



## รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

แบบจำลองทางโมเลกุลของสารประกอบเชิงซ้อนพอลิเมอร์-ไซโคลเด็กซ์ทริน

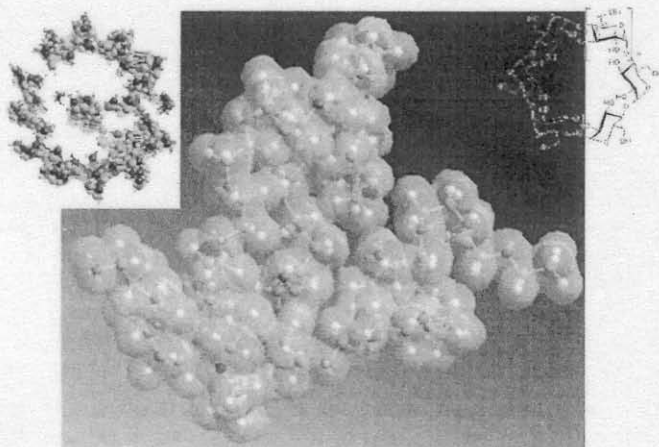
Molecular Modelling of Polymer-Cyclodextrins Inclusion Complexes

ผู้วิจัย

ดร.วิรัช ทวีปรีดา

สังกัด

สาขาวิทยาศาสตร์พอลิเมอร์ คณะวิทยาศาสตร์



สนับสนุนโดยทุนอุดหนุนการวิจัยจากเงินกองทุนวิจัยคณะวิทยาศาสตร์

ประเพณีริเริ่มโครงการวิจัย

ปีงบประมาณ 2549

## บทคัดย่อ

การสร้างแบบจำลองด้วยคอมพิวเตอร์เป็นที่รู้จักกันดีในสาขาวิชาเคมีในฐานะที่เป็นเครื่องมือช่วยให้เกิดความเข้าใจในปัญหาที่ซับซ้อน โดยการให้หลักทางสถิติและข้อมูลทางคณิตศาสตร์ การประยุกต์ใช้เพื่อศึกษากลไกการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างพอลิเมอร์และไซโครเด็กซ์ตริน ศึกษาโดยการสร้างแบบจำลองโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์และวิเคราะห์โดยพิจารณาจากสนามแรงดึงดูด ปัจจัยสำคัญที่ทำให้เกิดสารประกอบเชิงซ้อนคือความเข้ากันได้ของขนาดระหว่างเส้นผ่านศูนย์กลางภายในช่องว่างของโมเลกุลไซโครเด็กซ์ตริน และภาคตัดขวางของโมเลกุลพอลิเมอร์ เช่นอัลฟาไซโครเด็กซ์ตรินจะเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนกับพอลิเอทิลีนไกลคอล ขณะที่แกมมาไซโครเด็กซ์ตรินที่มีขนาดช่องว่างภายในใหญ่กว่าสามารถเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนได้กับพอลิเอทิลีนไกลคอล 2 สายโซ่ หรือเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนได้กับพอลิไดเมทิลไซลีนอกเซน เช่นเดียวกันกับสมบัติความไม่ชอบน้ำของโมเลกุลไซโครเด็กซ์ตรินยังเป็นอีกสาเหตุหนึ่งทำให้เกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อน ได้ทำการศึกษาในงานวิจัยนี้โดยใช้โปรแกรม CHARMM

## ABSTRACT

Computer modelling has been frequently used in the field of chemistry as an excellent tool to understand sophisticated problems by examining the statistical and mathematical data generated. In the application of polymer-cyclodextrins inclusion complexes, the technique of computer modeling and force-field simulation analyses were used. The important factor in the inclusion complexes formation is the size matching between the internal cyclodextrin's cavity and the cross-sectional area of polymeric guest,  $\alpha$ -CD can complex with only the PEG, whereas the  $\gamma$ -CD form can complex with 2 PEG chains and PDMS. The hydrophobic internal cyclodextrin's cavity which was studied by CHARMM program can also leads to the complexation of polymer-cyclodextrins.