



โครงการ

การเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์

ชื่อโครงการ การดูดซับของคาเทชินบนพื้นผิวซิลิกา
Adsorption of catechin on silica surface

ชื่อนิสิต	นายจุลจิตต์ จิตรเจริญวรกิจ	เลขประจำตัว	5932909023
	นายวัชรศักดิ์ กลั่นประเสริฐ	เลขประจำตัว	5932959423

ภาควิชา เคมีเทคนิค

ปีการศึกษา 2562

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รายงาน SENIOR PROJECT

เรื่อง

การดูดซับของคาเทชินบนพื้นผิวซิลิกา

Adsorption of Catechin on Silica Surface

จัดทำโดย

นายจุลจิตต์ จิตรเจริญวรกิจ รหัสนิสิต 5932909023

นายวัชรศักดิ์ กลั่นประเสริฐ รหัสนิสิต 5932959423

อาจารย์ที่ปรึกษา

อาจารย์ ดร. มนัสวี สุทธิพงษ์

รายงานนี้เป็นส่วนหนึ่งของรายวิชา 2306499 SENIOR PROJECT

ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ปีการศึกษา 2562

บทคัดย่อ

ชื่อโครงการ การดูดซับของคาเทชินบนพื้นผิวซิลิกา
 ชื่อนิติผู้ทำโครงการ นายจุลจิตต์ จิตรเจริญวรกิจ 5932909023
 นายวัชรศักดิ์ กลั่นประเสริฐ 5932959423
 อาจารย์ที่ปรึกษา ดร.มนัสวี สุทธิพงษ์
 ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ปีการศึกษา 2562

บทคัดย่อ

ไบซาแห่งประกอบด้วยคาเทชิน (catechin) ซึ่งเป็นสารในกลุ่มสารประกอบฟีนอลิก (phenolic compounds) มีประโยชน์ต่อสุขภาพ เช่น ต้านออกซิเดชัน (antioxidant) ที่จับกับอนุมูลอิสระ ต้านมะเร็ง ลดความเสี่ยงโรคหลอดเลือดอุดตัน เป็นต้น ชนิดของคาเทชินที่พบมากที่สุดคือ อีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต ((-)-epigallocatechin-3-gallate, EGCG) ไบซาแห่งยังประกอบด้วยคาเฟอีน (caffeine) หากได้รับ caffeine มากเกินไปอาจทำให้ออนไม่หลับ ความดันโลหิตสูง ดังนั้นการแยก EGCG ออกจาก caffeine จึงได้รับความสนใจ งานวิจัยก่อนหน้านี้พบว่าซิลิกาที่มีรูพรุนขนาดกลาง (mesoporous silica) สามารถดูดซับ EGCG ได้ดี ทั้งนี้พฤติกรรมและอันตรกิริยาในระดับโมเลกุลระหว่าง EGCG กับพื้นผิวซิลิกา รวมทั้งพื้นผิวซิลิกาที่แปรด้วยหมู่เอมีน (amine-modified silica surface) มีอยู่จำกัด ข้อมูลดังกล่าวเป็นพื้นฐานความเข้าใจเชิงลึกเกี่ยวกับการดูดซับของ EGCG และอาจใช้เป็นแนวทางในการพัฒนาตัวดูดซับที่มีประสิทธิภาพ ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงได้ศึกษาพฤติกรรมของ EGCG และ caffeine ในน้ำและพฤติกรรมการดูดซับของ EGCG กับ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาและบนพื้นผิวซิลิกาที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีนด้วยการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล (molecular dynamics simulation) หมู่เอมีนที่ศึกษาคือ เอทิลีนไดเอมีน (ethylenediamine, EDA) ผลการวิจัยพบว่า EGCG มีสัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient) น้อยกว่า caffeine ในน้ำ เนื่องจากโมเลกุล EGCG มีขนาดใหญ่ เมื่อพิจารณาการดูดซับของ EGCG บนพื้นผิวซิลิกาพบว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG น้อยกว่า caffeine และมีแนวโน้มเดียวกับบนพื้นผิวซิลิกาที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีน EDA นั่นคือ EGCG สามารถดูดซับบนซิลิกาและซิลิกาที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีน EDA ได้ดีกว่า caffeine อันเป็นผลจากโมเลกุล EGCG มีอะตอมที่สามารถสร้างพันธะไฮโดรเจนกับพื้นผิวจำนวนมาก

คำสำคัญ: การดูดซับ, อีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต, พื้นผิวซิลิกา, เอทิลีนไดเอมีน, การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล

ภาควิชา เคมีเทคนิค
 ลายมือชื่อนิติ จุลจิตต์ จิตรเจริญวรกิจ
 ลายมือชื่อนิติ วัชรศักดิ์ กลั่นประเสริฐ
 สาขาวิชา เคมีวิศวกรรม
 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....

Abstract

Title Adsorption of catechin on silica surface

Names of Students Mr. Chulachit Chitcharoenwarakit 5932909023
Mr. Watcharasak Klanprasert 5932959423

Advisor Dr. Manaswee Suttipong

**Department of Chemical Technology, Faculty of Science, Chulalongkorn University,
Academic Year 2019**

ABSTRACT

Dry tea leaves contain catechins, which are phenolic compounds. Catechins are natural antioxidants that help prevent cell damage and provide other benefits such as anti-cancer, reductions in systemic blood pressure and thrombosis, and so on. Epigallocatechin ((-) - epigallocatechin-3-gallate, EGCG) is the major catechins. Dry tea leaves also contain caffeine, which can have disruption effects: insomnia and hypertension. Accordingly, separation and purification of EGCG has received attention. Previous research showed that EGCG can adsorb on mesoporous silica. However, fundamental understanding of adsorption behavior of EGCG at molecular level, as well as interactions between EGCG and adsorbents is limited. In this work, using molecular dynamics (MD) simulations, behavior of EGCG and caffeine in aqueous solution and adsorption of EGCG and caffeine on silica surface and amine-modified silica surface were investigated. The amine group: ethylenediamine (EDA) was considered. The simulation results showed that EGCG diffused in water slower than caffeine due to its larger molecular size. On silica surface and EDA-modified silica surface, EGCG molecule moves slower than caffeine, indicating that EGCG is more favorable to adsorb on these substrates, compared to caffeine molecule.

Keywords: Adsorption, EGCG, Silica, Ethylenediamine, Molecular dynamics simulation

กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัยนี้เป็นส่วนหนึ่งของการเรียนการสอนในวิชา 2306499 SENIOR PROJECT ระดับปริญญาตรี เพื่อสร้างเสริมประสบการณ์ของภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ประจำปี การศึกษา 2562 การดำเนินงานวิจัยนี้สามารถสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดีด้วยความอนุเคราะห์จากบุคคลหลาย ท่าน

คณะผู้วิจัยขอขอบพระคุณ อาจารย์ ดร. มนัสวี สุทธิพงษ์ อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการวิจัยที่ให้ คำปรึกษาเกี่ยวกับทฤษฎีของงานวิจัยให้กระจ่าง ให้คำแนะนำวิธีการทำงาน รวมถึงสอนให้แก้ไข ข้อผิดพลาด ขอขอบพระคุณอาจารย์ที่คอยดูแลเอาใจใส่และให้ความช่วยเหลือมาโดยตลอดทำให้งานวิจัยนี้สมบูรณ์

คณะผู้วิจัยขอขอบพระคุณ นายณัฐพงษ์ ธนธนานนท์ นิสิตปริญญาโท ภาควิชาเคมีเทคนิคที่ให้ คำปรึกษาเกี่ยวกับการใช้โปรแกรมในภาคปฏิบัติและให้ความช่วยเหลือในการให้คำแนะนำสำหรับการดำเนิน งานวิจัย

สุดท้ายขอขอบพระคุณ คุณชจรศักดิ์ ปิยักร ที่ให้ความช่วยเหลือในการใช้งานระบบคอมพิวเตอร์ สมรรถนะสูง (High Performance Computer, HPC) และศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์ แห่งชาติ (National Electronics and Computer Technology Center, NECTEC) ที่ได้ให้ความอนุเคราะห์ ชั่วโมงในการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูง

คณะผู้วิจัย

สารบัญ

เรื่อง	หน้า
บทคัดย่อ.....	ก
Abstract	ข
กิตติกรรมประกาศ	ค
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1. ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการเสนอโครงการ.....	1
1.2. วัตถุประสงค์ของการวิจัย	3
1.3. สมมุติฐาน	3
1.4. ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	3
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	4
2.1. สารประกอบในซาเซียว.....	4
2.1.1. ข้อมูลทั่วไป	4
2.1.2. คาเทซิน	4
2.1.3. คาเฟอีน	5
2.2. กระบวนการดูดซับ	6
2.2.1. การดูดซับทางกายภาพ	6
2.2.2. การดูดซับทางเคมี.....	6
2.3. เมโซพอร์สซิลิกา.....	7
2.4. การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล.....	7
2.4.1. สมการการเคลื่อนที่ (equations of motion).....	7
2.4.2. อัลกอริทึมกบกระโดด (The Leap-frog algorithm).....	7
2.4.3. เงื่อนไขขอบแบบคาบ (Periodic boundary condition)	8
2.4.4. ศักย์ระหว่างโมเลกุลแบบเลนนาร์ด-โจนส์ (Lennards-Jones potential).....	9
2.5. การคำนวณที่เกี่ยวข้อง.....	10

2.5.1.	ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD).....	10
2.5.2.	สัมประสิทธิ์การแพร่ (Diffusion coefficient).....	10
2.6.	งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	11
2.6.1.	การเปรียบเทียบการดูดซับของอีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต (epigallocatechin-3-gallate, EGCG) และคาเฟอีน (caffeine) ด้วยวัสดุรูพรุนที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีนที่ต่างกัน	11
2.6.2.	เมโซพอร์สซิลิกา ตัวดูดซับที่เป็นทางเลือกใหม่สำหรับสารประกอบพอลิฟีนอลในไวน์แดง	12
บทที่ 3 วิธีดำเนินงานวิจัย.....		14
3.1.	โปรแกรมที่เกี่ยวข้อง.....	14
3.1.1.	GROMACS.....	14
3.1.2.	PuTTY และ WinSCP.....	14
3.1.3.	Material Studio.....	14
3.1.4.	VMD.....	14
3.1.5.	MATLAB R2018a.....	14
3.1.6.	EditPad Lite 7.....	15
3.2.	วิธีการดำเนินงานวิจัย.....	15
3.2.1.	ข้อมูลสำคัญก่อนการจำลอง.....	15
3.2.2.	ระบบการจำลอง.....	22
บทที่ 4 ผลการทดลองและวิจารณ์ผลการทดลอง.....		24
4.1.	พฤติกรรมของ EGCG และ caffeine ในน้ำ.....	24
4.1.1.	ภาพการจำลองของ EGCG และ caffeine ในน้ำ.....	24
4.1.2.	ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD).....	26
4.1.3.	สัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient, D).....	29
4.2.	พฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกา.....	30
4.2.1.	ภาพการจำลองของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกา.....	30
4.2.2.	ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD).....	32

4.2.3.	สัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient, D)	35
4.3.	พฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน	36
4.3.1.	ภาพการจำลองของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน	36
4.3.2.	ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD)	38
4.3.3.	สัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient, D)	41
บทที่ 5	สรุปผลการวิจัย	42
เอกสารอ้างอิง	43

บทที่ 1

บทนำ

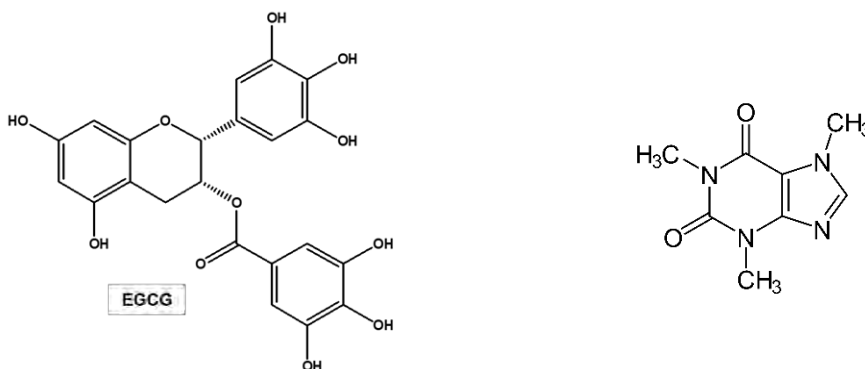
1.1. ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการเสนอโครงการ

ปัจจุบันชาเป็นพืชเศรษฐกิจที่สำคัญทางภาคเหนือของประเทศไทยที่ภาครัฐส่งเสริมให้มีการปลูกแทนที่ฝิ่น สามารถทำรายได้มากกว่าปีละ 8000 ล้านบาท ในช่วง 5 ปีที่ผ่านมา (ปี 2554-2558) เนื้อที่และผลผลิตเพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่อง [1] ใบชามีองค์ประกอบทางเคมีมากมาย โดยมีองค์ประกอบหลักคือฟลาโวนอล (flavanols) หรือคาเทชิน (catechin) คาเทชินเป็นสารในกลุ่มสารประกอบฟีนอลิก (phenolic compounds)

Components	Dry weight (%)
Flavanols	18-32
(-)-EGCG	9-14
(-)-EGC	4-7
(-)-ECG	2-4
(-)-EC	1-3
(+)-GC	1-2
(+)-C	0.5-1
Flavonal glucosides	3-4
Proanthocyanidins	2-3
Caffeine	3-4
Amino acids	2-4
Carbohydrates	3-5
Organic acids	0.5-2
Saponins	0.04-0.07
Pigments	0.5-0.8
Vitamins	0.6-1.0
Soluble minerals	2-4
Cellulose	6-8
Lignin	4-6
Polysaccharides	4-10
Lipids	2-4
Insoluble pigments	0.5
Insoluble minerals	1.5-3.0
Volatiles	0.01-0.02

รูปที่ 1.1 องค์ประกอบทางเคมีในใบชาสด ที่มา สถาบันชาและกาแฟ แห่งมหาวิทยาลัยแม่ฟ้าหลวง [2]

คาเทชินเป็นสารที่ต้องการในวงการอาหารเสริมเพื่อสุขภาพและทางการแพทย์ เนื่องจากต้านออกซิเดชัน (antioxidant) ที่จับกับอนุมูลอิสระ ต้านมะเร็ง [3] ลดความเสี่ยงโรคหลอดเลือดอุดตัน รวมถึงลดความอ้วนได้เนื่องจากกำจัดไขมันชนิดไตรกลีเซอไรด์ในเลือด [4] สารที่พบมากที่สุดในคาเทชินคือ อีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต ((-)-epigallocatechin-3-gallate, EGCG) [5] นอกจากนี้ในใบชาประกอบด้วยคาเฟอีน (caffeine) โครงสร้างทางเคมีของโมเลกุล EGCG และ caffeine แสดงในรูปที่ 1.2 การได้รับ caffeine ปริมาณมากทำให้ออนไม่หลับ ความดันโลหิตสูง เป็นต้น



รูปที่ 1.2 โครงสร้างทางเคมีของ ((-)-epigallocatechin-3-gallate, EGCG) และ Caffeine

จากข้างต้นการหาวิธีการแยก EGCG ออกจากใบชาโดยให้ caffeine ปะปนน้อยจึงเป็นที่สนใจ ซิลิกาที่มีรูพรุนขนาดกลาง (mesoporous silica) สามารถใช้เป็นตัวดูดซับ EGCG ได้อย่างมีประสิทธิภาพ เช่น การดูดซับ EGCG ในไวน์แดง [6] หรือการดูดซับ EGCG จากกระบวนการผลิตน้ำมันมะกอก [7] เป็นต้น นอกจากนี้ยังพบว่า การดัดแปรพื้นผิวซิลิกาด้วยหมู่เอมีนสามารถดูดซับได้ดีขึ้น เนื่องจากพื้นผิวซิลิกามีพื้นที่ในการดูดซับจำกัด ทำให้โมเลกุล EGCG บางโมเลกุลไม่สามารถสร้างพันธะไฮโดรเจน (hydrogen bond) กับซิลิกาได้ การดัดแปรพื้นผิวด้วยหมู่เอมีนสามารถเพิ่มพื้นที่ในการดูดซับมากขึ้น ส่งผลให้การดูดซับดีขึ้น [8,9]

อย่างไรก็ตามพฤติกรรมและอันตรกิริยาในระดับโมเลกุลระหว่าง EGCG กับพื้นผิวซิลิกา รวมทั้งพื้นผิวซิลิกาที่แปรด้วยหมู่เอมีน (amine-modified silica surface) มีอยู่จำกัด ข้อมูลดังกล่าวเป็นพื้นฐานความเข้าใจเชิงลึกเกี่ยวกับการดูดซับของ EGCG และอาจใช้เป็นแนวทางในการพัฒนาตัวดูดซับที่มีประสิทธิภาพ งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาพฤติกรรมของโมเลกุล EGCG กับ caffeine ในน้ำและศึกษาพฤติกรรมการดูดซับ EGCG กับ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาและบนพื้นผิวซิลิกาที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีนด้วยการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล (molecular dynamics simulation) หมู่เอมีนที่ศึกษาคือ เอทิลีนไดเอมีน (ethylenediamine, EDA)

1.2. วัตถุประสงค์ของการวิจัย

- ศึกษาพฤติกรรมของ EGCG และ caffeine ในน้ำ
- ศึกษาพฤติกรรมการดูดซับ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาและบนพื้นผิวซิลิกาที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีน หมู่เอมีนที่ศึกษาคือเอทิลีนไดเอมีน (ethylenediamine, EDA)

1.3. สมมุติฐาน

- ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG น้อยกว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ caffeine เนื่องจากขนาดโมเลกุลของ EGCG ใหญ่กว่า caffeine
- การดัดแปรพื้นผิวซิลิกาด้วยเอทิลีนไดเอมีนจะลดค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG และ caffeine ได้ เนื่องจากหมู่เอมีนสามารถเหนี่ยวนำให้เกิดพันธะไฮโดรเจนระหว่างโมเลกุลที่ถูกดูดซับกับตัวดูดซับ

1.4. ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

- ทราบถึงพฤติกรรมการเคลื่อนของโมเลกุล EGCG และ caffeine ในน้ำ
- ทราบถึงผลของการดัดแปรพื้นผิวด้วยค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ว่าทำให้เกิดการดูดซับ EGCG และคาเฟอีนเพิ่มขึ้นหรือไม่
- นำผลการทดลองที่ได้เป็นพื้นฐานในการพัฒนาตัวดูดซับเพื่อแยก EGCG

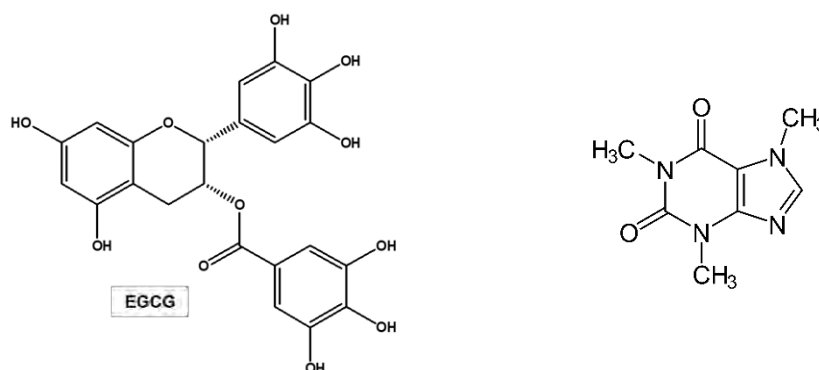
บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1. สารประกอบในชาเขียว

