

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

การศึกษาการระงับฟลูออเรสเซนส์ที่เกิดจากการถ่ายโอนอิเล็กตรอนระหว่างสารเรืองแสง
ฟลูออเรสเซนส์ที่ได้รับการกระตุ้นเชิงแสงและกัวนีนด้วยแบบจำลองเชิงโมเลกุล

Study of fluorescence quenching by photoinduced electron transfer
reaction between fluorescent dyes and guanine base using molecular
simulations

นักวิจัย

ผศ.ดร.ชุตินธร พันธุ์วงศ์

โครงการวิจัยนี้ได้รับทุนสนับสนุนจากเงินรายได้มหาวิทยาลัย

มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

ประจำปีงบประมาณ 2556 รหัสโครงการ SCI560506S

ชื่อโครงการ

การศึกษาการระงับฟลูออเรสเซนส์ที่เกิดจากการถ่ายโอนอิเล็กตรอนระหว่างสารเรืองแสง
ฟลูออเรสเซนส์ที่ได้รับการกระตุ้นเชิงแสงและกวานีนด้วยแบบจำลองเชิงโมเลกุล

Study of fluorescence quenching by photoinduced electron transfer reaction between
fluorescent dyes and guanine base using molecular simulations

นักวิจัย

ดร.ชุตินธร พันธุ์วงศ์ สังกัด ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์

สารบัญ

กิตติกรรมประกาศ	2
บทคัดย่อ	3
Abstract	4
บทนำ	5
วัตถุประสงค์	6
การทบทวนวรรณกรรมที่เกี่ยวข้อง	6
วิธีการทดลอง	8
ผลการทดลองและวิจารณ์	9
1. 7-methoxycoumarin (C-3H)	9
1.1. Free C-3H	9
1.1.1. Geometry optimization	9
1.1.2. Dynamics simulations	12
1.2. Hydrogen-bonded C-3H-guanine complex	18
1.2.1. Geometry optimization	18
1.2.2. Dynamics simulations	24
2. 7-amino-4-methylcoumarin (C-120)	28
2.1. Free C-120	28
2.1.1. Geometry optimization	28
2.1.2. Dynamics simulations	31
2.2. Hydrogen-bonded C-120-guanine complex	32
2.2.1. Geometry optimization	32
2.2.2. Dynamics simulations	35
สรุปผลการทดลอง	36
เอกสารอ้างอิง	37
ข้อคิดเห็นและข้อเสนอแนะสำหรับการวิจัยต่อไป	38
ภาคผนวก	39

กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอขอบคุณทุนสนับสนุนจากเงินรายได้มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ ประจำปีงบประมาณ 2556 รหัสโครงการ SCI560506S และความอนุเคราะห์ทางด้านสถานที่และคอมพิวเตอร์แม่ข่ายสำหรับการทำแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์จากภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ นอกจากนี้ผู้วิจัยขอขอบคุณ Prof. Todd J. Martinez จาก Stanford University ที่เอื้อเฟื้อซอฟต์แวร์สำหรับการทำแบบจำลองเชิงโมเลกุลในโครงการวิจัยนี้ สุดท้ายนี้ขอขอบคุณนักศึกษาผู้ช่วยวิจัยทุกคนที่ช่วยดำเนินงานให้สำเร็จได้ด้วยดี

