY),
อดิศร เตื่อนทรานนท์, Ph.D. (ELECTRICAL ENGINEERING), ชีราพร พันธุ์ธีรานุรักษ์, Ph.D.
(MOLECULAR GENETICS AND GENETIC ENGINEERING), PETER LIEBERZEIT,
Ph.D. (CHEMISTRY)

บทคัดย่อ

ประสาทสัมผัสการรับรู้กลิ่นเป็นสิ่งสำคัญสำหรับชีวิตประจำวันของมนุษย์ นักวิจัยพยายามที่จะ
ประดิษฐ์อุปกรณ์เลียนแบบระบบรับรู้กลิ่นของมนุษย์ ที่เรียกว่า “จมูกอิเล็กทรอนิกส์” (e-nose) เครื่องมือนี้
ประกอบด้วย อะเรย์ของเซ็นเซอร์ตรวจวัดก๊าซ, ตัวแปลงสัญญาณ และส่วนวิเคราะห์ห้จดจำรูปแบบของกลิ่น ใน
วิทยานิพนธ์เล่มนี้เซ็นเซอร์ตรวจวัดก๊าซเชิงแสงแบบฟิล์มบางได้ถูกประดิษฐ์ขึ้นจากสีย้อม (dye) อินทรีย์ คือ
เมทัลโลพอร์ไฟริน (MP) และ เมทัล โลพทาโลไซยานิน (MPc) ซึ่งสารประกอบทั้งสองมีคุณสมบัติในการ
ตรวจจับไอระเหยโดยใช้วิธีการทางแสง อันตรกิริยาและการเปลี่ยนแปลงของประจุไฟฟ้าระหว่างโมเลกุลของ
วัสดุที่ใช้ตรวจจับกับโมเลกุลของไอระเหยได้ถูกตรวจสอบโดยวิธีของทฤษฎีเด้นซิติฟังก์ชัน (DFT) ใช้เบซิส
เซต B3LYP 6-31G* วัตถุประสงค์ของวิทยานิพนธ์นี้คือการประดิษฐ์เซ็นเซอร์ตรวจวัดก๊าซเชิงแสง
หลากหลายชนิด ตัวอย่างเช่น การใช้เมทัล โลพอร์ไฟริน และเมทัล โลพทาโลไซยานิน แบบผสมผสานกัน, การ
ใช้สารผสมระหว่าง MP กับท่อนาโนคาร์บอน (MWCNT) และ การใช้สารผสมของพอลิเมอร์ที่มีรอยพิมพ์
ประทับโมเลกุล (MIP) กับ MPc โดยที่เทคนิคทางแสงถูกนำมาใช้ในการแปลงจากคุณสมบัติทางกายภาพของ
วัสดุเซ็นเซอร์มาเป็นสัญญาณทางอิเล็กทรอนิกส์ จมูกอิเล็กทรอนิกส์ทั้งสองชนิดได้ถูกศึกษา ชนิดแรกคือจมูก
อิเล็กทรอนิกส์ที่ใช้เครื่องวัดค่าการดูดกลืนแสงในการตรวจสอบพื้นที่ได้กราฟของสเปกตรัมการดูดกลืนแสงที่
เปลี่ยนไป ส่วนชนิดที่สองนั้นใช้ไดโอดเปล่งแสง (LED) เพื่อเป็นแหล่งกำเนิดแสง และใช้ตัวตรวจจับทางแสง
(Photodetector) สำหรับอ่านค่าการเปลี่ยนแปลงความเข้มแสง จมูกอิเล็กทรอนิกส์เครื่องหลังนี้ได้ถูกสร้างขึ้น
ให้เป็นอุปกรณ์ที่พกพาได้ สุดท้ายนี้ได้ใช้การวิเคราะห์การจำแนกกลิ่นด้วยวิธีวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก
(PCA) พบว่าเครื่องจมูกอิเล็กทรอนิกส์ที่ใช้ก๊าซเซ็นเซอร์ฟิล์มบางทั้งสองแบบ ประสบความสำเร็จในการ
จำแนกกลิ่นของไอระเหยต่าง ๆ