2.1.1. ข้อมูลทั่วไป

ใบชาแห้งเตรียมได้โดยการนำใบชาสดมาผ่านความร้อนเพื่อให้แห้งอย่างรวดเร็ว ความร้อนจะช่วยยับยั้งการทำงานของเอนไซม์ทำให้ไม่เกิดการสลายตัว ทำให้ได้ใบชาที่แห้งแต่ยังคงสดอยู่และยังมีสีที่ค่อนข้างเขียว สารสำคัญที่พบได้ในชาเขียวได้แก่ กรดอะมิโน วิตามินบี วิตามินซี วิตามินอีและสารในกลุ่มแซนทีนอัลคาลอยด์ (xanthine alkaloids) คือ คาเฟอีน (caffeine) และธีโอฟิลลีน (theophylline) ซึ่งมีฤทธิ์กระตุ้นการทำงานของระบบประสาทส่วนกลางส่งผลให้ร่างกายรู้สึกกระปรี้กระเปร่า และสารในกลุ่มฟลาโวนอยด์ (flavonoids) ที่เรียกว่า คาเทชิน (catechin) คาเทชินที่พบมากที่สุดใบชาเขียวคือสารอีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต ((-)-epigallocatechin-3-gallate, EGCG) ซึ่งมีความสำคัญในการออกฤทธิ์ต้านอนุมูลอิสระ

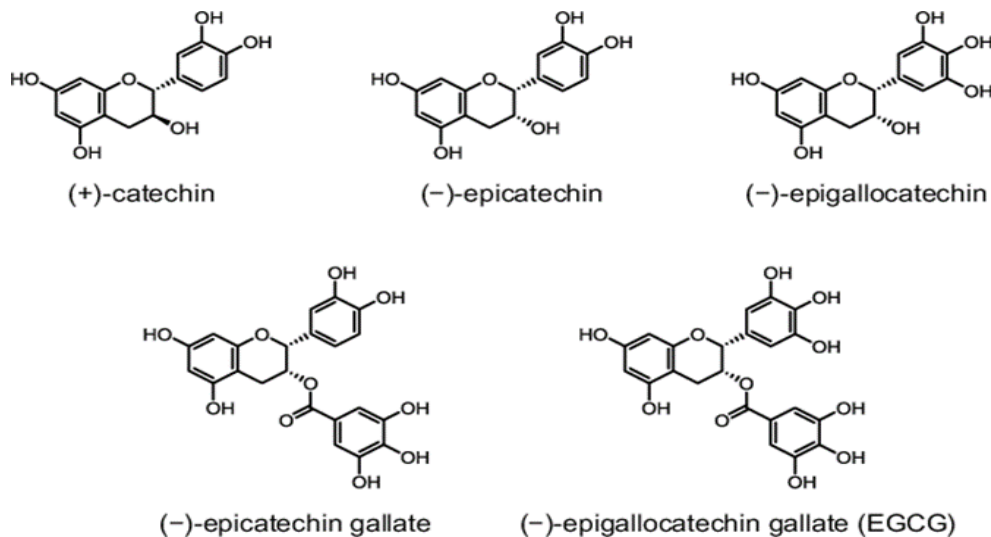


รูปที่ 2.1 โครงสร้างทางเคมีของ epigallocatechin-3-gallate (EGCG) และ Caffeine

2.1.2. คาเทชิน

คาเทชิน (catechin) คือ สารออกฤทธิ์สำคัญที่อยู่ในชาเขียว (และในใบชาชนิดต่างๆ) ประกอบไปด้วยอีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต (epigallocatechin-3-gallate, EGCG) อีพิกคาเทชินกัลเลต (epicatechin-3-gallate) อีพิกคาเทชิน (epicatechin) อีพิกัลโลคาเทชิน (epigallocatechin) กัลโลคาเทชินกัลเลต (gallocatechin gallate) และคาเทชิน (catechin) ดังแสดงในรูปที่ 2 ในทั้งหมดนี้ สารที่มีมากที่สุดคือ EGCG ซึ่งจัดเป็นสารต้านอนุมูลอิสระจากธรรมชาติที่มีประสิทธิภาพสูงที่สุดในชาเขียวและมีปริมาณมากที่สุด มีความแรงของการต้านอนุมูลอิสระมากกว่าวิตามินซีและวิตามินอี 25-

100 เท่า จากผลการศึกษาวิจัยคุณสมบัติของชาเขียวพบว่าชาเขียวมีประโยชน์ต่อสภาวะทางสุขภาพร่างกายหลายประการเช่น ช่วยในการควบคุมระดับน้ำตาลในเลือด



รูปที่ 2.2 โครงสร้างทางเคมีของคาเทชิน

2.1.3. คาเฟอีน

คาเฟอีน (caffeine) เป็นสารกลุ่มแซนทีนอัลคาลอยด์ (xanthine alkaloids) ซึ่งอยู่ในตระกูลเดียวกันกับสารประกอบธีโอฟิลลีน (theophylline) ในสถานะบริสุทธิ์จะมีสีขาวเป็นผงและมีรสขมจัด สูตรทางเคมีคือ $C_8H_{10}N_4O_2$ เมื่อคาเฟอีนเข้าสู่ร่างกายจะทำให้มีการเพิ่มการทำงานของสารสื่อประสาทโดปามีน (dopamine) ซึ่งทำให้สมองเกิดการตื่นตัว นอกจากนี้พบว่าอาจจะมีการเพิ่มปริมาณของซีโรโทนิน (serotonin) ซึ่งมีผลต่ออารมณ์ของผู้บริโภคทำให้รู้สึกพึงพอใจและมีความสุขมากขึ้น อย่างไรก็ตามสมองจะมีการตอบสนองต่อคาเฟอีนโดยการเพิ่มปริมาณของตัวรับแอดิโนซีน ทำให้ฤทธิ์ของคาเฟอีนในการบริโภคครั้งต่อไปลดลง เราเรียกภาวะนี้ว่าภาวะทนต่อคาเฟอีน (caffeine tolerance) และทำให้ผู้บริโภคต้องการคาเฟอีนมากขึ้นเพื่อให้เกิดผลต่อร่างกาย ผลอีกประการที่เกิดจากการที่สมองเพิ่มปริมาณของตัวรับแอดิโนซีน นั่นคือทำให้ร่างกายไวต่อปริมาณแอดิโนซีนที่ผลิตตามปกติมากขึ้น อย่างไรก็ตามคาเฟอีนมิได้ลดความต้องการนอนหลับของสมอง เพียงแต่ลดความรู้สึกเหนื่อยล้าลงเท่านั้น [10]

2.2. กระบวนการดูดซับ

การดูดซับ เป็นความสามารถของสารดูดซับ (adsorbent) ในการดึงโมเลกุลหรือคอลลอยด์ (adsorbate) ที่อยู่ในสถานะแก๊สหรือของเหลวให้มาเกาะติดบนพื้นผิวของสารดูดซับ ซึ่งกระบวนการดูดซับนี้สามารถเกิดขึ้นระหว่างพื้นผิว 2 ภูมิภาคเช่น แก๊สกับของเหลว แก๊สกับของแข็ง ของเหลวกับของเหลว หรือของเหลวกับของแข็ง โดยกระบวนการดูดซับแบ่งเป็น 2 ประเภท คือ การดูดซับทางกายภาพ (physical adsorption) และการดูดซับทางเคมี (chemical adsorption) [11]

2.2.1. การดูดซับทางกายภาพ

เป็นการดูดซับที่เกิดจากแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลอย่างอ่อน คือ แรงแวนเดอร์วาลส์ (vander waals forces) ซึ่งเกิดจากการรวมแรง 2 ชนิด คือ แรงกระจาย (london dispersion force) และแรงไฟฟ้าสถิตย์ (electrostatic force) การดึงดูดด้วยแรงที่อ่อนทำให้การดูดซับประเภทนี้มีพลังงานการคายความร้อนค่อนข้างน้อยคือ ต่ำกว่า 20 กิโลจูลต่อโมลและสามารถเกิดการผันกลับของกระบวนการได้ง่าย ซึ่งเป็นข้อดีเพราะสามารถฟื้นฟูสภาพของตัวดูดซับได้ง่ายด้วย สารที่ถูกดูดซับสามารถเกาะอยู่รอบ ๆ ผิวของสารดูดซับได้หลายชั้น (multilayer) หรือในแต่ละชั้นของโมเลกุล สารถูกดูดซับจะติดอยู่กับชั้นของโมเลกุลของสารถูกดูดซับในชั้นก่อนหน้า โดยจำนวนชั้นจะเป็นสัดส่วนกับความเข้มข้นของสารถูกดูดซับและจะเพิ่มมากขึ้นตามความเข้มข้นที่สูงขึ้นของตัวถูกละลายในสารละลาย

2.2.2. การดูดซับทางเคมี

การดูดซับประเภทนี้เกิดขึ้นเมื่อตัวถูกละลายกับตัวดูดซับทำปฏิกิริยาเคมีกัน ซึ่งส่งผลให้เกิดการเปลี่ยนแปลงทางเคมีของตัวถูกละลายเดิมคือมีการทำลายแรงยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอมหรือกลุ่มอะตอมเดิมแล้วมีการจัดเรียงอะตอมไปเป็นสารประกอบใหม่ขึ้น โดยมีพันธะเคมีซึ่งเป็นพันธะที่แข็งแรง มีพลังงานกระตุ้นเข้ามาเกี่ยวข้องทำให้ความร้อนของการดูดซับมีค่าสูงประมาณ 50-400 KJ/mol หมายความว่า การกำจัดตัวถูกละลายออกจากผิวตัวดูดซับจะทำได้ยากคือไม่สามารถเกิดปฏิกิริยาผันกลับได้ (irreversible) และการดูดซับประเภทนี้จะเป็นการดูดซับแบบชั้นเดียว (monolayer) เท่านั้น

2.3. เมโซพอร์ซิลิกา

เมโซพอร์ซิลิกา (mesoporous silica) คือของแข็งอนินทรีย์ที่มีรูพรุนอยู่ตรงกลาง จัดเป็นวัสดุนาโนชนิดหนึ่งซึ่งมีรูพรุนเรียงกันอย่างสม่ำเสมอบนพื้นผิว วัสดุอนินทรีย์ที่มีรูพรุนสามารถแบ่งได้เป็น 3 ประเภท ได้แก่ วัสดุที่มีรูพรุนขนาดเล็ก (< 2 นาโนเมตร) วัสดุรูพรุนขนาดกลาง (2-50 นาโนเมตร) วัสดุรูพรุนขนาดใหญ่ (>50 นาโนเมตร) โดยวัสดุรูพรุนที่มีการใช้อย่างแพร่หลายในงานดูดซับคือวัสดุรูพรุนขนาดเล็กและขนาดกลางเช่น Mobil Composition of Matter No. 41 (MCM-41) และ Santa Barbara Amorphous-15 (SBA-15) เนื่องจากมีการกระจายขนาดของรูพรุนแคบและรูพรุนมีความเป็นระเบียบสูง จึงนิยมนำมาใช้เป็นตัวดูดซับและตัวรองรับตัวเร่งปฏิกิริยา [12]

ปัจจุบันมีผู้ให้ความสนใจในการสังเคราะห์เมโซพอร์ซิลิกาอย่างแพร่หลาย วิธีการหลัก ๆ ที่ใช้ในการสังเคราะห์เมโซพอร์ซิลิกาประกอบด้วยเคมีไมเซลล์ (micelle chemistry) กระบวนการโซล-เจล (sol-gel process) และการอบแห้งและการเผาที่อุณหภูมิสูง (drying and calcination)

2.4. การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล

การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลเป็นรูปแบบหนึ่งของการจำลองทางคอมพิวเตอร์ โดยให้อะตอมหรือโมเลกุลเกิดปฏิกริยาระหว่างกันในช่วงเวลาหนึ่ง เพื่อศึกษาการเคลื่อนที่ของอะตอม เนื่องจากระบบโมเลกุลประกอบด้วยอนุภาคจำนวนมากจึงเป็นได้ยากที่จะหาสมบัติของระบบนั้นๆ

สำหรับการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลเพื่อคำนวณสมบัติต่าง ๆ ของระบบ สามารถทำได้โดยการใช้สมการการเคลื่อนที่ (equations of motion) ผ่าน force field ทำให้สมการการคำนวณมีจำนวนมาก

2.4.1. สมการการเคลื่อนที่ (equations of motion)

แนวคิดพื้นฐานในการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล คือสมการการเคลื่อนที่ ซึ่งเป็นไปตามกฎการเคลื่อนที่ข้อที่สองของนิวตันซึ่งแสดงในสมการที่ (1)

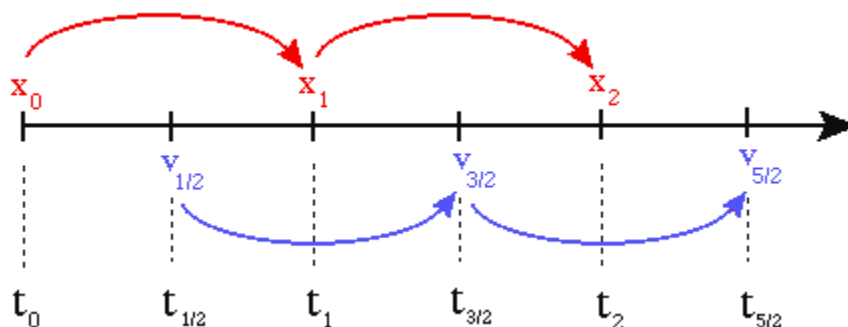
$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{a} \quad (1)$$

2.4.2. อัลกอริทึมกบกระโดด (The Leap-frog algorithm)

อัลกอริทึมกบกระโดด ใช้ในการอินทิเกรตสมการการเคลื่อนที่ ตำแหน่ง ความเร็ว และความเร่ง โดยคำนวณจากสมการที่ (2) และ (3)

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \Delta t \vec{v}_i \left(t + \frac{1}{2} \Delta t \right) \quad (2)$$

$$\vec{v}_i \left(t + \frac{1}{2} \Delta t \right) = \vec{v}_i \left(t - \frac{1}{2} \Delta t \right) + \Delta t \vec{a}_i(t) \quad (3)$$

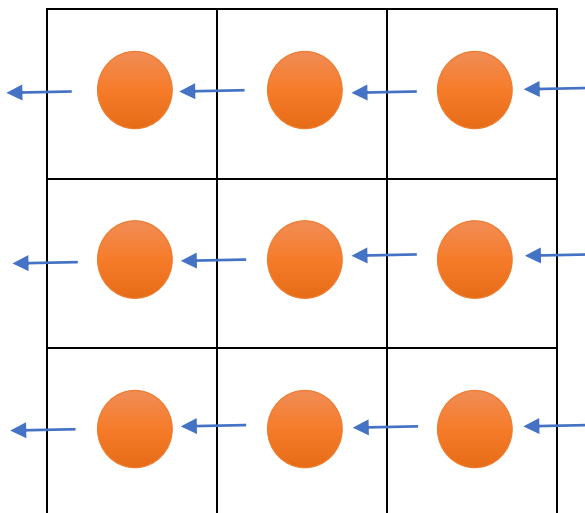


รูปที่ 2.3 หลักการคำนวณของ Leap-frog algorithm

อัลกอริทึมกบกระโดดให้ข้อมูลของพิกัดตำแหน่งในช่วงเวลาหนึ่ง (time step) ที่นำมาใช้วิเคราะห์ผล ซึ่งการปรับระยะเวลาให้เหมาะสมของขั้นตอนเวลาเป็นสิ่งที่ขาดไม่ได้สำหรับการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล เนื่องจากการใช้ช่วงเวลาที่น้อยเกินไป จะทำให้จำนวนครั้งที่มีการคำนวณถึงขั้นการจำลองต้องใช้เวลาในการคำนวณจำนวนมากสำหรับข้อมูลการวิเคราะห์ แต่ถ้าใช้ช่วงเวลาที่มากเกินไป ทำให้ความถี่ของข้อมูลน้อย พลังงานในสมการการเคลื่อนที่จะเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว ทำให้ผลการทดลองที่ได้ไม่ตรงหรือข้ามผลที่สำคัญไป ในงานวิจัยนี้ใช้ช่วงเวลาแต่ละครั้งในการพิจารณาคือ 0.002 พิโควินาที ในการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลทั้งหมด

2.4.3. เงื่อนไขขอบเขตคาบ (Periodic boundary condition)

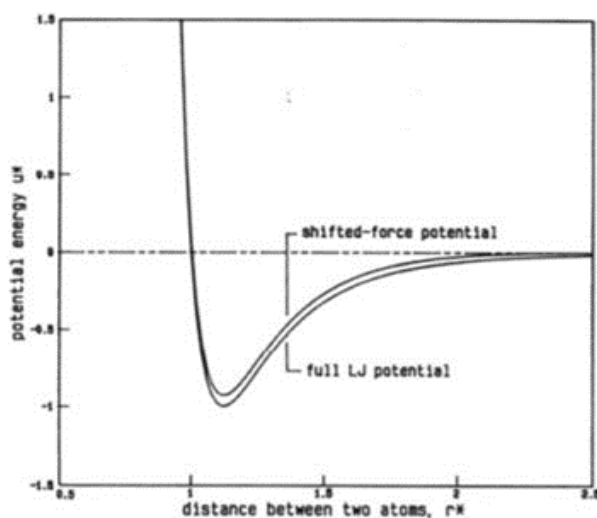
เงื่อนไขขอบเขตแบบ เป็นองค์ประกอบสำคัญที่ใช้ในการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล ดังแสดงในกล่องกลางในรูปที่ 2.1 เงื่อนไขขอบเขตแบบคาบสามารถลบผลกระทบขอบเขตจากระบบที่มีขนาดจำกัด หลังจากมีการใช้เงื่อนไขขอบเขตแบบคาบการเคลื่อนที่ของอะตอมในกล่องจำลองจะเป็นไปในทิศทางเดียวกับอะตอมโดยรอบ ตัวอย่างเช่นกล่องจำลองตรงกลางที่สร้างจากระบบขนาดใหญ่ อะตอมสี่ล้อมถูกย้ายออกไปทางซ้ายจากกล่องจำลอง แต่ในเวลาเดียวกันอะตอมสี่ล้อมอื่น สามารถเข้าสู่กล่องที่อยู่ทางด้านซ้ายได้ ดังนั้นสภาพขอบเขตทางกายภาพของกล่องจำลองจึงไม่เปลี่ยนแปลง



รูปที่ 2.4 ตัวอย่างเงื่อนไขขอบแบบคาบในระบบสองมิติ

2.4.4. ศักย์ระหว่างโมเลกุลแบบเลนาร์ด-โจนส์ (Lennards-Jones potential)

เป็นศักย์ระหว่างอนุภาคที่กล่าวไว้ว่า อนุภาคที่เป็นกลางทางไฟฟ้าจะมีแรงกระทำ 2 แบบซึ่งขึ้นกับระยะห่างระหว่างอนุภาคดังแสดงในรูปที่ 2.5 โดยจะมีแรงดูดเมื่ออนุภาคอยู่ห่างกันมาก (แรงวันเดอวาลล์) และแรงผลักเมื่ออนุภาคอยู่ใกล้เกินระยะที่กำหนด



รูปที่ 2.5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างแรงที่กระทำระหว่างอนุภาคกับระยะห่างระหว่างอนุภาค [13]

2.5. การคำนวณที่เกี่ยวข้อง

2.5.1. ระยะเวลาเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD)

ระยะเวลาเฉลี่ยกำลังสองเป็นปริมาณสำคัญที่ถูกใช้วิเคราะห์ว่าพลศาสตร์ของอนุภาคที่เราสนใจว่ามีลักษณะการเคลื่อนที่เป็นอย่างไรและสามารถแปลผลออกมาทางกายภาพและชีวภาพได้อย่างไร เช่น อนุภาคเคลื่อนอย่างไรอิสระ, เคลื่อนที่โดยถูกหน่วง, เคลื่อนที่แบบมีจังหวะเวลาหน่วงอันเนื่องปัจจัยภายนอกหรือปฏิสัมพันธ์ของอนุภาคเอง เป็นต้น โดยค่าระยะเวลาเฉลี่ยกำลังสองเป็นการวัดความเบี่ยงเบนของตำแหน่งของอนุภาคที่เทียบกับตำแหน่งอ้างอิงเมื่อเวลาเปลี่ยนแปลงไป ดังแสดงในสมการที่ (4) ค่าระยะเวลาเฉลี่ยกำลังสองจะบอกถึงการระยะทางที่โมเลกุลที่สนใจเคลื่อนที่ในช่วงเวลาหนึ่ง ถ้าระยะเวลาเฉลี่ยกำลังสองของโมเลกุลที่สนใจมีมากหมายถึง เคลื่อนที่ได้มากในช่วงระยะเวลาหนึ่ง โดยค่าระยะเวลาเฉลี่ยกำลังสองที่คำนวณได้จะถูกนำไปใช้ต่อในการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่

$$MSD \equiv \langle (x - x_0)^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n(t) - x_n(0))^2 \quad (4)$$

