



รายงานการวิจัย

เรื่อง

การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอน  
ไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

A DFT study of anti-cancer drug adsorptions on boron nitride  
nanotube doping with transition metal



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

2562

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

(งานวิจัยนี้ได้รับทุนอุดหนุนจากงบประมาณแผ่นดินด้านการวิจัย ปีงบประมาณ 2562)



รายงานการวิจัย

เรื่อง

การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอน  
ไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

A DFT study of anti-cancer drug adsorptions on boron nitride  
nanotube doping with transition metal



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

2562

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

(งานวิจัยนี้ได้รับทุนอุดหนุนจากงบประมาณแผ่นดินด้านการวิจัย ปีงบประมาณ 2562)

## กิตติกรรมประกาศ

โครงการวิจัยเรื่อง การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอพีของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน สำเร็จด้วยดี เนื่องจากผู้วิจัยได้รับความอนุเคราะห์อย่างสูงจาก สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

ขอขอบคุณ ทุนอุดหนุนโครงการวิจัยจากงบประมาณแผ่นดินด้านการวิจัย มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม สำหรับทุนอุดหนุนในการทำงานวิจัยในครั้งนี้

ขอขอบคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.บรรจบ วันโน อาจารย์ประจำภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ที่ให้ความเอื้อเฟื้อในส่วนของซอฟต์แวร์ที่ใช้ในการทำวิจัย พร้อมทั้งให้ข้อเสนอแนะเพิ่มเติมทำให้งานวิจัยฉบับนี้มีความถูกต้องสมบูรณ์ยิ่งขึ้น ผู้วิจัยรู้สึกซาบซึ้งในความกรุณาของอาจารย์เป็นอย่างยิ่ง และขอขอบพระคุณเป็นอย่างสูงไว้ ณ โอกาสนี้

ขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา ผู้เป็นกำลังใจให้แก่ผู้วิจัยเสมอมา คุณค่าและประโยชน์อันเกิดจากงานวิจัยฉบับนี้ คณะผู้วิจัยขอมอบบูชาพระคุณบิดา มารดา ตลอดจนผู้มีพระคุณทุกท่านที่มีส่วนร่วมในการช่วยเหลือและขออนุญาตบูชาท่านบูรพาจารย์ทุกท่านที่ได้ประสิทธิ์ประสาทความรู้ด้วยความรักและเมตตา



ฉาณุกรณ์ ทับทิมใส

2562

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

**หัวข้อวิจัย** การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

**ผู้ดำเนินการวิจัย** ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ฉาณกรณ์ ทับทิมใส

**หน่วยงาน** สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

**ปี พ.ศ.** 2562

### บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ใช้การคำนวณด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (ดีเอฟที) สำหรับศึกษาพฤติกรรมการดูดซับและการตรวจจับยาต้านมะเร็ง 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มัสทีนและไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนผิวของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันชนิด (5,5) อาร์มแชร์และ (9,0) ซิกแซก ผลการศึกษาแสดงให้เห็นว่าโมเลกุลยาสามารถดูดซับบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ได้ การศึกษาการละลายในตัวทำละลายน้ำแสดงให้เห็นว่ากระบวนการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเป็นแบบคายพลังงาน นอกจากนี้ยังพบว่าโลหะแทรนซิชันสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับและการละลายให้ดีขึ้น การคำนวณแสดงให้เห็นว่าแถบพลังงานและความหนาแน่นสถานะเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจนเนื่องจากการดูดซับโมเลกุลยา ซึ่งสอดคล้องกับการเปลี่ยนแปลงการนำไฟฟ้าของท่อนาโนคาร์บอน การวิเคราะห์ออร์บิทัลเชิงฟังก์ชันแสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาของการให้และรับอิเล็กตรอนจำนวนมากระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ จากการคำนวณแสดงให้เห็นว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความว่องไวต่อโมเลกุลยามากกว่าท่อนาโนโบรอนแบบดั้งเดิม ดังนั้น ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจึงมีความเหมาะสมที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจวัดทางชีวภาพสำหรับตรวจหาปริมาณยา 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มัสทีนและไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ในสิ่งแวดล้อมและร่างกายมนุษย์หรือพัฒนาเป็นระบบนำส่งยาได้



**Research title** A DFT study of anti-cancer drug adsorptions on boron nitride nanotube doping with transition metal study