บทคัดย่อ

การถ่ายโอนอิเล็กตรอนที่เหนี่ยวนำด้วยแสงระหว่างสารเรืองแสงและกรดอะมิโนหรือนิวคลีโอเบสสามารถทำให้เกิดการระงับการเรืองแสงฟลูออเรสเซนส์ของสารเรืองแสงได้ โดยการระงับการเรืองแสงฟลูออเรสเซนส์จะส่งผลต่อคุณสมบัติสำคัญของการเรืองแสงเมื่อถูกนำไปใช้วัดในระบบเชิงโมเลกุลทางชีวภาพ โครงการนี้ศึกษาการระงับการเรืองแสงฟลูออเรสเซนส์ของ 7-methoxycoumarin (C-3H) และ 7-amino-4-methylcoumarin (C-120) โดยใช้เบสกวีนีนเป็นตัวระงับการเรืองแสงฟลูออเรสเซนส์ โดยศึกษาการเกิดการถ่ายโอนอิเล็กตรอนระหว่าง C-3H และเบสกวีนีน ด้วยแบบจำลองเชิงโมเลกุล ซึ่งพิจารณาจากการเปลี่ยนระดับชั้นพลังงานของอิเล็กตรอนในระบบ เพื่อศึกษาสมบัติการดูดกลืนแสงและการเรืองแสงฟลูออเรสเซนส์ของ C-3H และ C-120 ทั้งในระบบที่มีเฉพาะ สารเรืองแสง และระบบที่ สารเรืองแสงสร้างพันธะไฮโดรเจนกับเบสกวีนีน ในสถานะสุญญากาศและละลายอยู่ในน้ำ ผลการศึกษาพบว่า สมบัติเชิงสเปกโทรสโกปีในระบบที่มีเฉพาะสารเรืองแสงทั้งสอง สอดคล้องกับผลการศึกษาในเชิงการทดลองที่มีมาก่อนหน้านี้ และเมื่อมีการสร้างพันธะไฮโดรเจนกับเบสกวีนีน จะส่งผลให้สมบัติเชิงสเปกโทรสโกปีของ C-3H และ C-120 เปลี่ยนแปลงไปในแง่ของความยาวคลื่นที่ดูดกลืนและคายพลังงาน และ ความน่าจะเป็นที่จะเปลี่ยนสถานะจากสถานะพื้นไปยังสถานะกระตุ้นอันดับที่หนึ่งและสอง ในส่วนของการศึกษาการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในโมเลกุลก็ให้ผลสอดคล้องกับงานวิจัยที่มีมาก่อนหน้านี้ และเมื่อคำนวณประจุของโมเลกุลในระบบบนสถานะต่างๆ พบว่า ในการเปลี่ยนระดับชั้นพลังงานของระบบที่ C-3H และ C-120 สร้างพันธะไฮโดรเจนกับเบสกวีนีน เป็นการถ่ายโอนประจุภายในโมเลกุล ซึ่งแม้ว่าจะยังไม่สามารถแสดงการเกิดปฏิกิริยาการถ่ายโอนอิเล็กตรอนที่เหนี่ยวนำด้วยแสงระหว่างสารเรืองแสงและเบสกวีนีนได้ แต่อย่างไรก็ตามก็สามารถแสดงถึงคุณสมบัติการเปล่งแสงฟลูออเรสเซนส์ที่ลดลงได้

Abstract

Photoinduced electron transfer (PET) reaction between fluorescent dyes and amino acids or nucleobase can lead to fluorescence quenching of the dyes. Such fluorescence quenching reaction can affect the fluorescence properties especially when the dye is employed to probe the conformation of the biomolecular systems. In this project, we have studied the fluorescence quenching by PET reaction between the dye (7-methoxycoumarin, C-3H and 7-amino-4-methylcoumarin, C-120) and guanine base using molecular simulations. We focused on the transition of electronic states of the systems to obtain the absorption and fluorescence emission properties of free dyes and hydrogen-bonded dye-guanine complexes in two conditions; in vacuum and in water. We found that the spectroscopic properties of free C-3H and C-120 conform with the previous experimental studies. In addition, we found that the spectroscopic properties change when both dyes form hydrogen bonds with guanine base. The changes appear in terms of the wavelength for absorption and emission, as well as the transition probabilities from the ground state to the first and second excited states. The study of electron distribution in this project and the previous research are also in good agreement. Moreover, the charge calculation of the molecules in the systems suggest that if the electronic state of hydrogen-bonded dye-guanine complex changes, the intramolecular charge transfer will occur. Although, the PET reaction between each dye and guanine base has yet to be further investigated, the intramolecular charge transfer can at least explain the reduced fluorescence emission.