โดยที่

N คือ จำนวนอนุภาคที่ทำการเฉลี่ย,

x คือ ตำแหน่งเฉลี่ยของทุกอนุภาค

x_0 คือ ตำแหน่งอ้างอิงของทุกอนุภาค

$x_n(t)$ คือ ตำแหน่งที่เวลาใดๆ ของแต่ละอนุภาค

$x_n(0)$ คือ ตำแหน่งอ้างอิงของแต่ละอนุภาค

2.5.2. สัมประสิทธิ์การแพร่ (Diffusion coefficient)

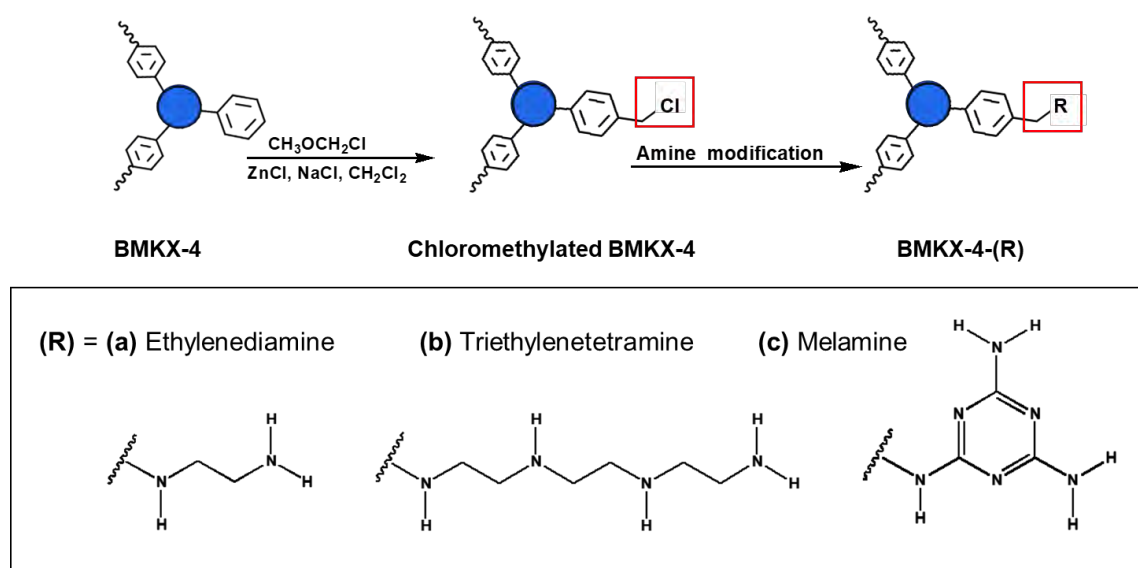
สัมประสิทธิ์การแพร่เป็นตัวแปรที่แสดงถึงความเร็วในการเคลื่อนที่ของอนุภาคสามารถคำนวณจาก ระยะเวลาเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD) โดยใช้ความสัมพันธ์ของ Einstein ดังแสดงในสมการที่ (5) กล่าวคือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่จะบอกถึงความเร็วของโมเลกุลที่สนใจ ถ้าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโมเลกุลที่สนใจที่ค่ามาก หมายถึงถ้าโมเลกุลนั้นมีความเร็วในการเคลื่อนที่มาก การดูดซับจะไม่ดี ขณะที่โมเลกุลนั้นมีความเร็วในการเคลื่อนที่น้อย การดูดซับจะดี

$$D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d(MSD)}{dt} \quad (5)$$

2.6. งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.6.1. การเปรียบเทียบการดูดซับของอีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต (epigallocatechin-3-gallate, EGCG) และคาเฟอีน (caffeine) ด้วยวัสดุพอร์นที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีนที่ต่างกัน [9]

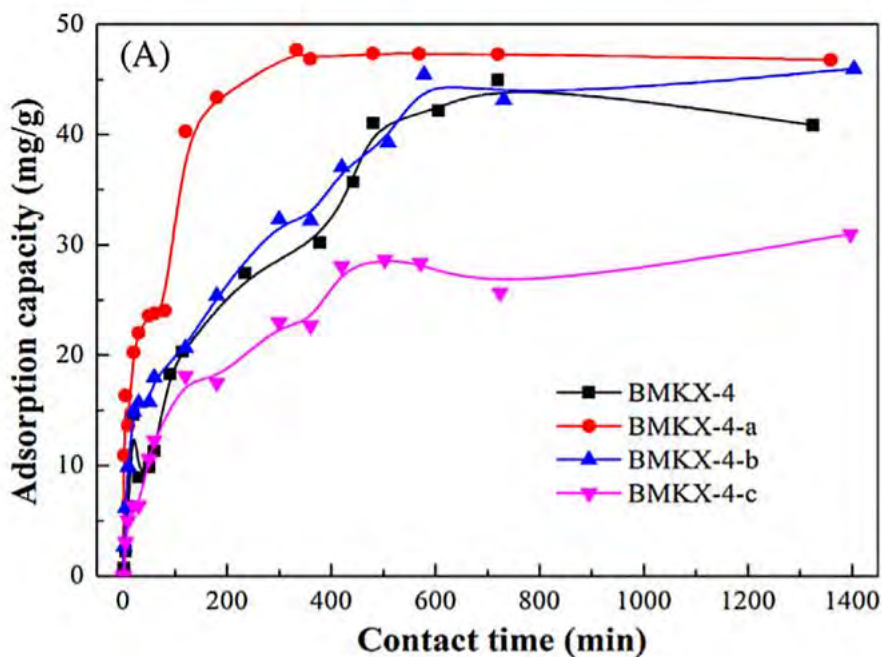
Yi Liu และคณะผู้วิจัย ศึกษาการดูดซับ EGCG ในใบชาแห้งบนวัสดุพอร์นเรซิน ซึ่งถูกสังเคราะห์ด้วยกระบวนการ co-polymerization ระหว่าง styrene กับ divinylbenzene มีชื่อว่า BMKX-4 และทำการดัดแปรเอมีนโมเลกุลที่แตกต่างกันสามชนิดลงบนเรซินได้แก่ ethylenediamine triethylenetetramine และ melamine มีชื่อว่า BMKX-4-(a) BMKX-4-(b) และ BMKX-4-(c) ตามลำดับ



รูปที่ 2.6 กระบวนการสังเคราะห์วัสดุพอร์นเรซินและวัสดุพอร์นเรซินที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีนที่ต่างกัน 3 ชนิด [9]

จากการศึกษาลักษณะพื้นผิว ได้เปรียบเทียบจำนวนรูพรุนพบว่า BMKX-4-(a) มีรูพรุนมากกว่า BMKX-4-(b) และ BMKX-4-(c) จากการศึกษาน้ำหนักของเอมีนที่ดัดแปรพบว่า BMKX-4-(b) มีน้ำหนักเอมีนมากกว่า BMKX-4-(a) และ BMKX-4-(c) สุดท้ายคือแนวโน้มของความสามารถในการดูดซับของ EGCG จากรูปที่ 2.7 เป็นกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความสามารถในการดูดซับ EGCG กับเวลา พบว่าความสามารถในการดูดซับของวัสดุพอร์นแต่ละชนิดเป็นดังนี้ $\text{BMKX-4-(a)} > \text{BMKX-4-(b)} = \text{BMKX-4} > \text{BMKX-4-(c)}$ Liu ได้อธิบายว่า การที่ BMKX-4-(c) ดูดซับโมเลกุล EGCG ได้น้อยเพราะโครงสร้างของ melamine มีขนาดใหญ่ทำให้กระบวนการดูดซับ และอธิบายเพิ่มว่าไม่ใช่หมู่เอมีนอย่างเดียวที่มีผล แต่ลักษณะทางกายภาพอื่น ๆ ก็มีผลต่อการดูดซับเช่น ขนาดรูหรือช่องว่าง

ที่จับกันได้ของสาร สรุปลงได้ว่าการดูดซับต้องอาศัยปัจจัยทางกายภาพและทางเคมี



รูปที่ 2.7 ผลของการดูดซับ EGCG เทียบกับเวลา [9]

2.6.2. เมโซพอร์สซิลิกา ตัวดูดซับที่เป็นทางเลือกใหม่สำหรับสารประกอบฟีนอลในไวน์แดง [6]

Cotea และคณะผู้วิจัยได้ทดสอบความสามารถการดูดซับสารประกอบฟีนอลิกในไวน์แดง ด้วย mesoporous silica (SBA-15) ศึกษาการดูดซับ polyphenol ในไวน์แดง ใช้ adsorbent เป็น mesoporous silica (SBA-15) โดยสังเคราะห์ด้วยวิธี hydrothermal synthesis ที่สภาวะเป็นกรด โดยใช้ไวน์ 500ml ใส่ SBA-15 4.0273g ผสมกัน 30 นาที และทิ้งไว้ 24 ชม. จากนั้นให้นำ SBA-15 ที่ดูดซับออกมา และทิ้งข้ามคืนให้แห้ง แล้วใส่ methanol เพื่อสกัดสารประกอบฟีนอลิกออกมา พบว่าในสารประกอบฟีนอลิกนั้น SBA-15 สามารถดูดซับคาเทชินออกมาได้มากถึง 32.10593 ± 0.03 มิลลิกรัมต่อลิตร ดังแสดงในรูปที่ 2.8 จากการทดลองนี้พบว่า SBA-15 เป็นตัวดูดซับอีกชนิดที่เป็นทางเลือกที่ดีในการดูดซับสารประกอบฟีนอลิกในวัตถุดิบธรรมชาติ รวมถึงใบชายังมีสารประกอบฟีนอลิกเช่นกัน

Polyphenolic constituents in Cabernet Sauvignon and methanolic extract.

Compound	Red wine Cabernet Sauvignon (mg L ⁻¹)(±SD)	Extract (mg L ⁻¹)(±SD)
Gallic acid	2.79964 ± 0.03	0.3862579 ± 0.02
Protocatechuic acid	0.09572 ± 0.02	1.01173 ± 0.05
<i>para</i> -Hydroxybenzoic acid	0.02771 ± 0.02	0.40283 ± 0.04
Gentisic acid	9.93011 ± 0.05	0.78656 ± 0.03
<i>meta</i> -Hydroxybenzoic acid	0.16489 ± 0.01	11.83798 ± 0.02
Vanillic acid	0.06986 ± 0.02	1.17877 ± 0.01
Catechin	4.35861 ± 0.05	32.10593 ± 0.03
Caffeic acid	0.09329 ± 0.04	1.44511 ± 0.04
Chlorogenic acid	0.15773 ± 0.03	2.02355 ± 0.05

รูปที่ 2.8 ส่วนประกอบของ polyphenolic ในไวน์ Cabernet Sauvignon และใน methanol ที่สกัดออกมา [6]

บทที่ 3

วิธีดำเนินงานวิจัย

3.1. โปรแกรมที่เกี่ยวข้อง

ระบบการจำลองทั้งหมดในงานวิจัยนี้ใช้โปรแกรม GROMACS รุ่น 5.0.4 ในการศึกษา โดยถูกติดตั้งและจำลองผ่านระบบเครื่องคอมพิวเตอร์ที่มีประสิทธิภาพสูง (HPC) ที่ตั้งอยู่ที่ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (NECTEC)

3.1.1. GROMACS

GROMACS เวอร์ชัน 5.0.4 เป็นโปรแกรมที่เป็นที่นิยมสำหรับการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลเพื่อใช้ในการคำนวณหาค่าคงที่ เพื่อศึกษาการเคลื่อนที่ ลักษณะ และการเข้าทำปฏิกิริยาระหว่างโมเลกุล ในการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลนั้นต้องมีไฟล์สำคัญ 5 ไฟล์ ซึ่งจะกล่าวต่อไปในหัวข้อ 3.2.1. โดยโปรแกรมนี้ได้เชื่อมต่อกับคอมพิวเตอร์สมรรถภาพสูงของศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (NECTEC)

3.1.2. PuTTY และ WinSCP

PuTTY และ WinSCP เป็นโปรแกรมสำหรับการเชื่อมต่อระหว่างคอมพิวเตอร์กับระบบคอมพิวเตอร์ที่มีประสิทธิภาพสูง (High-performance computer connected software, HPC) ของศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (NECTEC) เนื่องจากการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลต้องใช้คอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงในการประมวลผลทั้งหมด

3.1.3. Material Studio

Material Studio 2107 เป็นโปรแกรมพื้นฐานสำหรับการเขียนโครงสร้างโมเลกุลบนระบบปฏิบัติการ window 7, 8 เพื่อนำพิกัดของแต่ละอะตอมในโมเลกุลใช้ในการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล

3.1.4. VMD

Visual Molecular Dynamics (VMD) เป็นโปรแกรมที่ใช้แสดงภาพเคลื่อนไหวและลักษณะการเคลื่อนที่ของโมเลกุลหลังจากการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล

3.1.5. MATLAB R2018a

MATLAB R2018a เป็นโปรแกรมสนับสนุนเพื่อเขียนโค้ดจำนวนมากอัตโนมัติเพื่ออำนวยความสะดวกและลดระยะเวลาในการเขียนโค้ด

3.1.6. EditPad Lite 7

EditPad Lite 7 เป็นโปรแกรมใช้สำหรับแก้ไขข้อความ และโค้ด มีคุณภาพสูงและสามารถแสดงผลได้ไว รวมถึงมีระบบการค้นหาและแทนที่คำได้อย่างแม่นยำ ใช้เพื่อสร้างไฟล์ทั้งหมดที่จำเป็นสำหรับการจำลองพลศาสตร์โมเลกุล

3.2. วิธีการดำเนินงานวิจัย

ในงานวิจัยได้แบ่งออกเป็น 3 ตอนคือ ตอนที่ 1 ศึกษาพฤติกรรมของ EGCG และ caffeine ในน้ำ ตอนที่ 2 ศึกษาพฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาและตอนที่ 3 ศึกษาพฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีน โดยหมู่เอมีนที่ศึกษาคือ เอทิลีนไดเอมีน (ethylenediamine, EDA) โดยใช้วิธีการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล

3.2.1. ข้อมูลสำคัญก่อนการจำลอง

ในการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ใช้โปรแกรม GROMACS เวอร์ชัน 5.0.4 ต้องมีข้อมูลสำคัญเพื่อส่งให้คอมพิวเตอร์ประสิทธิภาพสูงประมวลผลทั้งหมด 5 อย่าง

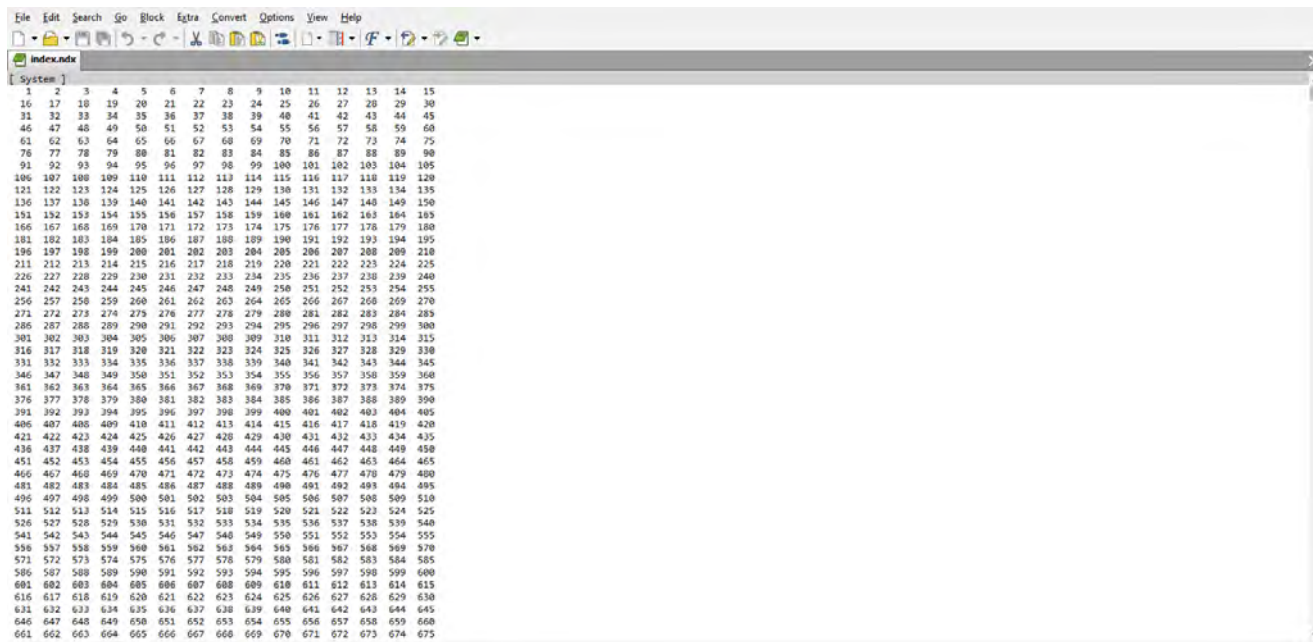
1. Initial configuration (Init.gro) ข้อมูลนี้ได้จากสร้างโมเลกุลที่ใช้ในการวิจัยโดยใช้โปรแกรม Material Studio 2017 เพื่อนำพิกัดแต่ละอะตอมในโมเลกุลมาปรับขยายตามความเหมาะสมในโปรแกรม EditPad Lite 7 และเซฟไฟล์เป็นนามสกุล .gro

```

17454
1EGCG C1 1 2.267 3.799 2.684 0.3130 0.0923 0.4068
1EGCG C2 2 2.331 3.892 2.593 0.2032 0.1209 -0.1515
1EGCG C3 3 2.347 3.854 2.459 -0.3302 0.7160 0.2303
1EGCG C4 4 2.296 3.737 2.409 -0.2901 0.0524 0.7704
1EGCG C5 5 2.227 3.652 2.503 -0.3785 0.1668 0.2310
1EGCG C6 6 2.214 3.676 2.638 0.3494 -0.3368 0.0918
1EGCG H1 7 2.395 3.924 2.392 0.4225 -0.3624 -0.3719
1EGCG H2 8 2.257 3.825 2.789 -2.1938 0.5416 0.1706
1EGCG O1 9 2.148 3.585 2.719 0.2558 -0.1046 0.0614
1EGCG H3 10 2.073 3.547 2.672 -1.2690 -1.4368 3.3921
1EGCG O2 11 2.371 4.011 2.642 0.3848 0.3576 0.1465
1EGCG H4 12 2.428 4.059 2.582 2.0584 2.3484 3.9021
1EGCG O3 13 2.268 3.719 2.385 0.1487 -0.3818 -0.4799
1EGCG C7 14 2.158 3.531 2.455 -0.0607 -0.6041 -1.2133
1EGCG H5 15 2.054 3.563 2.447 0.0427 -0.8341 -3.7445
1EGCG H6 16 2.174 3.445 2.528 -0.6665 1.1149 1.2885
1EGCG C8 17 2.210 3.500 2.319 0.2798 -0.3340 0.3338
1EGCG H7 18 2.143 3.433 2.265 -0.9848 0.8251 0.4562
1EGCG C9 19 2.200 3.640 2.249 0.1801 0.7047 -0.8547
1EGCG H8 20 2.099 3.672 2.274 0.2640 0.7824 -0.6107
1EGCG C10 21 2.198 3.650 2.093 0.9513 0.1855 -0.3256
1EGCG C11 22 2.113 3.563 2.023 -0.3219 0.7656 0.3105
1EGCG C12 23 2.121 3.552 1.888 -0.5661 -0.6958 -0.4376
1EGCG C13 24 2.215 3.635 1.824 -0.1333 0.4297 0.5429
1EGCG C14 25 2.298 3.730 1.808 -0.0910 -0.0791 -0.7418
1EGCG C15 26 2.288 3.741 2.031 -0.4200 -0.8484 0.2573
1EGCG H9 27 2.044 3.492 2.066 1.3941 0.1539 2.1600
1EGCG H10 28 2.352 3.798 2.097 -1.3398 0.4386 0.0342
1EGCG O4 29 2.049 3.463 1.818 0.8576 -0.4181 0.0724
1EGCG H11 30 2.010 3.392 1.869 0.3669 -0.4409 -0.3299
1EGCG O5 31 2.228 3.633 1.690 -0.0199 -0.3143 -0.1294
1EGCG H12 32 2.318 3.640 1.657 0.0356 1.7068 0.3846
1EGCG O6 33 2.401 3.798 1.832 0.0200 0.3568 0.2749
1EGCG H13 34 2.478 3.820 1.835 1.6846 -0.6462 -1.6413
1EGCG O7 35 2.329 3.462 2.321 -0.5258 0.0193 0.2755
1EGCG C16 36 2.408 3.488 2.214 -0.1732 -0.1098 -0.2504
1EGCG O8 37 2.508 3.551 2.210 0.0647 0.0653 -0.0782
1EGCG C17 38 2.403 3.483 2.100 0.4008 -0.0174 -0.6120
1EGCG C18 39 2.472 3.441 1.982 0.4941 -0.5589 0.4895
1EGCG C19 40 2.448 3.377 1.862 -0.2076 -0.0083 0.2364
1EGCG C20 41 2.362 3.269 1.855 -0.0525 0.5256 0.5869
1EGCG C21 42 2.295 3.223 1.978 0.2786 0.6489 0.1237
1EGCG C22 43 2.306 3.257 2.090 -0.6999 0.1563 0.5971
1EGCG H14 44 2.261 3.259 2.180 0.0193 -0.2806 0.7674
  