**Researcher** Assistant Professor Dr.Chanukorn Tabtimsai

**Organization** Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Rajabhat Maha Sarakham University

**Year** 2019

### ABSTRACT

In this work, a density functional theory (DFT) calculation was carried out for the adsorption behavior and detection of 5-fluorouracil, carmustine, and hydroxylcarbamide anti-cancer drugs on the exterior surfaces of pristine and transition metal- (TM) doped (5,5) armchair and (9,0) zigzag boron nitride nanotubes (BNNT). The results demonstrate that the drug molecules can adsorb on the BNNTs. Presence of polar solvent (water), the adsorption process of drugs on the pristine and doped BNNTs is exothermic reaction. Moreover, at the presence of TM doping and it was found that the doping increases the adsorption ability and solubility of the BNNTs. Calculations show that the energy gap and density of state of the TM-doped BNNT are significantly changed after the adsorption of drug molecules corresponding to change of electrical conductivity of bare BNNT. Furthermore, natural bond orbital analysis indicated a strong donor-acceptor interacts with drug molecules and BNNTs. Calculations suggest that the TM-doped BNNTs has a greater sensitivity for the drug molecules compared with the pristine BNNT. So our results represented that the TM-doped BNNTs have good potential as a biosensor for the determination of 5-fluorouracil, carmustine, and hydroxylcarbamide drugs in environmental and human and drug delivery systems

## สารบัญ

เรื่อง	หน้า
กิตติกรรมประกาศ .....	ก
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ .....	ข
บทคัดย่อภาษาไทย .....	ค
สารบัญ .....	ง
สารบัญตาราง .....	ช
สารบัญรูปภาพ .....	ฉ
<b>บทที่ 1 บทนำ</b> .....	1
1.1 ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการวิจัย .....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ .....	2
1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับการวิจัย .....	3
1.4 ขอบเขตของการวิจัย .....	3
<b>บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง</b> .....	5
2.1 นาโนเทคโนโลยี .....	6
2.2 วัสดุนาโน .....	7
2.2.1 ชนิดของวัสดุนาโน .....	7
2.2.2 คุณสมบัติของวัสดุนาโน .....	8
2.2.3 การนำวัสดุนาโนมาใช้ประโยชน์ .....	9
2.3 ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ .....	11
2.4 ระบบนำส่งยา .....	12
2.5 ยาต้านมะเร็ง .....	12
2.5.1 ฟลูออโรยูราซิล .....	13
2.5.2 คาร์มีสทีน .....	14
2.5.3 ไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ .....	14
2.6 เคมีคำนวณหรือการศึกษาเชิงทฤษฎี .....	15
2.6.1 การจำลองแบบทางคอมพิวเตอร์ .....	16
2.6.2 การหาโครงสร้างที่เหมาะสมและคำนวณพลังงานของโมเลกุล .....	16
2.6.3 การออกแบบโมเลกุล .....	17
2.6.4 วิธีกลศาสตร์ควอนตัม .....	19
2.6.5 ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น .....	22
2.6.6 เบซิสเซต ฟังก์ชัน (basis set function) .....	24
2.7 สมบัติของโมเลกุล .....	24

## สารบัญ (ต่อ)

เรื่อง	หน้า
2.7.1 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงาน (geometric and energetic properties) .....	24
2.7.2 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ (electronic theory) .....	25
2.7.3 ค่าเคมีคอลฮาร์ดเนสส์ (chemical hardness value) .....	25
2.7.4 ค่าอิเล็กทรอนิกส์เคมีคอลโพเนนเชียล (electronic componential value) .....	25
2.7.5 ค่าสัมลิกแกนนอิเล็กทรอนิกส์โทรเนกาติวิตี (Milliken electronegativity) .....	26
2.7.6 ความหนาแน่นสถานะ (density of state) .....	26
2.8 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง (related works) .....	27
<b>บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย</b> .....	<b>32</b>
3.1 เครื่องมือและโปรแกรมที่ใช้ในการทำวิจัย .....	32
3.2 แบบจำลองโมเลกุลที่ใช้ในการทำวิจัย .....	32
3.2.1 ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์และซิกแซกและยาต้านมะเร็ง	32
3.2.2 การดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์และซิกแซก .....	34
3.2.3 การดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซก .....	35
3.2.4 การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ .....	36
3.3 ขั้นตอนการคำนวณ .....	37
<b>บทที่ 4 ผลและอภิปรายผล</b> .....	<b>42</b>
4.1 การดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์และซิกแซก .....	42
4.1.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ .....	42
4.1.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ .....	48
4.1.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ .....	49
4.2 การดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซก .....	56
4.2.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซก.....	56