```

รูปที่ 3.1 ตัวอย่าง Init.gro จากระบบจำลองที่ 1

2. Index.ndx ข้อมูลนี้ได้จากการนำไฟล์ Init.gro เข้าโปรแกรม PuTTY และเขียนคำสั่งเพื่อให้คอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงเพื่อแปลงไฟล์ให้เป็นนามสกุล .ndx โดยมีคำสั่งดังนี้
- ```
gmx_mpi make_ndx -f [<.gro/.g96/...>] -o [<.ndx>]
```



รูปที่ 3.2 ตัวอย่าง Index.ndx จากระบบจำลองที่ 1

3. Forcefield เป็นข้อมูลที่สำคัญสำหรับการจำลองเพื่อให้ได้พารามิเตอร์ที่ต้องการประกอบไปด้วยแรงกระทำที่เกี่ยวกับพันธะ (Bond interactions) และแรงกระทำที่ไม่เกี่ยวกับพันธะ (Non-bond interactions) โดยข้อมูลนี้ได้นำ Amber99 force field ของสารประกอบหมู่เอมีนเป็นพารามิเตอร์



```

File Edit Search Go Block Extra Convert Options View Help
EGCG.itp
[moleculetype]
; molname nrexcl
EGCG 3

[atoms]
jnr type resnr resid atom cgnr charge
1 CA 1 EGCG C1 1 -0.2046
2 CA 1 EGCG C2 2 0.2261
3 CA 1 EGCG C3 3 -0.2388
4 CA 1 EGCG C4 4 0.2337
5 CA 1 EGCG C5 5 -0.3991
6 CA 1 EGCG C6 6 0.2732
7 HA 1 EGCG H1 7 0.1579
8 HA 1 EGCG H2 8 0.1447
9 OH 1 EGCG O1 9 -0.5283
10 HO 1 EGCG H3 9 0.4781
11 OH 1 EGCG O2 10 -0.5131
12 HO 1 EGCG H4 10 0.4449
13 OS 1 EGCG O3 11 -0.3286
14 CT 1 EGCG C7 12 -0.2611
15 HC 1 EGCG H5 13 0.1049
16 MC 1 EGCG M6 14 0.1049
17 CT 1 EGCG C8 15 0.0997
18 HC 1 EGCG H7 16 0.1185
19 CT 1 EGCG C9 17 0.1786
20 HC 1 EGCG H8 18 0.0744
21 CA 1 EGCG C10 19 -0.0612
22 CA 1 EGCG C11 20 -0.1810
23 CA 1 EGCG C12 21 0.1160
24 CA 1 EGCG C13 22 0.0989
25 CA 1 EGCG C14 23 0.1160
26 CA 1 EGCG C15 24 -0.1810
27 HA 1 EGCG H9 25 0.1515
28 HA 1 EGCG H10 26 0.1515
29 OH 1 EGCG O4 27 -0.5178
30 HO 1 EGCG H11 27 0.4532
31 OH 1 EGCG O5 28 -0.5420
32 HO 1 EGCG H12 28 0.4502
33 OH 1 EGCG O6 29 -0.5178
34 HO 1 EGCG H13 29 0.4532
35 OS 1 EGCG O7 30 -0.3863
36 C 1 EGCG C16 31 0.7753
37 O 1 EGCG O8 32 -0.6036
38 CA 1 EGCG C17 33 -0.1659
39 CA 1 EGCG C18 34 -0.0674

```

รูปที่ 3.3 ตัวอย่าง Force field ของ Bond interactions จากระบบจำลองที่ 1

```

File Edit Search Go Block Extra Convert Options View Help
EGCG.itp
[bonds]
; Atom i Atom j Func r (nm) K (KJ mol-1 nm-2)
1 2 3 1 0.14000 392459 ;CA-CA
2 3 4 1 0.14000 392459 ;CA-CA
3 4 5 1 0.14000 392459 ;CA-CA
4 5 6 1 0.14000 392459 ;CA-CA
5 6 7 1 0.14000 392459 ;CA-CA
6 7 8 1 0.10000 367106 ;CA-HA
7 8 9 1 0.10000 367106 ;CA-HA
8 9 10 1 0.13640 376560 ;CA-OH
9 10 11 1 0.09600 462750 ;OH-HO
10 11 12 1 0.13640 376560 ;CA-OH
11 12 13 1 0.09600 462750 ;OH-HO
12 13 14 1 0.12400 401664 ;CA-OS
13 14 15 1 0.15100 265266 ;CA-CT
14 15 16 1 0.10900 284512 ;CT-HC
15 16 17 1 0.10900 284512 ;CT-HC
16 17 18 1 0.15200 259400 ;CT-CT

```

รูปที่ 3.4 ตัวอย่าง Force field ของ Bond interactions จากระบบจำลองที่ 1

```

File Edit Search Go Block Extra Convert Options View Help
ff_nb_EGCG.itp
[defaults]
; nbfunc comb-rule gen-pairs fudgeL1 fudgeO0
1 2 yes 0.5 0.8333

[Atomtypes]
; Atom nr mass charge ptype Sigma(nm) Epsilon (K)
H 1.008 0.000 A 0.107 0.06569
HA 1.008 0.000 A 0.200 0.00276
HD 1.008 0.000 A 0.000 0.00000
HC 1.008 0.000 A 0.265 0.00569
ND 14.010 0.000 A 0.325 0.71128
NC 14.010 0.000 A 0.325 0.71120
C 12.010 0.000 A 0.340 0.35982
CT 12.010 0.000 A 0.340 0.45773
CA 12.010 0.000 A 0.340 0.35982
O 16.000 0.000 A 0.296 0.07864
OH 16.000 0.000 A 0.307 0.00011
OS 16.000 0.000 A 0.300 0.71128
ON 16.00000 0.000 A 0.3166 0.658104 ; 3.1660 0.1554
HI 1.00000 0.000 A 0.0000 0.000000 ; 0.0000 0.0000

```

รูปที่ 3.5 ตัวอย่าง Force field ของ Non-bond interactions จากระบบจำลองที่ 1

```

File Edit Search Go Block Extra Convert Options View Help
tip3p.itp
[moleculetype]
; molname nrexcl
SOL 2

[atoms]
; nr type resnr resname atomname cgnr charge mass
1 Oa 1 SOL Oa 1 -0.834 16.00000
2 Hb 1 SOL Hb1 1 0.417 1.00000
3 Hc 1 SOL Hc2 1 0.417 1.00000

#ifdef FLEXIBLE
[settles]
; Oa funct doh dhb
1 1 0.09572 0.15139

[exclusions]
1 2 3
2 1 3
3 1 2

#else
[bonds]
; i j funct length force_constant
1 2 1 0.09572 502416.0 0.09572
1 3 1 0.09572 502416.0 0.09572

[angles]
; i j k funct angle force_constant
2 1 3 1 104.52 628.02 104.52 628.02

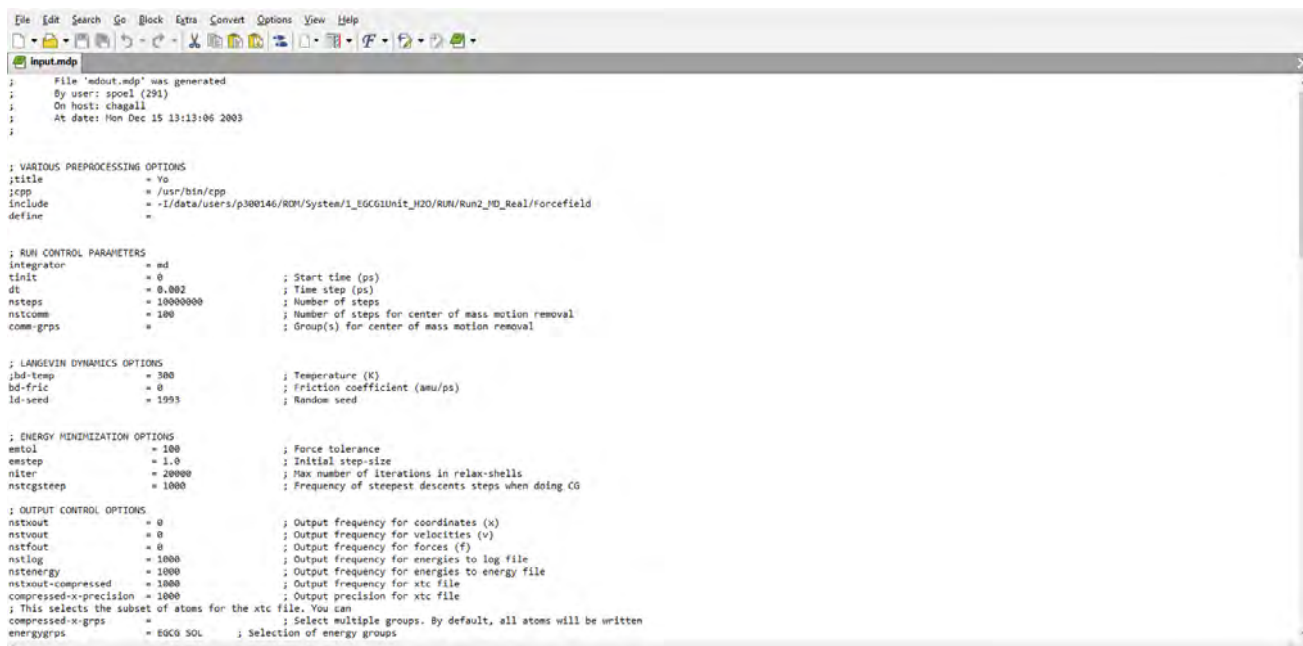
#endif

```

รูปที่ 3.6 ตัวอย่าง Force field ของโมเลกุลน้ำจากระบบจำลองที่ 1

- Input.mdp ข้อมูลนี้ได้จากศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (NECTEC) หลังจากการสมัครขอเข้าใช้คอมพิวเตอร์สมรรถนะสูง โดยข้อมูลนี้เป็นพารามิเตอร์และสมการที่ใช้จำลองการเคลื่อนที่ของโมเลกุล โดยการเคลื่อนที่ของ

โมเลกุลนั้นใช้ทฤษฎี Leap-frog algorithm เป็นฟังก์ชันที่ใช้อินทิเกรตสมการการเคลื่อนที่ ความเร็ว และความเร่ง ทุกระบบใช้อุณหภูมิเดียวกันที่ 300 เคลวิน โดยใช้ Nose-Hoover thermostat และมีระยะ cut off อยู่ที่ 0.9 นาโนเมตร เนื่องจาก non bond interaction มีแรงอันตรกิริยากับโมเลกุลที่ระยะห่างไกลมาก การคำนวณทุกแรงที่เกิดขึ้นเป็นไปได้ยาก จำเป็นต้องจำกัดพื้นที่ในการคิดแรงชนิดนี้



```

File [edit Search Go Block Extra Convert Options View Help]
input.mdp
; File 'mdout.mdp' was generated
; By user: spoel (291)
; On host: chagall
; At date: Mon Dec 15 13:13:06 2003
;

; VARIOUS PREPROCESSING OPTIONS
;title = Yo
;cpp = /usr/bin/cpp
;include = -I/data/users/p300146/RUN/System1_EGCG1Unit_M20/RUN/Run2_MD_Real/forcefield
define =

; RUN CONTROL PARAMETERS
integrator = md ; Start time (ps)
tinit = 0 ; Time step (ps)
dt = 0.002 ; Number of steps
nsteps = 10000000 ; Number of steps for center of mass motion removal
nstcomm = 100 ; Group(s) for center of mass motion removal
comm-grps =

; LANGEVIN DYNAMICS OPTIONS
;hd-tmp = 300 ; Temperature (K)
bd-fric = 0 ; friction coefficient (amu/ps)
ld-seed = 1993 ; Random seed

; ENERGY MINIMIZATION OPTIONS
emtol = 100 ; Force tolerance
emstep = 1.0 ; Initial step-size
niter = 20000 ; Max number of iterations in relax-shells
nsteegsteepest = 1000 ; Frequency of steepest descents steps when doing CG

; OUTPUT CONTROL OPTIONS
nstxout = 0 ; Output frequency for coordinates (x)
nstvout = 0 ; Output frequency for velocities (v)
nstfout = 0 ; Output frequency for forces (f)
nstlog = 1000 ; Output frequency for energies to log file
nstenergy = 1000 ; Output frequency for energies to energy file
nstxout-compressed = 1000 ; Output frequency for xtc file
compressed-x-precision = 1000 ; Output precision for xtc file
; This selects the subset of atoms for the xtc file. You can
compressed-x-grps = ; Select multiple groups. By default, all atoms will be written
energygrps = EGCG SOL ; Selection of energy groups

```

รูปที่ 3.7 ตัวอย่าง Input.mdp จากระบบจำลองที่ 1

```

File Edit Search Go Block Extra Convert Options View Help
input.mdp
; NEIGHBORSEARCHING PARAMETERS
cutoff-scheme = Verlet
nstlist = 10 ; nblast update frequency
ns_type = grid ; ns algorithm (simple or grid)
pbc = xyz ; Periodic boundary conditions: xyz or none
rlist = 0.8 ; nblast cut-off

; OPTIONS FOR ELECTROSTATICS AND VDW
coulombtype = PME ; Method for doing electrostatics
rcoulomb-switch = 0.9
rcoulomb = 0.9 ; Dielectric constant (DC) for cut-off or DC of reaction field
epsilon-r = 1 ; Method for doing Van der Waals
vdw-type = cut-off ; cut-off lengths
rvdw-switch = 0
rvdw = 0.9 ; Apply long range dispersion corrections for Energy and Pressure
DispCorr = EnerPres ; Spacing for the PME/PPPM FFT grid
fourierspacing = 0.12 ; FFT grid size, when a value is 0 fourierspacing will be used
fourier_nx = 0
fourier_ny = 0
fourier_nz = 0

; Ewald/PME/PPPM parameters
pme_order = 4
ewald_rtol = 1e-05
epsilon_surface = 0

; OPTIONS FOR WEAK COUPLING ALGORITHMS
TCoupl = nose-hoover ; Temperature coupling
tc-grps = System ; Groups to couple separately
tau_t = 0.4 ; Time constant (ps)
ref_t = 300 ; Reference temperature (K)
PCoupl = no ; Pressure coupling: Parrinello-Rahman
PCoupltype = semisotropic ; Time constant (ps)
tau_p = 0.5 ; Compressibility (1/bar)
compressibility = 4.5e-5 ; Reference P (bar)
ref_p = 1.0

; SIMULATED ANNEALING CONTROL
annealing = no
zero-temp-time = 0 ; Time at which temperature should be zero (ps)

; GENERATE VELOCITIES FOR STARTUP RUN
gen_vel = no
gen_temp = 300
gen_seed = 1993

```

รูปที่ 3.8 ตัวอย่าง Input.mdp จากระบบจำลองที่ 1

```

File Edit Search Go Block Extra Convert Options View Help
input.mdp
; OPTIONS FOR BONDS
constraints = hbonds
constraint-algorithm = lincs ; Type of constraint algorithm
continuation = no ; Do not constrain the start configuration
shake-tol = 1e-04 ; Relative tolerance of shake
lincs-order = 8 ; Highest order in the expansion of the constraint coupling matrix
lincs-warnangle = 30 ; lincs will write a warning to the stderr if in one step a bond rotates over more degrees than
morse = no ; Convert harmonic bonds to morse potentials

; NVR refinement stuff
disre = no ; Distance restraints type: No, Simple or Ensemble
disre-weighting = Equal ; Force weighting of pairs in one distance restraint: Equal or Conservative
disre-mixed = no ; Use sqrt of the time averaged times the instantaneous violation
disre-fc = 1000
disre-tau = 0
nstdisreout = 100 ; Output frequency for pair distances to energy file

; Free energy control stuff
free-energy = no
init-lambda = 0
delta-lambda = 0
sc-alpha = 0
sc-sigma = 0.3

; Non-equilibrium MD stuff
acc-grps =
accelerate =
freezegrps =
freezedim =
cos-acceleration = 0
energygrp-excl = 0 ; Pairs of energy groups for which all non-bonded interactions are excluded

; Electric fields
; Format is number of terms (int) and for all terms an amplitude (real) and a phase angle (real)
E-x =
E-xt =
E-y =
E-yt =
E-z =
E-zt =

; User defined thingsies
user1-grps =
user2-grps =
userint1 = 0
userint2 = 0

```

รูปที่ 3.9 ตัวอย่าง Input.mdp จากระบบจำลองที่ 1

```

; NMR refinement stuff
disre = No ; Distance restraints type: No, Simple or Ensemble
disre-weighting = Equal ; Force weighting of pairs in one distance restraint: Equal or Conservative
disre-mixed = no ; Use sqrt of the time averaged times the instantaneous violation
disre-fc = 1000 ;
disre-tau = 0 ;
ntsdiscout = 100 ; Output frequency for pair distances to energy file

; Free energy control stuff
free-energy = no ;
init-lambda = 0 ;
delta-lambda = 0 ;
sc-alpha = 0 ;
sc-sigma = 0.3 ;

; Non-equilibrium MD stuff
acc-grps = ;
accelerate = ;
freezegrps = ;
freezedie = ;
cos-acceleration = 0 ;
energgrp-excl = ; Pairs of energy groups for which all non-bonded interactions are excluded

; Electric fields
; Format is number of terms (int) and for all terms an amplitude (real) and a phase angle (real)
E-x = ;
E-xt = ;
E-y = ;
E-yt = ;
E-z = ;
E-zt = ;

; User defined things
user1-grps = ;
user2-grps = ;
userint1 = 0 ;
userint2 = 0 ;
userint3 = 0 ;
userint4 = 0 ;
userreal1 = 0 ;
userreal2 = 0 ;
userreal3 = 0 ;
userreal4 = 0 ;

```

รูปที่ 3.10 ตัวอย่าง Input.mdp จากระบบจำลองที่ 1

- Script file ข้อมูลนี้ได้จากศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (NECTEC) หลังจากการสมัครขอเข้าใช้คอมพิวเตอร์สมรรถนะสูง เนื่องจากเป็นชุดคำสั่งของคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงของศูนย์

```

PBS Part
PBS -N script_S1
PBS -q short
PBS -l nodes=2:ppn=8
End Part

export GROMACS_EXE=/data/programs/gromacs-5.0.4/bin
export OPENMPI_EXE=/data/programs/openmpi-4.0.0/bin

cd /data/users/p300146/ROM/System/1_EGCG11init_H2O/RUN/Run2_MD_Real
cat $PBS_NODEFILE > machines.txt

$OPENMPI_EXE/mpirun -machinefile machines.txt -np 1 $GROMACS_EXE/gmx_mpi grompp -f input.mdp -c init.gro -p topol.top -n index.ndx -o initout.tpr -maxwarn 4 &
mdrun_mpi -ontop 1 -s initout.tpr -o init.trr -x init.xtc -c final.gro -e init.ener -g init.log -cp state.cpt

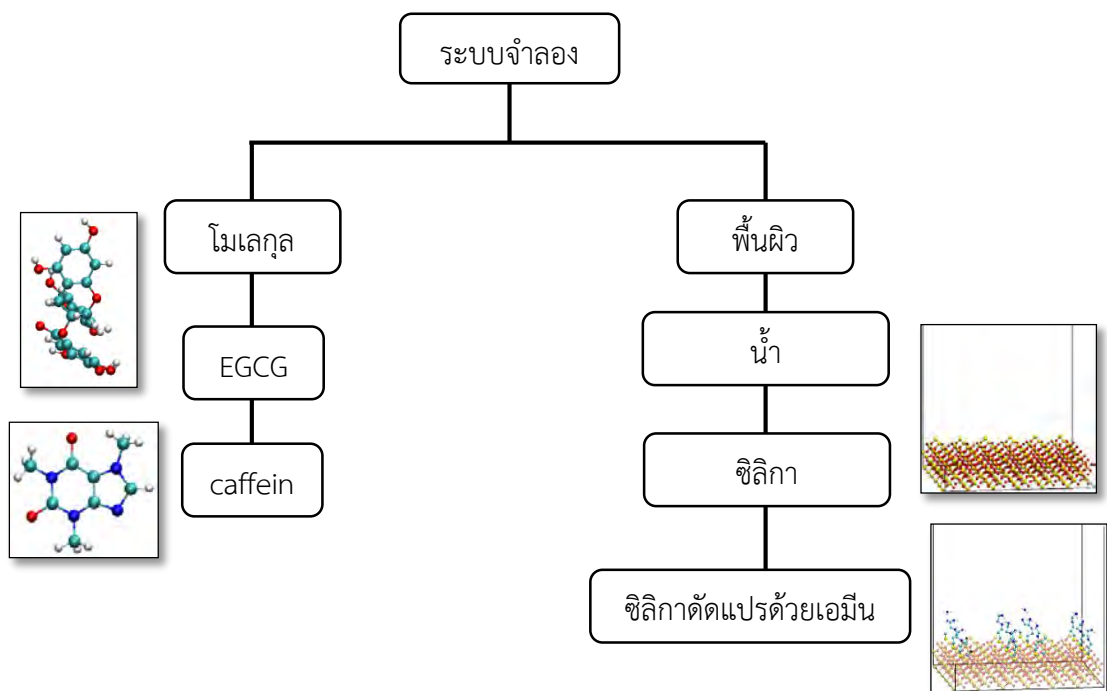
```

รูปที่ 3.11 ตัวอย่าง Script file จากระบบจำลองที่ 1

เมื่อนำผลให้คอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงประมวล output ที่ได้จะประกอบไปด้วย 2 ส่วนหลักๆ คือ final.gro และ init.xtc โดย final.gro เป็นข้อมูลที่บอกพิกัดแต่ละอะตอมในโมเลกุลเมื่อทำการจำลองเสร็จสิ้น ส่วน init.xtc เป็นข้อมูลการเคลื่อนที่ที่จะถูกนำไปคำนวณเพื่อหาระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (mean square displacement, MSD) และสัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient) ซึ่งทำให้ทราบการเคลื่อนที่ อัตราการแพร่และบริเวณที่เกิดการดูดซับของโมเลกุลที่ศึกษา

### 3.2.2. ระบบการจำลอง

ในการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลนั้น จะแบ่งสารออกเป็น 2 ส่วนหลักคือ adsorbate และ adsorbent โดย adsorbate ที่ใช้ในการวิจัยคือ โมเลกุลของ อีพิกัลโลคาเทชินกัลเลต (epigallocatechin-3-gallate, EGCG) และคาเฟอีน (caffeine, CAFF) adsorbent คือ เมโซพอร์ซิลิกา และเมโซพอร์ซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยเอทิลีนไดเอมีน (ethylenediamine, EDA) ดังแสดงในรูปที่ 3.12



รูปที่ 3.12 องค์ประกอบของระบบจำลองในงานวิจัย

จากรูปที่ 3.12 แสดงถึงองค์ประกอบของระบบจำลอง โดยการเปรียบเทียบสาร 2 ชนิดคือ EGCG และ caffeine ใน 3 ระบบที่ออกแบบได้แก่ ในน้ำ บนพื้นผิวซิลิกาและบนพื้นผิวซิลิกาที่

ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน EDA สามารถสรุประบบการจำลองได้ในตารางที่ 3.1 (ทุกระบบการจำลองใช้เวลาในการจำลอง (simulation times) 20 ns)

ตารางที่ 3.1 ตารางการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลของระบบต่าง ๆ

| ระบบที่ | พื้นผิว      | ตัวอย่าง   |              |
|---------|--------------|------------|--------------|
|         |              | ชนิดของสาร | จำนวนโมเลกุล |
| 1       | -            | EGCG       | 1            |
| 2       |              | CAFF       |              |
| 3       |              | EGCG       | 5            |
| 4       |              | CAFF       |              |
| 5       | Silica       | EGCG       | 1            |
| 6       |              | CAFF       |              |
| 7       |              | EGCG       | 5            |
| 8       |              | CAFF       |              |
| 9       | Silica + EDA | EGCG       | 1            |
| 10      |              | CAFF       |              |
| 11      |              | EGCG       | 5            |
| 12      |              | CAFF       |              |

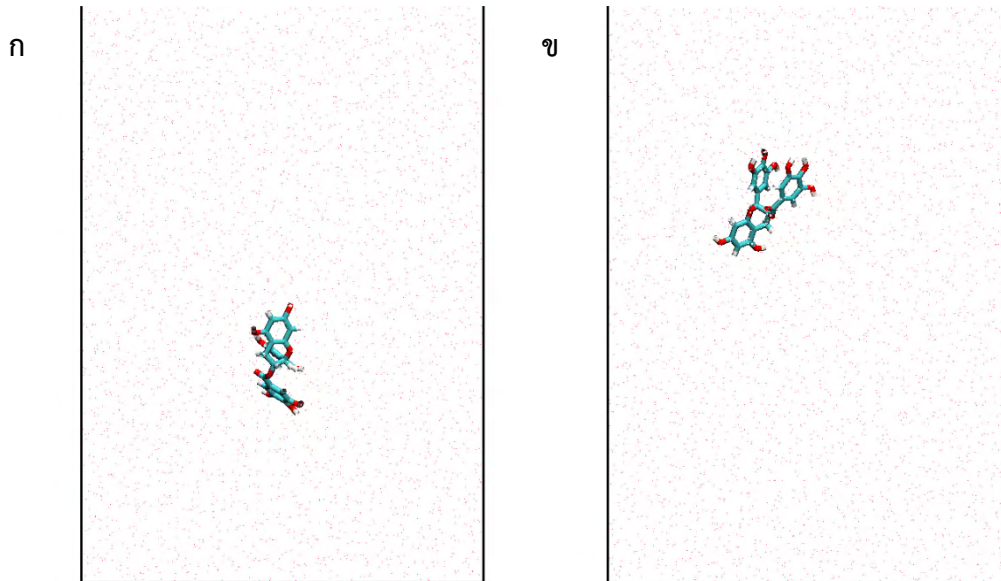
## บทที่ 4

### ผลการทดลองและวิจารณ์ผลการทดลอง

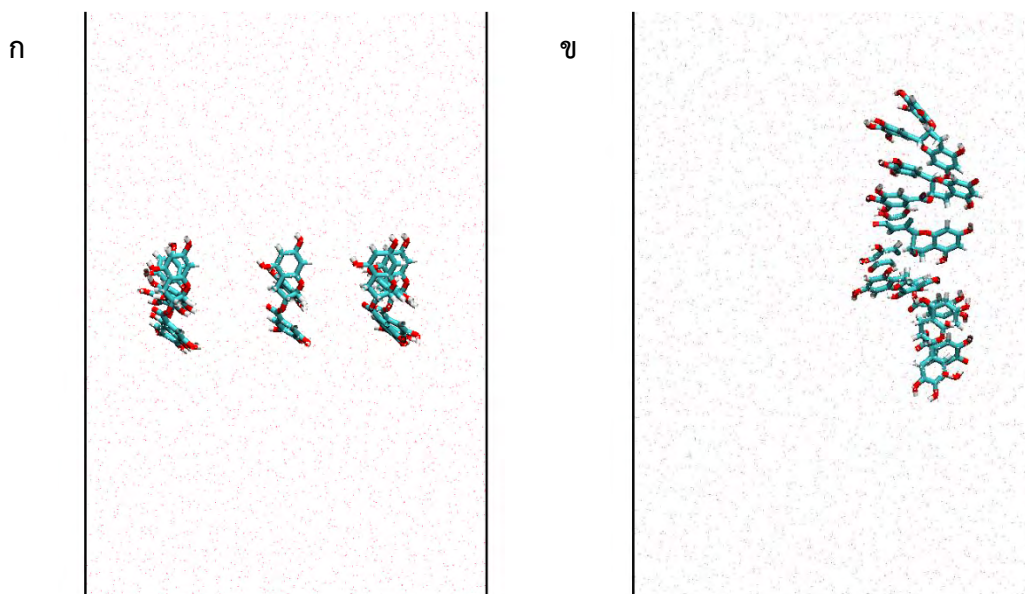
ในบทนี้เป็นการแสดงผลการวิจัย ได้แก่ ภาพการจำลอง ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง และสัมประสิทธิ์การแพร่

#### 4.1. พฤติกรรมของ EGCG และ caffeine ในน้ำ

##### 4.1.1. ภาพการจำลองของ EGCG และ caffeine ในน้ำ

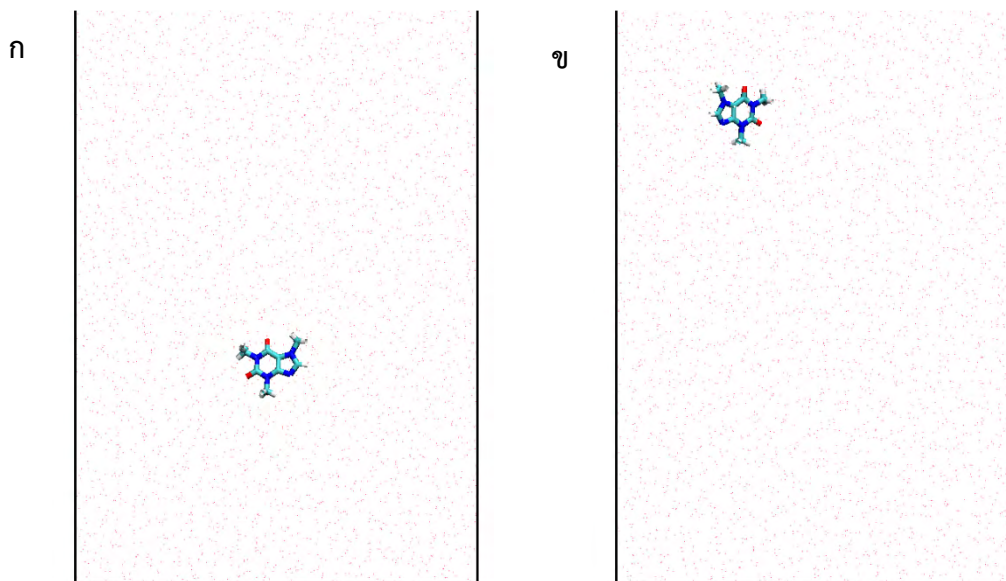


รูปที่ 4.1 VMD Snapshot ของ EGCG 1 โมเลกุลในน้ำ  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns

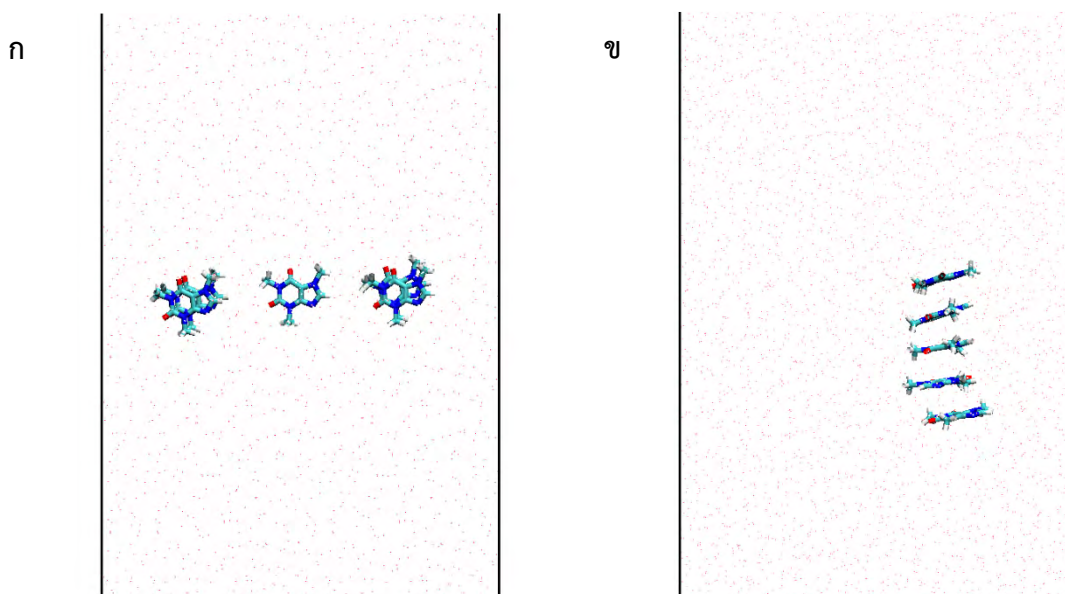




รูปที่ 4.2 VMD Snapshot ของ EGCG 5 โมเลกุลในน้ำ  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



รูปที่ 4.3 VMD Snapshot ของ caffeine 1 โมเลกุลในน้ำ  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



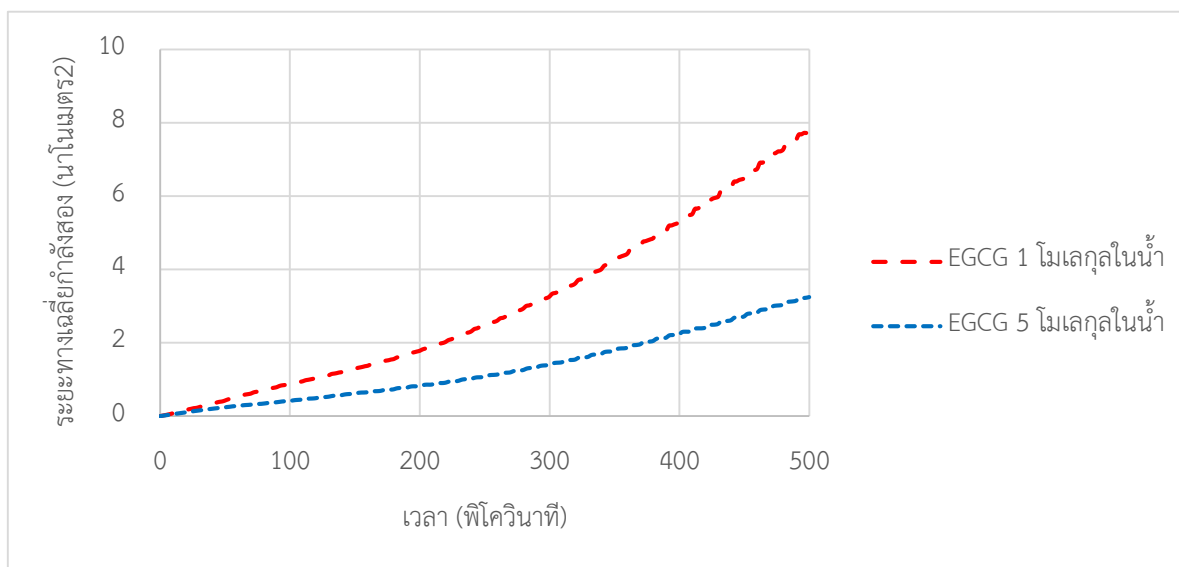
รูปที่ 4.4 VMD Snapshot ของ caffeine 5 โมเลกุลในน้ำ  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns

จากรูปที่ 4.1 ถึง 4.4 พบว่าเมื่อเปรียบเทียบ EGCG และ caffeine ที่ 1 โมเลกุล พบว่า EGCG และ caffeine มีการเคลื่อนที่ได้อย่างอิสระ เมื่อเปรียบเทียบ EGCG 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล พบว่า EGCG 5 โมเลกุลมีการเคลื่อนที่น้อยกว่าที่ 1 โมเลกุล เนื่องจากโมเลกุลเหล่านั้นจะเกิดแรงระหว่างโมเลกุล ส่งผลให้การเคลื่อนที่ของโมเลกุลเหล่านั้นมีความเป็นอิสระน้อยลง นอกจากนี้ caffeine 5 โมเลกุลมีแนวโน้มเช่นเดียวกัน

#### 4.1.2. ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD)

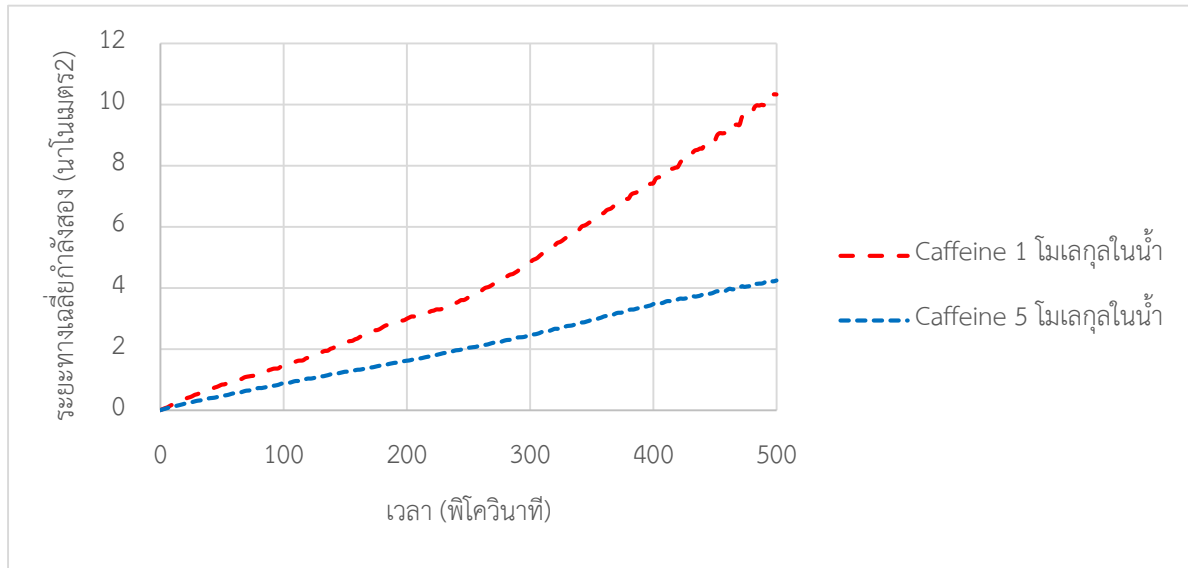
ระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเป็นปริมาณใช้วิเคราะห์ว่าอนุภาคที่เราสนใจว่ามีลักษณะการเคลื่อนที่เป็นอย่างไรตามที่กล่าวในหัวข้อที่ 2.5.1. โดยค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่คำนวณได้จะถูกนำไปใช้ต่อในการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่