## สารบัญ (ต่อ)

เรื่อง	หน้า
4.2.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอน ไนไตรด์ชนิดซิกแซก .....	59
4.2.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโน โบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซก .....	61
4.3 การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ .....	
4.3.1 สมบัติทางโครงสร้างการดูดซับการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บน ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ .....	67
4.3.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่ อานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ .....	73
4.3.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่ อานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์.....	75
<b>บทที่ 5 สรุปผลการดำเนินวิจัย .....</b>	<b>83</b>
5.1 สมบัติทางโครงสร้าง .....	83
5.2 พลังงานการดูดซับและพลังงานการละลาย .....	83
5.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ .....	84
5.4 ข้อเสนอแนะ .....	85
<b>บรรณานุกรม .....</b>	<b>86</b>
<b>ภาคผนวก .....</b>	<b>91</b>
<b>ประวัติผู้วิจัย .....</b>	<b>103</b>

## สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
2.1	เปรียบเทียบคุณสมบัติของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และท่อนาโนคาร์บอน .....	9
4.1	ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยาราชิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	47
4.2	พลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ในระบบแก๊สและตัวทำละลายน้ำ พลังงานในการละลาย ( $E_{sol}$ ) ประจุของโลหะและการถ่ายโอนประจุ (PCT) ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยาราชิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ .....	49
4.3	พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{HOMO}$ ) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{LUMO}$ ) แลပ်พลังงาน ( $E_{gap}$ ) การเปลี่ยนแปลงแลပ်พลังงาน ( $\% \Delta E_{gap}$ ) ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยาราชิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ในระบบแก๊สและตัวทำละลายน้ำ .....	51
4.4	ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	59
4.5	พลังงานดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ในระบบแก๊สและในตัวทำละลายน้ำและพลังงานในการละลาย ( $E_{sol}$ ) ของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	60
4.6	พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แลပ်พลังงาน การเปลี่ยนแปลงแลပ်พลังงานและการถ่ายโอนประจุบางส่วนของ การดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	62
4.7	ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	69
4.8	พลังงานการดูดซับในระบบแก๊สและตัวทำละลายของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	75

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
4.9	พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แลบพลังงาน การเปลี่ยนแลบพลังงานและการถ่ายโอนประจุบางส่วนของกรดซัลฟิวริกไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	77



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
2.1	โครงสร้างและแถบพลังงานของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (4,4), (5,5) และ (6,6) อาร์มแชร์ .....	10
2.2	โครงสร้างและแถบพลังงานของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (4,0), (5,0) และ (6,0) ซิกแซก .....	10
2.3	โครงสร้างของ 5-ฟลูออโรยูราซิล (วาดโดยใช้โปรแกรม Chemdraw)	13
2.4	โครงสร้างของคาร์มัสทีน .....	14
2.5	โครงสร้างของไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ .....	14
2.6	การยึดจับกันของ glucocorticoid receptor กับ DNA ที่ได้จากการจำลอง ทางพลวัตเชิงโมเลกุล .....	15
2.7	ออร์บิทัลเชิงโมเลกุลสูงสุดที่มีการบรรจุอิเล็กตรอน (HOMO) ของเบสอะดีนีนที่มีแกนหลัก เป็นหมู่เปปไทด์นิวคลีอิกแอซิด ซึ่งได้จากการคำนวณทางกลศาสตร์ควอนตัม .....	16
2.8	การยึดจับกันของ HIV protease กับโมเลกุลตัวยับยั้งที่ได้จากวิธี molecular docking .....	16
2.9	แผนภาพการหาคำตอบของสมการโคห์น-ชามด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ .....	21
2.10	โครงสร้างของการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ .	27
2.11	การดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนฟลูออรีน .....	28
2.12	การดูดซับไอโซไนอาซิด (isoniazid) และไพราซิनाไมด์ (pyrazinamide) บนท่อนาโนคาร์บอน .....	29
2.13	การดูดซับออกซาโซล (oxazole) และไอโซออกซาโซล (isoxazole) บนท่อนาโน โบรอนไนไตรด์ .....	29
2.14	การดูดซับคาร์มัสทีน (carmustine) ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมหมู่ฟังก์ชันของ กรดคาร์บอกซิลิก .....	30
2.15	การดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม	31
3.1	แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิด (5,5) อาร์มแชร์ .....	33
3.2	แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิด (9,0) ซิกแซก .....	33
3.3	แบบจำลองทางโครงสร้างของ (a) 5-ฟลูออโรยูราซิล (b) คาร์มัสทีนและ (c) ไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ .....	33
3.4	แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	34