ศึกษาผลของจำนวนของ EGCG ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล



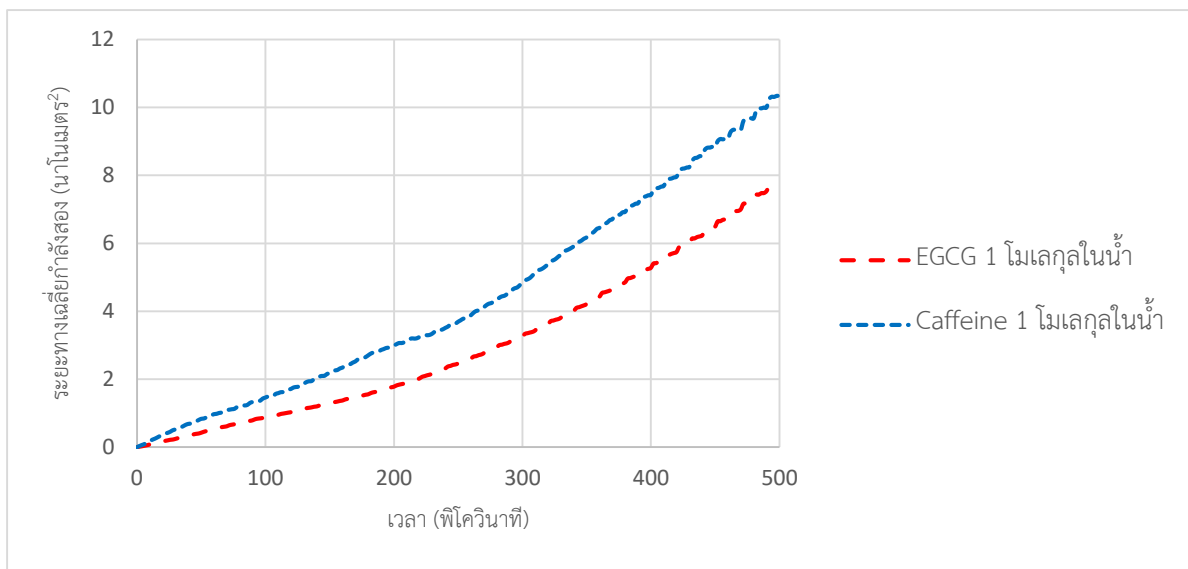
รูปที่ 4.5 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุลในน้ำ

ศึกษาผลของจำนวนของ caffeine ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล



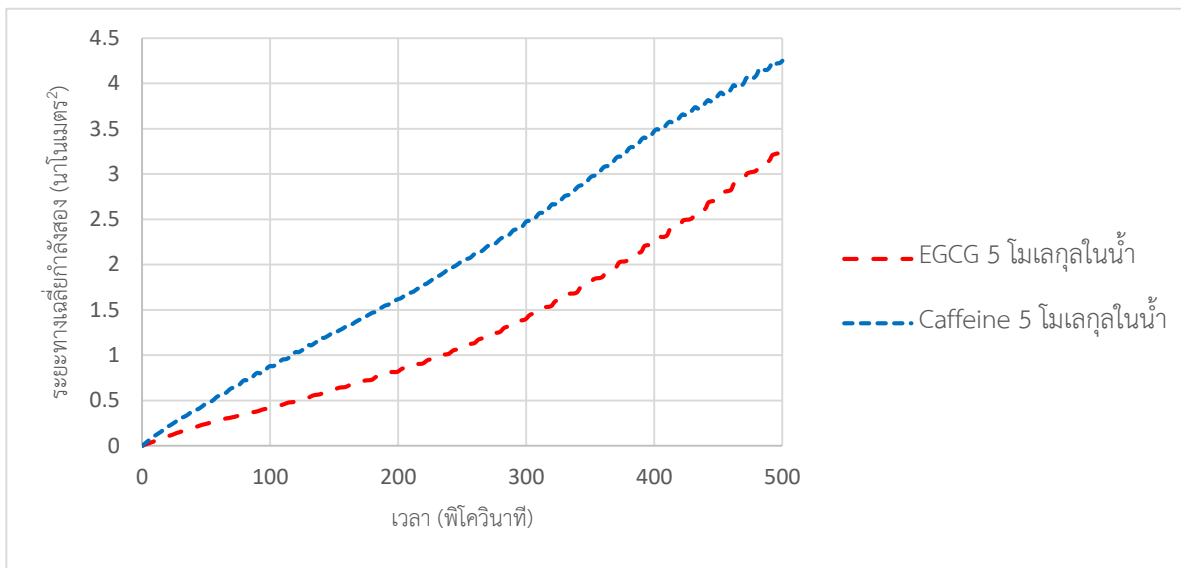
รูปที่ 4.6 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ caffeine 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุลในน้ำ

ศึกษาผลของประเภทของสารตัวอย่างระหว่าง EGCG กับ caffeine ที่ 1 โมเลกุล



รูปที่ 4.7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG และ caffeine 1 โมเลกุลในน้ำ

ศึกษาผลของประเภทของสารตัวอย่างระหว่าง EGCG กับ caffeine ที่ 5 โมเลกุล



รูปที่ 4.8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG และ caffeine 1 โมเลกุลในน้ำ

จากรูปที่ 4.5 ถึง 4.8 เป็นกราฟที่แสดงถึงระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลา รูปที่ 4.5 เป็นการเปรียบเทียบ EGCG 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล พบว่า EGCG ที่ 1 โมเลกุลมีค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองมากกว่าที่ 5 โมเลกุล แสดงให้เห็นว่าที่ 1 โมเลกุลมีการเคลื่อนได้อย่างอิสระมากกว่าที่ 5 โมเลกุล เนื่องจากที่ 5 โมเลกุลโมเลกุลเหล่านั้นจะเกิดแรงระหว่างโมเลกุล ส่งผลให้การเคลื่อนที่ของโมเลกุลเหล่านั้นมีความเป็นอิสระน้อยลง รูปที่ 4.6 เป็นการเปรียบเทียบ caffeine 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล พบว่าที่ 1 โมเลกุลมีค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองมากกว่าที่ 5 โมเลกุลเช่นเดียวกับรูปที่ 4.5 รูปที่ 4.7 เป็นการเปรียบเทียบ EGCG 1 โมเลกุลและ caffeine 1 โมเลกุล พบว่าค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองของ EGCG น้อยกว่า caffeine เนื่องจากโมเลกุลของ EGCG มีขนาดใหญ่กว่าส่งผลให้เคลื่อนที่ได้น้อยกว่า รูปที่ 4.8 เป็นการเปรียบเทียบระหว่าง EGCG 5 โมเลกุลและ caffeine 5 โมเลกุล พบว่าค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองของ EGCG น้อยกว่า caffeine ซึ่งมีแนวโน้มเช่นเดียวกับรูปที่ 4.7

#### 4.1.3. สัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient, D)

สัมประสิทธิ์การแพร่เป็นตัวแปรที่แสดงถึงความเร็วในการเคลื่อนที่ของอนุภาคสามารถคำนวณได้จากระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (mean-square displacement, MSD) ตามที่ได้กล่าวในหัวข้อ 2.5.2. สำหรับการวิเคราะห์ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ในน้ำ ถูกแสดงในตารางที่ 4.1

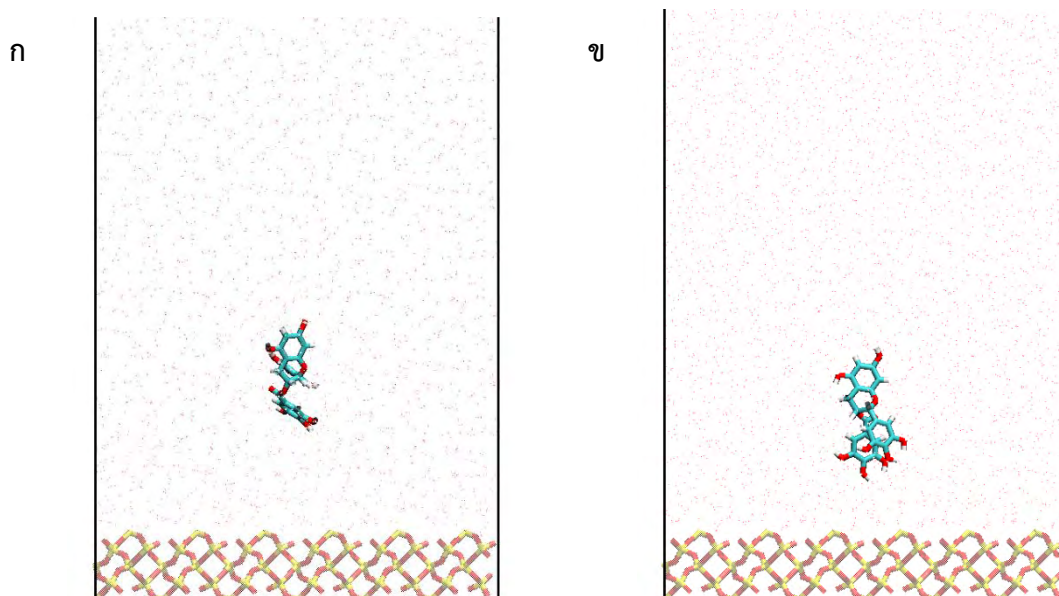
ตารางที่ 4.1 ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG และ caffeine ในน้ำ

| จำนวน     | $D_{EGCG}$ ( $10^{-5}$ cm <sup>2</sup> /s) | $D_{CAFF}$ ( $10^{-5}$ cm <sup>2</sup> /s) |
|-----------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|
| 1 โมเลกุล | 3.1564                                     | 5.1516                                     |
| 5 โมเลกุล | 1.1490                                     | 1.9196                                     |

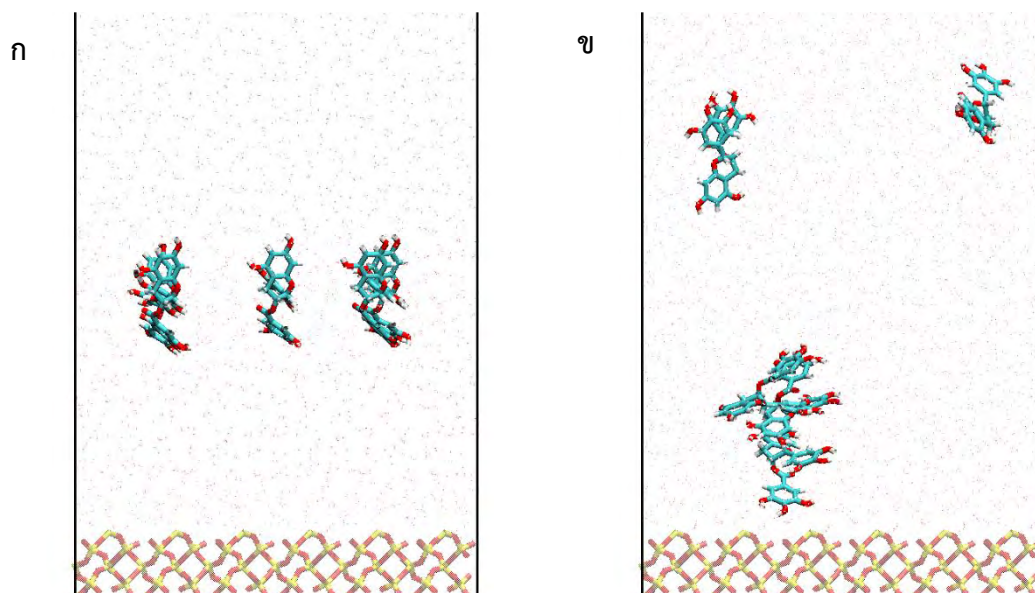
จากตารางที่ 4.1 พบว่าเมื่อเปรียบเทียบที่ 1 โมเลกุลของทั้ง EGCG และ caffeine ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG นั้นน้อยกว่า caffeine เนื่องจาก EGCG มีขนาดใหญ่กว่าทำให้เคลื่อนที่ได้ช้ากว่า อีกทั้งยังพบว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของทั้ง EGCG และ caffeine มีค่าลดลงเมื่อจำนวนโมเลกุลมากขึ้น ทั้งนี้เป็นผลมาจากค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่นำมาใช้คำนวณ กล่าวคือยิ่งโมเลกุลมากขึ้น โมเลกุลเหล่านั้นจะเกิดแรงระหว่างโมเลกุล ส่งผลให้การเคลื่อนที่ของโมเลกุลเหล่านั้นมีความเป็นอิสระน้อยลง ดังนั้นแนวโน้มของค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของทั้ง EGCG และ caffeine จึงมีค่าลดลงเมื่อจำนวนโมเลกุลมากขึ้น

## 4.2. พฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกา

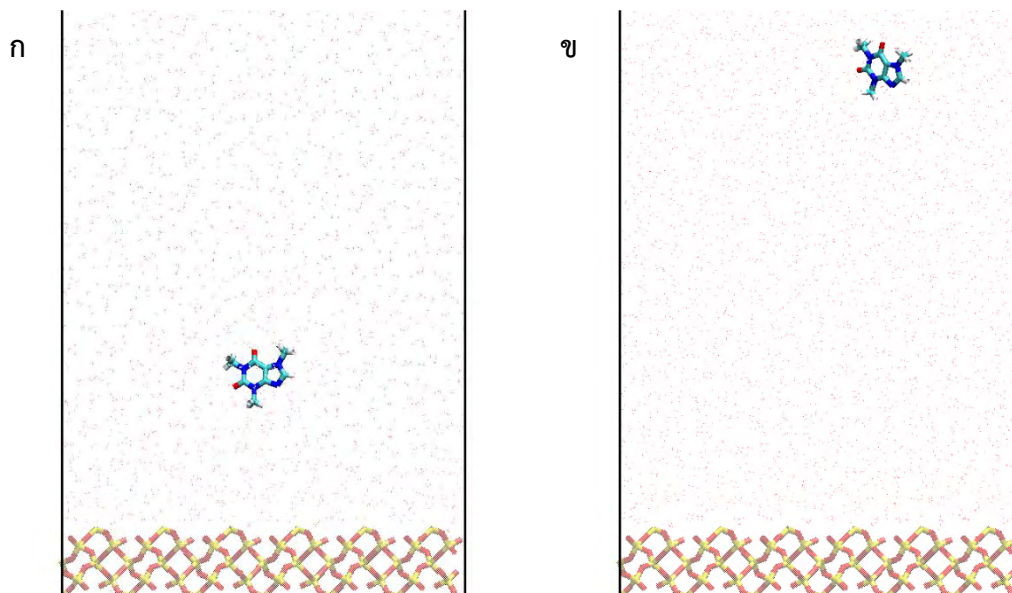
### 4.2.1. ภาพการจำลองของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกา



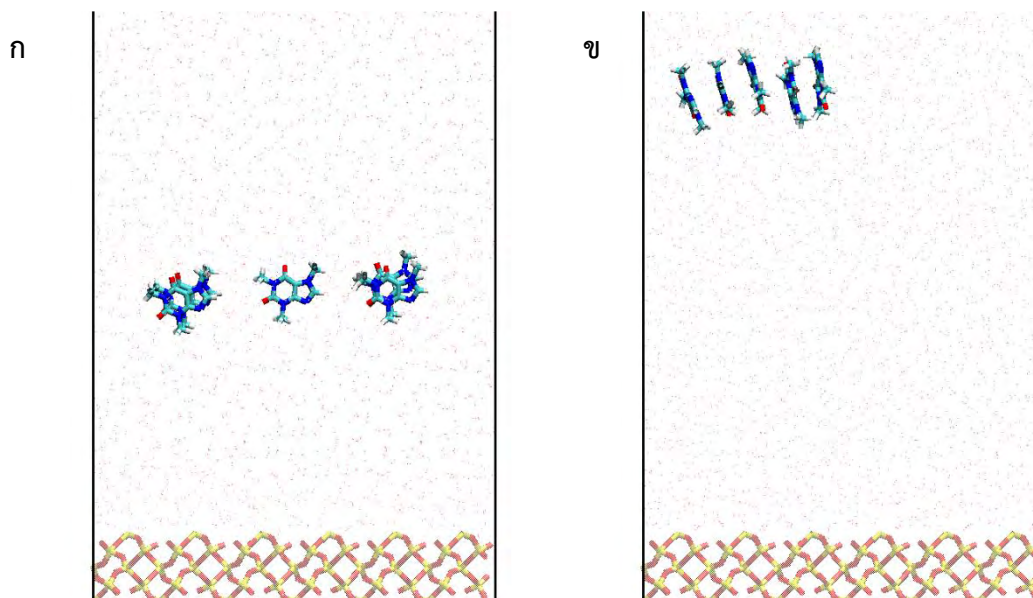
รูปที่ 4.9 VMD Snapshot ของ EGCG 1 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



รูปที่ 4.10 VMD Snapshot ของ EGCG 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



รูปที่ 4.11 VMD Snapshot ของ caffeine 1 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



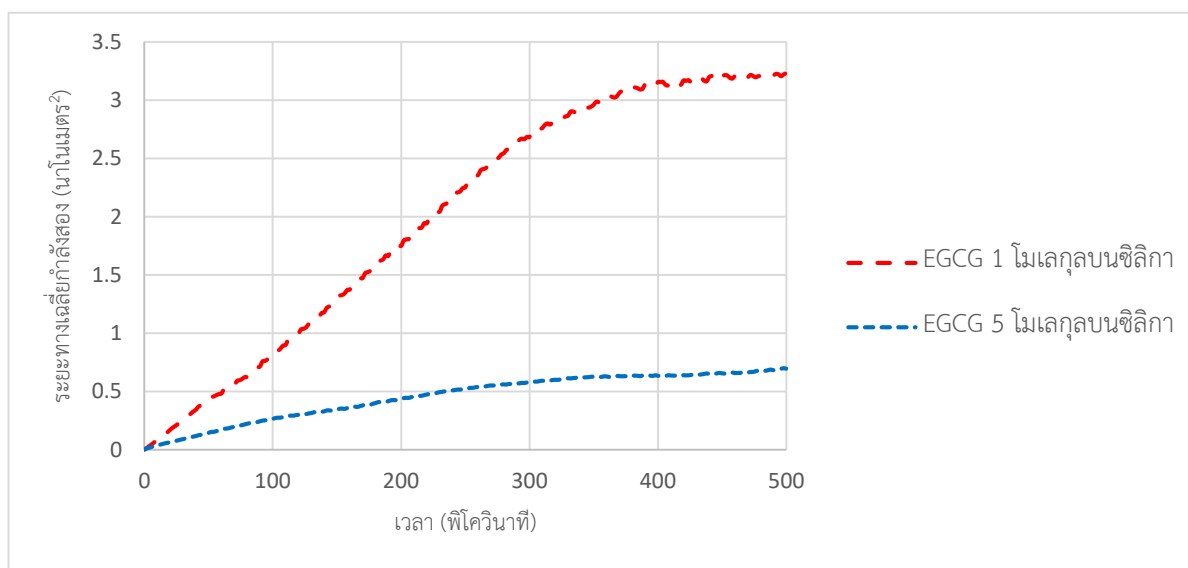
รูปที่ 4.12 VMD Snapshot ของ caffeine 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns

จากรูปที่ 4.9 ถึง 4.12 เมื่อเปรียบเทียบ EGCG และ caffeine ที่ 1 โมเลกุลพบว่า เมื่อเวลาผ่านไป EGCG 1 โมเลกุลมีการเคลื่อนที่เข้าใกล้พื้นผิวซิลิกามากขึ้น แสดงให้เห็นถึงความสามารถของซิลิกาในการดูดซับ EGCG ในทางตรงกันข้าม caffeine ที่ 1 โมเลกุลนั้นมีการเคลื่อนที่ได้อย่างอิสระ แสดงให้เห็นว่า caffeine ไม่ดูดซับลงบนพื้นผิวซิลิกา อีกทั้งเมื่อเพิ่มโมเลกุลของ EGCG เป็น 5 โมเลกุล ยังพบว่าที่ EGCG 5 โมเลกุลนั้นมีการเคลื่อนที่เข้าใกล้พื้นผิวซิลิกาเช่นเดียวกับที่ 1 โมเลกุล

#### 4.2.2. ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD)

ระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเป็นปริมาณใช้วิเคราะห์ว่าอนุภาคที่เราสนใจว่ามีลักษณะการเคลื่อนที่เป็นอย่างไรตามที่กล่าวในหัวข้อที่ 2.5.1. โดยค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่คำนวณได้จะถูกนำไปใช้ต่อในการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่

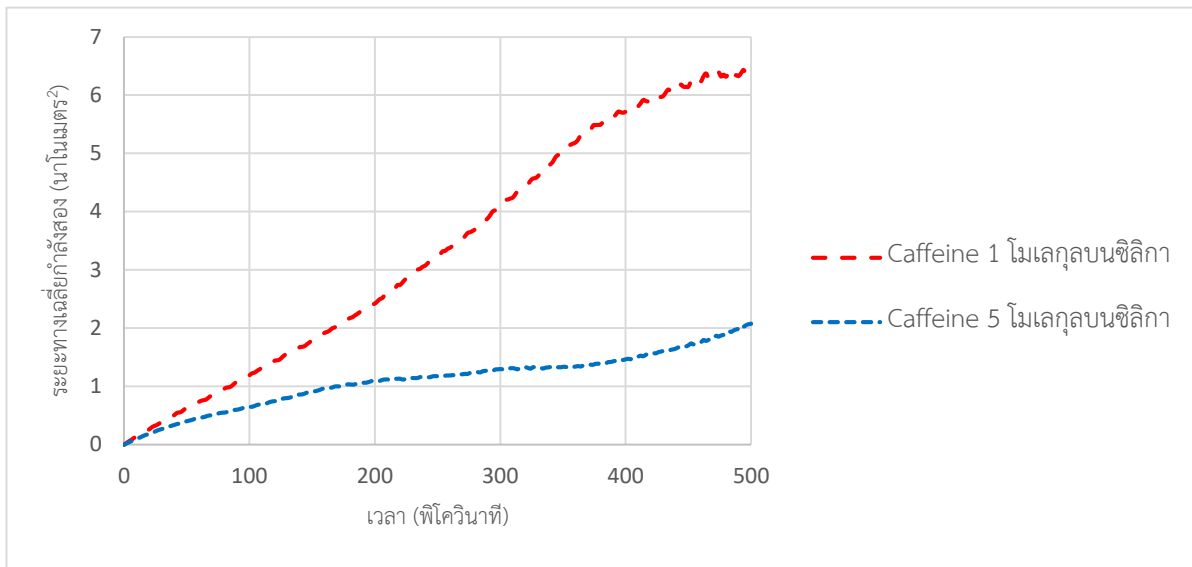
ศึกษาผลของจำนวนของ EGCG ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล



รูปที่ 4.13 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา

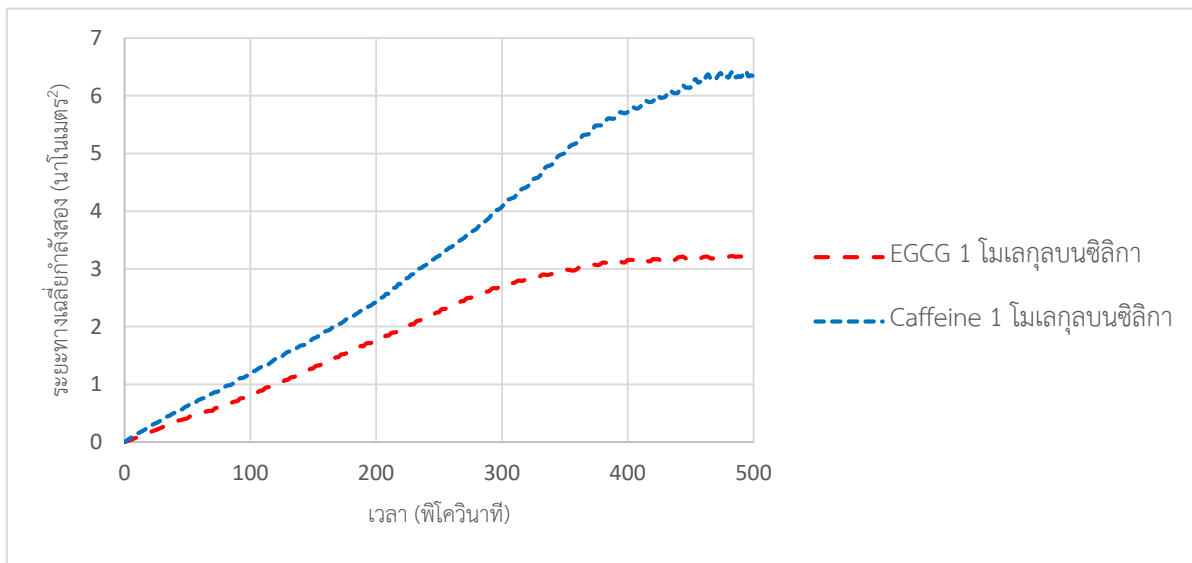


ศึกษาผลของจำนวนของ caffeine ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล



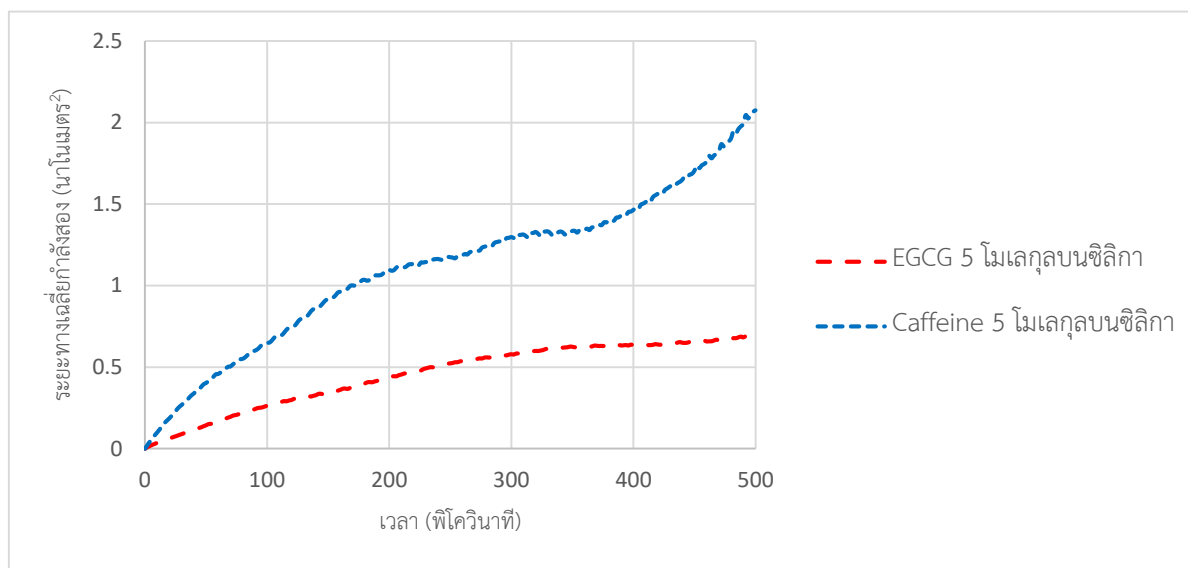
รูปที่ 4.14 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ caffeine 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา

ศึกษาผลของประเภทของสารตัวอย่างระหว่าง EGCG กับ caffeine ที่ 1 โมเลกุล



รูปที่ 4.15 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG และ caffeine 1 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา

ศึกษาผลของประเภทของสารตัวอย่างระหว่าง EGCG กับ caffeine ที่ 5 โมเลกุล



รูปที่ 4.16 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG และ caffeine 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกา

จากรูปที่ 4.13 ถึง 4.16 เป็นกราฟที่แสดงถึงระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลา รูปที่ 4.13 เปรียบเทียบ EGCG 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล พบว่าค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองของ EGCG ที่ 1 โมเลกุลมากกว่าที่ 5 โมเลกุล เนื่องจาก EGCG ที่ 5 โมเลกุลเกิดแรงระหว่างโมเลกุลส่งผลให้การเคลื่อนที่มีความเป็นอิสระน้อยลง รูปที่ 4.14 เปรียบเทียบ caffeine 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล พบว่าค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่ 1 โมเลกุลนั้นมีค่ามากกว่าที่ 5 โมเลกุลเช่นเดียวกับรูปที่ 4.13 รูปที่ 4.15 เปรียบเทียบระหว่าง EGCG และ caffeine ที่ 1 โมเลกุลพบว่าค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่ได้จากกราฟของ EGCG น้อยกว่า caffeine โดยเมื่อนำข้อมูลจากหัวข้อ 4.2.1. มาวิเคราะห์ทำให้ทราบว่า การดูดซับของ EGCG บนพื้นผิวซิลิกานั้นสามารถลดค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองได้ รูปที่ 4.16 เปรียบเทียบระหว่าง EGCG และ caffeine ที่ 5 โมเลกุล พบว่าผลที่ได้มีแนวโน้มเช่นเดียวกับรูปที่ 4.15

#### 4.2.3. สัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient, D)

สัมประสิทธิ์การแพร่เป็นตัวแปรที่แสดงถึงความเร็วในการเคลื่อนที่ของอนุภาคสามารถคำนวณได้จากระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (mean-square displacement, MSD) ตามที่ได้กล่าวในหัวข้อ 2.5.2. สำหรับการวิเคราะห์ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่บนพื้นผิวซิลิกา ถูกแสดงในตารางที่ 4.2

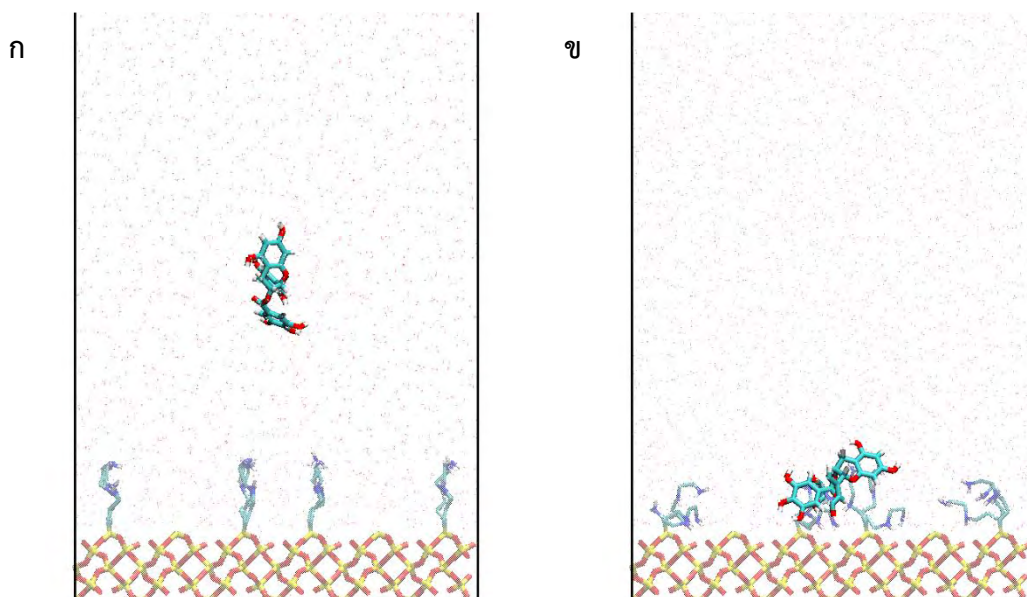
ตารางที่ 4.2 ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกา

| จำนวน     | $D_{EGCG}$ ( $10^{-5}$ cm <sup>2</sup> /s) | $D_{CAFF}$ ( $10^{-5}$ cm <sup>2</sup> /s) |
|-----------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|
| 1 โมเลกุล | 1.3443                                     | 2.4295                                     |
| 5 โมเลกุล | 0.1315                                     | 0.5474                                     |

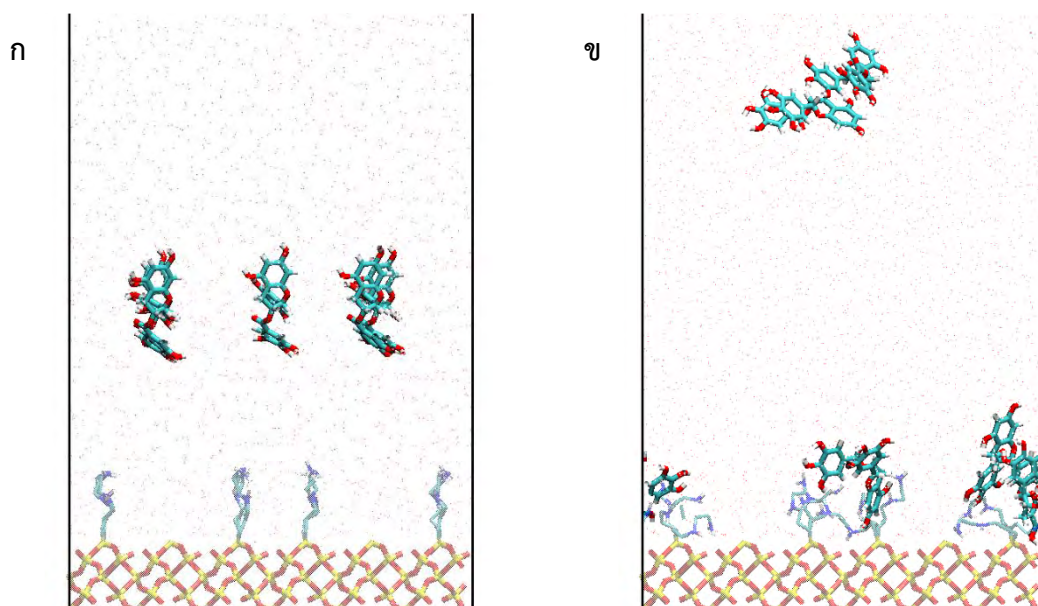
จากตารางที่ 4.2 พบว่าเมื่อเปรียบเทียบที่ 1 โมเลกุลของทั้ง EGCG และ caffeine ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG นั้นน้อยกว่า caffeine เนื่องจากเกิดพันธะไฮโดรเจนระหว่างอะตอมออกซิเจนของซิลิกาและอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุล EGCG ทำให้การเคลื่อนที่ของโมเลกุล EGCG ไม่เป็นอิสระ ทำให้พบว่าซิลิกาเป็นพื้นผิวที่สามารถดูดซับ EGCG แต่ไม่ดูดซับ caffeine อีกทั้งยังพบว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของทั้ง EGCG และ caffeine มีค่าลดลงเมื่อจำนวนโมเลกุลมากขึ้น ทั้งนี้เป็นผลมาจากค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่นำมาใช้คำนวณ กล่าวคือยิ่งโมเลกุลมากขึ้น โมเลกุลเหล่านั้นจะเกิดแรงระหว่างโมเลกุล ส่งผลให้การเคลื่อนที่ของโมเลกุลเหล่านั้นมีความเป็นอิสระน้อยลง ดังนั้นแนวโน้มของค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของทั้ง EGCG และ caffeine จึงมีค่าลดลงเมื่อจำนวนโมเลกุลมากขึ้น

#### 4.3. พฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน

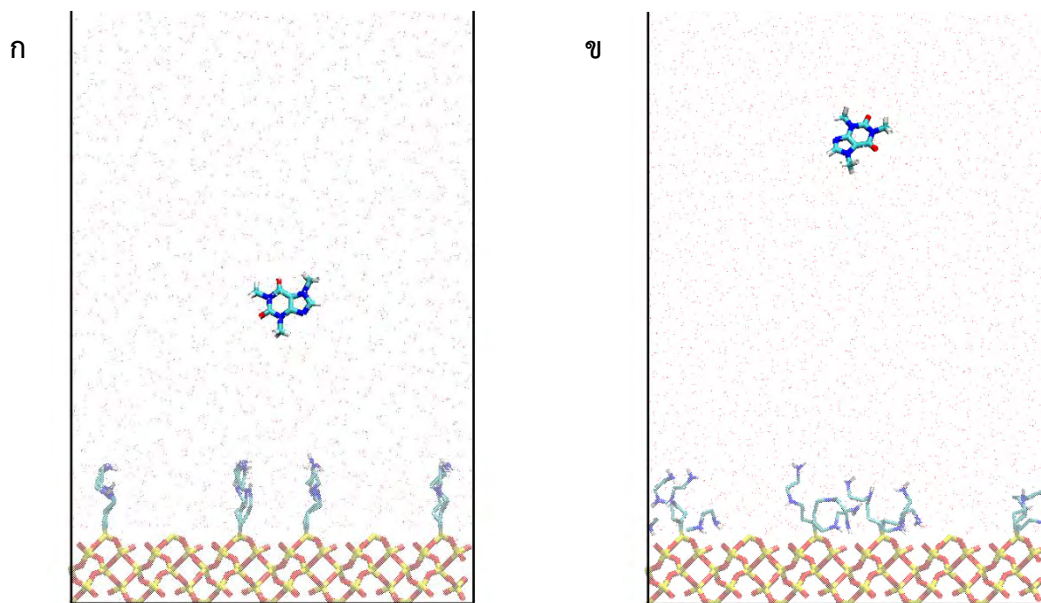
##### 4.3.1. ภาพการจำลองของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน



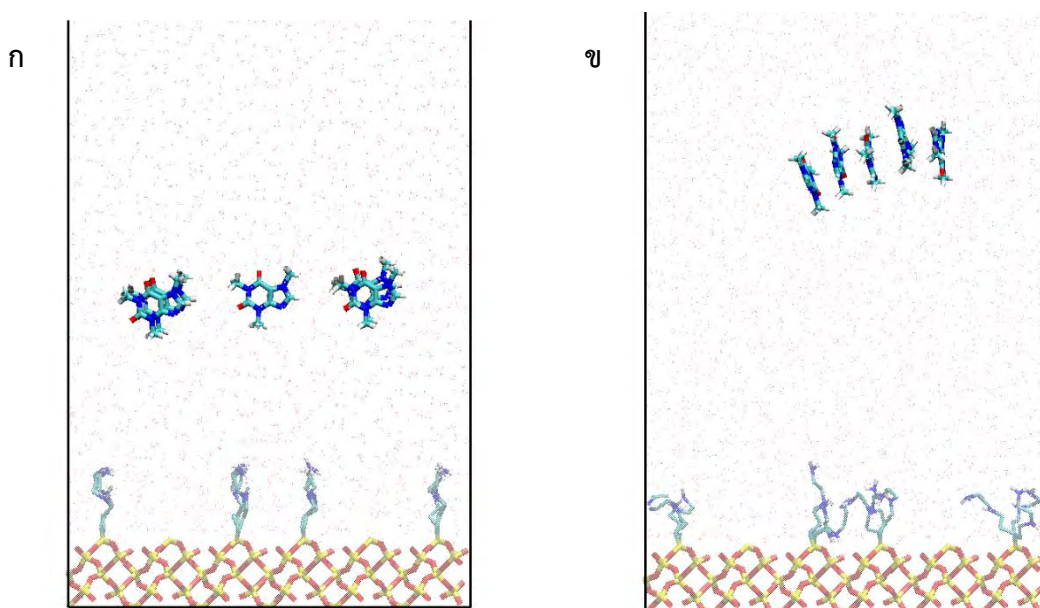
รูปที่ 4.17 VMD Snapshot ของ EGCG 1 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



รูปที่ 4.18 VMD Snapshot ของ EGCG 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



รูปที่ 4.19 VMD Snapshot ของ caffeine 1 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกตัดแปรด้วยหมู่เอมีน  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns



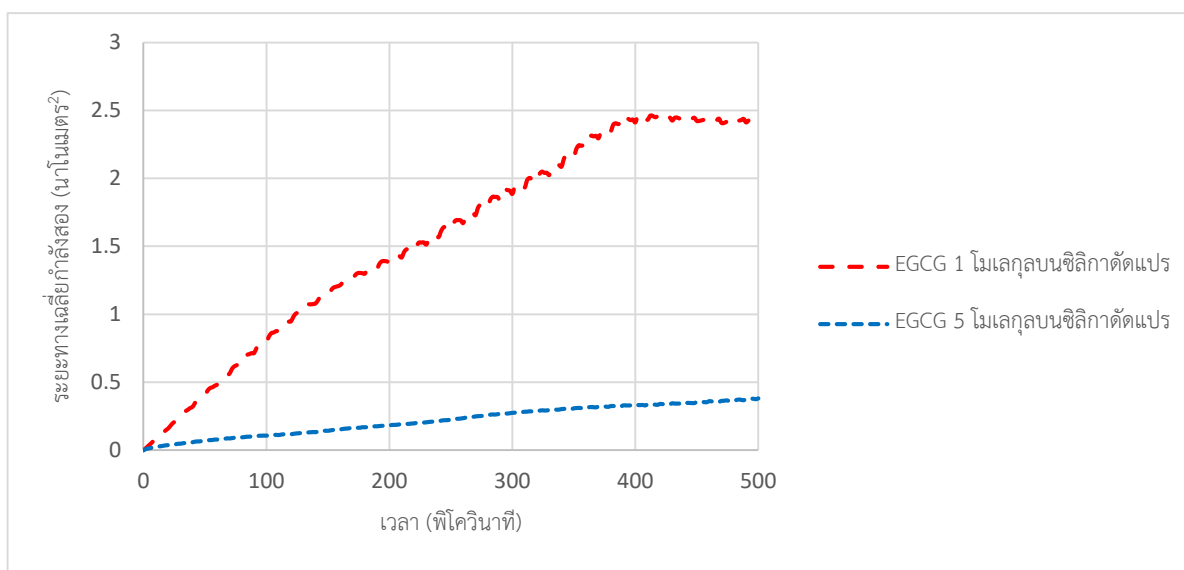
รูปที่ 4.20 VMD Snapshot ของ caffeine 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกตัดแปรด้วยหมู่เอมีน  
ภาพย่อย ก) ก่อนทำการจำลอง ข) หลังทำการจำลองเมื่อผ่านไป 20 ns

จากรูปที่ 4.17 ถึง 4.20 เมื่อเปรียบเทียบ EGCG และ caffeine ที่ 1 โมเลกุลพบว่า เมื่อเวลาผ่านไป EGCG 1 โมเลกุลมีการเคลื่อนที่เข้าใกล้พื้นผิวซิลิกามากขึ้น ซึ่งใช้เวลาในการเคลื่อนที่เร็วกว่าเมื่อเทียบกับหัวข้อ 4.2.1. แสดงให้เห็นถึงการเพิ่มหมู่เอมีนนั้นสามารถเพิ่มความสามารถในการดูดซับของซิลิกาที่มีต่อ EGCG แต่ในทางตรงกันข้าม caffeine ที่ 1 นั้นการเพิ่มหมู่เอมีนไม่ได้ช่วยเพิ่มการดูดซับของซิลิกาที่มีต่อ caffeine ทั้งนี้โมเลกุลของ caffeine ยังคงเคลื่อนที่ได้อย่างอิสระเช่นเดิม เมื่อเพิ่มโมเลกุลของ EGCG เป็น 5 โมเลกุล ยังพบว่าที่ EGCG 5 โมเลกุลนั้นมีการเคลื่อนที่ลงบนซิลิกาเช่นเดียวกับที่ 1 โมเลกุล

#### 4.3.2. ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (Mean-square displacement, MSD)

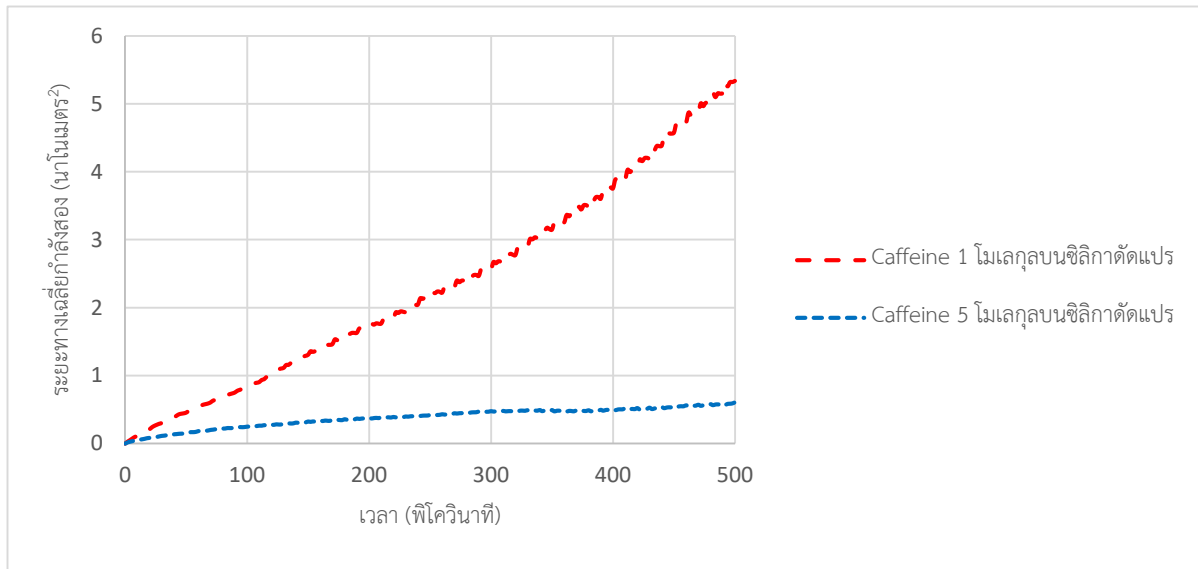
ระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเป็นปริมาณใช้วิเคราะห์ว่าอนุภาคที่เราสนใจว่ามีลักษณะการเคลื่อนที่เป็นอย่างไรตามที่กล่าวในหัวข้อที่ 2.5.1. โดยค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่คำนวณได้จะถูกนำไปใช้ต่อในการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่

ศึกษาผลของจำนวนของ EGCG ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล



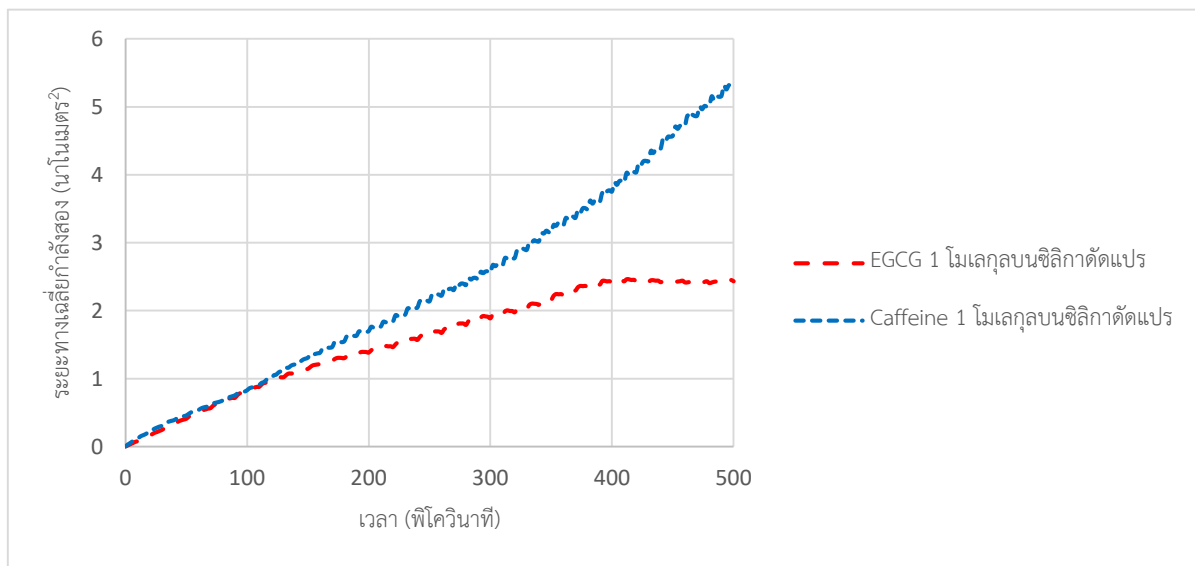
รูปที่ 4.21 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน

ศึกษาผลของจำนวนของ caffeine ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล



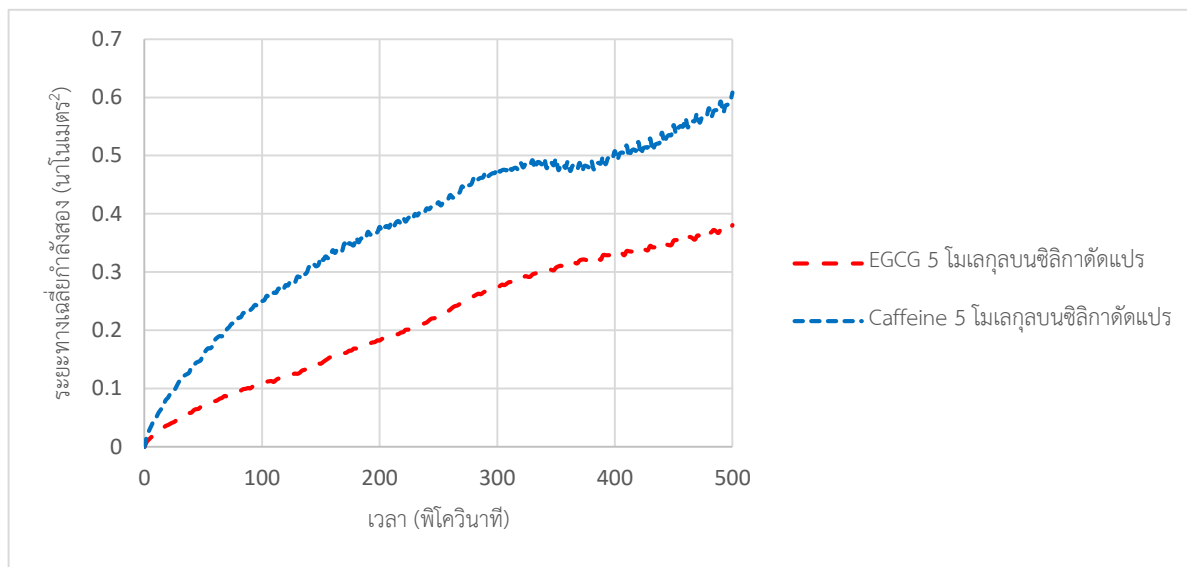
รูปที่ 4.22 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ caffeine 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกตัดแปรด้วยหมู่เอมีน

ศึกษาผลของประเภทของสารตัวอย่างระหว่าง EGCG กับ caffeine ที่ 1 โมเลกุล



รูปที่ 4.23 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG และ caffeine 1 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกตัดแปรด้วยหมู่เอมีน

ศึกษาผลของประเภทของสารตัวอย่างระหว่าง EGCG กับ caffeine ที่ 5 โมเลกุล



รูปที่ 4.24 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลาของระบบจำลองของ EGCG และ caffeine 5 โมเลกุลบนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกตัดแปรด้วยหมู่เอมีน

จากรูปที่ 4.21 ถึง 4.24 เป็นกราฟที่แสดงถึงระยะทางเฉลี่ยกำลังสองเทียบกับเวลา โดยมีรายละเอียดแต่ละรูปดังนี้ รูปที่ 4.21 เปรียบเทียบ EGCG ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล พบว่าค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองของ EGCG ที่ 1 โมเลกุลมากกว่าที่ 5 โมเลกุล เนื่องจากที่ 5 โมเลกุลเกิดแรงระหว่างโมเลกุลทำให้ความเป็นอิสระลดลง รูปที่ 4.22 เปรียบเทียบ caffeine ที่ 1 โมเลกุลและ 5 โมเลกุล พบว่าค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่ 1 โมเลกุลนั้นมีค่ามากกว่าที่ 5 โมเลกุลเช่นเดียวกับรูปที่ 4.21 รูปที่ 4.23 เปรียบเทียบ EGCG และ caffeine ที่ 1 โมเลกุล พบว่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองของ EGCG น้อยกว่า caffeine เมื่อเปรียบเทียบกับข้อมูลจากหัวข้อ 4.2.2. ยังพบว่าการตัดแปรเอมีนยังช่วยลดระยะทางเฉลี่ยกำลังสองของ EGCG ได้อีกด้วย รูปที่ 4.24 เปรียบเทียบระหว่าง EGCG และ caffeine ที่ 5 โมเลกุล พบว่าผลที่ได้มีแนวโน้มเช่นเดียวกับรูปที่ 4.23



#### 4.3.3. สัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient, D)

สัมประสิทธิ์การแพร่เป็นตัวแปรที่แสดงถึงความเร็วในการเคลื่อนที่ของอนุภาคสามารถคำนวณได้จากระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (mean-square displacement, MSD) ตามที่ได้กล่าวในหัวข้อ 2.5.2. สำหรับการวิเคราะห์ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่บนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน ถูกแสดงในตารางที่ 4.3

ตารางที่ 4.3 ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วยหมู่เอมีน

| จำนวน     | $D_{EGCG} (10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s})$ | $D_{CAFF} (10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s})$ |
|-----------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|
| 1 โมเลกุล | 0.6466                                     | 1.2396                                     |
| 5 โมเลกุล | 0.0685                                     | 0.2166                                     |

จากตารางที่ 4.3 เมื่อเปรียบเทียบที่ 1 โมเลกุลของทั้ง EGCG และ caffeine พบว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG นั้นน้อยกว่า caffeine และเมื่อนำข้อมูลจากหัวข้อ 4.3.1. แสดงให้เห็นว่าเกิดการดูดซับระหว่างซิลิกากับ EGCG แต่ไม่เกิดการดูดซับกับ caffeine เนื่องจากการดัดแปรหมู่เอมีน EDA จะเพิ่มพื้นที่ ทำให้เพิ่มการสร้างพันธะไฮโดรเจนระหว่างอะตอมไนโตรเจนของ EDA กับอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุล EGCG และมีพันธะไฮโดรเจนระหว่างอะตอมออกซิเจนของซิลิกากับอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุล EGCG จึงทำให้ค่าสัมประสิทธิ์แพร่ลดลง การดูดซับจึงมากขึ้น อีกทั้งยังพบว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของทั้ง EGCG และ caffeine มีค่าลดลงเมื่อจำนวนโมเลกุลมากขึ้น ทั้งนี้เป็นผลมาจากค่าระยะทางเฉลี่ยกำลังสองที่นำมาใช้คำนวณ กล่าวคือ ยิ่งโมเลกุลมากขึ้นโมเลกุลเหล่านั้นจะเกิดแรงระหว่างโมเลกุล ส่งผลให้การเคลื่อนที่ของโมเลกุลเหล่านั้นมีความเป็นอิสระน้อยลง ดังนั้นแนวโน้มของค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของทั้ง EGCG และ caffeine จึงมีค่าลดลงเมื่อจำนวนโมเลกุลมากขึ้น

## บทที่ 5

### สรุปผลการวิจัย

งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาพฤติกรรมของ EGCG และ caffeine ในน้ำ และพฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาและบนพื้นผิวซิลิกาที่ดัดแปรด้วยหมู่เอมีนด้วยการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล (molecular dynamics simulation) หมู่เอมีนที่ศึกษาคือเอทิลีนไดเอมีน (ethylenediamine, EDA) ผลการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลได้แก่ ภาพการจำลอง ระยะทางเฉลี่ยกำลังสอง (mean-square displacement, MSD) และสัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient, D)

ผลของพฤติกรรมของ EGCG และ caffeine ในน้ำ พบว่า ขนาดของโมเลกุลส่งผลต่อการแพร่ของสาร โดยจากผลการจำลอง EGCG มีขนาดโมเลกุลที่ใหญ่กว่าทำให้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ต่ำกว่า นั่นหมายถึงมีการเคลื่อนที่ได้ต่ำกว่า caffeine อีกทั้งยังพบว่าเมื่อโมเลกุลของสารเพิ่มขึ้นจาก 1 โมเลกุลเป็น 5 โมเลกุลยังทำให้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ลดลงอีกด้วย เนื่องจากโมเลกุลเหล่านั้นจะเกิดแรงภายในระหว่างโมเลกุลส่งผลให้การเคลื่อนที่ของโมเลกุลเหล่านั้นมีความเป็นอิสระน้อยลง ซึ่งสอดคล้องตามสมมติฐานที่วางไว้

ผลของพฤติกรรมการดูดซับ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกา พบว่า ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG น้อยกว่า caffeine เนื่องจากโครงสร้างโมเลกุลของ EGCG มีหมู่ไฮดรอกซิล (hydroxyl group, -OH) ขณะที่โครงสร้างโมเลกุลของ caffeine ไม่มีหมู่ไฮดรอกซิล ทำให้โมเลกุล EGCG เกิดการสร้างพันธะไฮโดรเจนกับพื้นผิวดูดซับได้มากกว่า caffeine ส่งผลให้เกิดการดูดซับของ EGCG บนพื้นผิวซิลิกา อีกทั้งยังพบว่าเมื่อเพิ่มโมเลกุลจาก 1 เป็น 5 โมเลกุลยังมีแนวโน้มเช่นเดียวกับ 1 โมเลกุล ซึ่งสอดคล้องตามสมมติฐานที่วางไว้

ผลของพฤติกรรมการดูดซับของ EGCG และ caffeine บนพื้นผิวซิลิกาถูกดัดแปรด้วย EDA พบว่าการดูดซับของ EGCG ดีกว่าบนพื้นผิวซิลิกา เพราะค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ EGCG บนพื้นผิวซิลิกาที่ถูกดัดแปรด้วย EDA มีค่าน้อยกว่าบนพื้นผิวซิลิกาที่ไม่ได้ดัดแปร เนื่องจากการดัดแปรหมู่เอมีนจะช่วยเพิ่มพื้นที่ให้การดูดซับและเพิ่มการสร้างพันธะไฮโดรเจนระหว่างอะตอมไนโตรเจนของ EDA กับอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุล EGCG นอกจากนี้ยังมีพันธะไฮโดรเจนระหว่างอะตอมออกซิเจนของซิลิกากับอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุล EGCG จึงทำให้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ลดลง การดูดซับจึงมากขึ้น ซึ่งเป็นประโยชน์ในการพัฒนาตัวดูดซับ

### เอกสารอ้างอิง

1. ยุทธศาสตร์ชา ปี 2560-2564. กองนโยบายและแผน มหาวิทยาลัยราชภัฏพิบูลสงคราม [ระบบออนไลน์]. แหล่งที่มา: <http://plan.psu.ac.th/datas/document/PolicyandStrategy/strategic/strategic-tea-60-64.pdf> [สืบค้นเมื่อ 20 พฤษภาคม 2020]
2. องค์ประกอบทางเคมีในใบชาสด. สถาบันชาและกาแฟ แห่งมหาวิทยาลัยแม่ฟ้าหลวง [ระบบออนไลน์]. แหล่งที่มา: [http://web2.mfu.ac.th/other/teainstitute/?page\\_id=133&lang=th](http://web2.mfu.ac.th/other/teainstitute/?page_id=133&lang=th) [สืบค้นเมื่อ 21 พฤษภาคม 2020]
3. Boehm, K., Borrelli, F., Ernst, E., Habacher, G., Hung, SK., Milazzo, S., Horneber, M., *Green tea (Camellia sinensis) for the prevention of cancer*. Cochrane Database of Systematic Reviews 2009, Issue 3.
4. Unno, T., Tago, M., Suzuki, Y., Nozawa, A., Sagesaka Y.M., Kakuda, T., Egawa, K., Kondo, K., *Effect of tea catechins on postprandial plasma lipid responses in human subjects*. British Journal of Nutrition, 2005.
5. Harold, N., Graham, Ph.D., *Green tea composition, consumption, and polyphenol chemistry*. Preventive Medicine. 1992, 21, 334-350.
6. Cotea, V.V., et al., *Mesoporous silica SBA-15, a new adsorbent for bioactive polyphenols from red wine*. Analytica Chimica Acta, 2012. 732: p. 180-185.
7. Yangui, A., M. Abderrabba, and A. Sayari, *Amine-modified mesoporous silica for quantitative adsorption and release of hydroxytyrosol and other phenolic compounds from olive mill wastewater*. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 2017. 70: p. 111-118.
8. Mariusz, B., *Amine-modified mesoporous silicas: Morphology-controlled synthesis toward efficient removal of pharmaceuticals*. Microporous and Mesoporous Materials, 2019, 278, 354-365
9. Liu, Y., Li, X., Huang, D., Liu, Y., Wang, H., Di, D., *Comparison of adsorption selectivity for (-)-epigallocatechin gallate and caffeine by porous materials modified with different amino groups*. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2017, 520, 166-172.
10. Green, RM. *Chronic caffeine ingestion sensitizes the A1 adenosine receptor-adenylate cyclase system in rat cerebral cortex*. J Clin Invest. 1986, 77 (1), 222-227

11. การดูดซับ (*Adsorption*). คลังปัญญามหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ PSU Knowledge Bank [ระบบออนไลน์]. แหล่งที่มา: <http://kb.psu.ac.th/psukb/bitstream/2010/6169/9/Chapter2.pdf> [สืบค้นเมื่อ 21 พฤษภาคม 2020]
12. R.A, Jesus., A.S, Rabelo., R.T, Figueiredo., L.C, Cides., *Synthesis and application of the MCM-41 and SBA-15 as matrices for in vitro efavirenz release study*. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*. 2016, 31, 153-159
13. Paul, Wolfgang B. "*Molecular Dynamics Simulation, Elementary Methods*. By J. M. Haile, Wiley, Chichester 1992, 489 Pp., Hardcover, £ 47.50, Isbn 0-471-81966-2." *Advanced Materials* 5 (1993): 223-24.