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
3.5	แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	35
3.6	แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	36
3.7	แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	37
3.8	การเตรียมโครงสร้างโดยใช้โปรแกรม Gaussview .....	37
3.9	การเลือกทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ .....	38
3.10	หน้าต่างโปรแกรม SSH สำหรับการส่งคำนวณงาน .....	38
3.11	ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ .....	39
3.12	ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ .....	40
4.1	โครงสร้างที่เสถียรของท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม (ก) (5,5) อาร์แชร์ และ (ข) (10,0) ซิกแซก .....	43
4.2	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์ (ก) 5FU/aBNNT และซิกแซก (ข) 5FU/zBNNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม .....	44
4.3	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ก) 5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT (ข) 5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT, (ค) 5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT (ง) 5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT, (จ) 5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT (ฉ) 5FU/Sc <sub>B</sub> zaBNNT (ช) 5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT และ (ซ) 5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม .....	46
4.4	การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ (ก) 5FU/aBNNT, (ข) 5FU/zBNNT, (ค) 5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT (ง) 5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT, (จ) 5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT (ฉ) 5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT, (ช) 5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT (ซ) 5FU/Sc <sub>B</sub> zaBNNT (ฌ) 5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT และ (ญ) 5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT .....	53



สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
4.5	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์ (ก) 5FU/aBNNT, (ข) 5FU/zBNNT, (ค) 5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT (ง) 5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT, (จ) 5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT (ฉ) 5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT, (ช) 5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT (ซ) 5FU/Sc <sub>B</sub> zaBNNT (ฅ) 5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT และ (ญ) 5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT (เส้นสีดำคือก่อนดูดซับและเส้นสีแดงคือหลังดูดซับ) .....	55
4.6	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซก (carmustine/zBNNT) .....	56
4.7	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับคาร์มีสทีนบนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ก) carmustine/Mn <sub>N</sub> -BNNT, (ข) carmustine/Tc <sub>N</sub> -BNNT, (ค) carmustine/Re <sub>N</sub> -BNNT, (ง) carmustine/Mn <sub>B</sub> -BNNT, (จ) carmustine/Tc <sub>B</sub> -BNNT และ (ฉ) carmustine/Re <sub>B</sub> -BNNT .....	58
4.8	การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับคาร์มีสทีนบนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์ดั้งเดิมชนิดซิกแซก .....	63
4.9	การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับคาร์มีสทีนบนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ก) carmustine/Mn <sub>N</sub> -BNNT, (ข) carmustine/Tc <sub>N</sub> -BNNT, (ค) carmustine/Re <sub>N</sub> -BNNT, (ง) carmustine/Mn <sub>B</sub> -BNNT, (จ) carmustine/Tc <sub>B</sub> -BNNT และ (ฉ) carmustine/Re <sub>B</sub> -BNNT .....	64
4.10	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม .....	65
4.11	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานโนโบรอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ก) carmustine/Mn <sub>N</sub> -zBNNT, (ข) carmustine/Tc <sub>N</sub> -zBNNT, (ค) carmustine/Re <sub>N</sub> -zBNNT, (ง) carmustine/Mn <sub>B</sub> -zBNNT, (จ) carmustine/Tc <sub>B</sub> -zBNNT และ (ฉ) carmustine/Re <sub>B</sub> -zBNNT .....	66
4.12	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม .....	70

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
4.13	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจน (ก) HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT, (ข) HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT, (ค) HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT, (ง) HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT, (จ) HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT, (ฉ) HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT, (ช) HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT, (ซ) HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT และ (ณ) HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT .....	71
4.14	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งโบรอน (ก) HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT, (ข) HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT, (ค) HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT, (ง) HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT, (จ) HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT, (ฉ) HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT, (ช) HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT, (ซ) HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT และ (ณ) HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT .....	72
4.15	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล (ก) HOMO และ (ข) LUMO ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม	78
4.16	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (ก) HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT, (ข) HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT, (ค) HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT, (ง) HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT (จ) HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT, (ฉ) HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT, (ช) HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT, (ซ) HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT และ (ณ) HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT .....	79
4.17	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (ก) HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT, (ข) HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT, (ค) HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT, (ง) HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT, (จ) HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT, (ฉ) HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT, (ช) HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT, (ซ) HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT และ (ณ) HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT .....	80
4.18	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม.....	81
4.19	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ก) HC/Fe <sub>N</sub> -BNNT, (ข) HC/Co <sub>N</sub> -BNNT, (ค) HC/Ni <sub>N</sub> -BNNT, (ง) HC/Ru <sub>N</sub> -BNNT, (จ) HC/Rh <sub>N</sub> -BNNT, (ฉ) HC/Pd <sub>N</sub> -BNNT, (ช) HC/Os <sub>N</sub> -BNNT, (ซ) HC/Ir <sub>N</sub> -BNNT และ (ณ) HC/Pt <sub>N</sub> -BNNT .....	81

## สารบัญญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
4.20	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ก) HC/Fe <sub>B</sub> -BNNT, (ข) HC/Co <sub>B</sub> -BNNT, (ค) HC/Ni <sub>B</sub> -BNNT, (ง) HC/Ru <sub>B</sub> -BNNT, (จ) HC/Rh <sub>B</sub> -BNNT, (ฉ) HC/Pd <sub>B</sub> -BNNT, (ช) HC/Os <sub>B</sub> -BNNT, (ซ) HC/Ir <sub>B</sub> -BNNT และ (ณ) HC/Pt <sub>B</sub> -BNNT .....	82



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## บทที่ 1 บทนำ

งานวิจัยเรื่องการศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอพีของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน ในบทที่ 1 ผู้วิจัยจะได้กล่าวถึงความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการวิจัย วัตถุประสงค์ของโครงการ ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากการวิจัยและขอบเขตของการวิจัย ซึ่งมีรายละเอียดดังนี้

### 1.1 ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการวิจัย

ยาเป็นหนึ่งในปัจจัยสี่ที่จำเป็นในการดำรงชีวิต เพราะมนุษย์ทุกคนต้องการมีสุขภาพที่ดี เมื่อเกิดการเจ็บป่วยขึ้น มนุษย์จำเป็นต้องพึ่งพายา การใช้ยาอย่างถูกต้องจึงเป็นสิ่งที่ทุกคนต้องกระทำ เพราะจะทำให้เกิดประโยชน์สูงสุดจากการทานยา จะส่งผลต่อประสิทธิภาพของการรักษาอาการเจ็บป่วย ปัญหาที่เกิดจากการใช้ยา เช่น ความไม่สม่ำเสมอของระดับยาในกระแสเลือด ยามีค่าครึ่งชีวิตในร่างกายสั้นหรือถูกทำลายด้วยกรดหรือน้ำย่อยในกระเพาะอาหาร อนุภาคของยาไม่สามารถไปยังอวัยวะเป้าหมายที่ต้องการรักษาได้อย่างเต็มที่ ดังนั้นการใช้ยาเพื่อการรักษาอาการเจ็บป่วยจึงต้องมีการพัฒนาอย่างต่อเนื่องซึ่งทำได้โดยการพัฒนาการควบคุมการปลดปล่อยยาเพื่อรักษาระดับยาในร่างกายให้คงที่และเพียงพอต่อการออกฤทธิ์ของยาเป็นระยะเวลาอันยาวนานเพื่อลดความถี่ของการใช้ยา และสามารถนำส่งยาไปยังอวัยวะเป้าหมายตามต้องการได้เพื่อควบคุมให้เกิดการปลดปล่อยยา ณ ตำแหน่งที่ต้องการให้ยาถูกดูดซึมหรือออกฤทธิ์ได้

ระบบนำส่งยาเป็นศาสตร์ที่อาศัยความรู้จากสาขาวิชาไว้ด้วยกันและเป็นแขนงที่ได้รับความสนใจจากนักวิจัยหลายแขนง ในทศวรรษที่ผ่านมา มีรายงานการวิจัยเกี่ยวกับการศึกษาเทคโนโลยีการนำส่งยาที่หลากหลาย ที่ได้รับความสนใจเป็นอันมากคือ การพัฒนาระบบนำส่งในระดับนาโนเมตร หรือที่เรียกว่า ‘อนุภาคนาโน’ ได้มีการพัฒนาอนุภาคนาโนไปใช้กับยาที่มีการใช้ในรูปแบบเดิม การนำส่งยาโปรตีน วัคซีนและนิวคลีโอไทด์ เป็นต้น โดยระบบนำส่งยาที่พัฒนาขึ้นทั้งในรูปอนุภาคนาโน หรือระบบคอลลอยด์อื่นๆ เหล่านี้ จะไปมีผลต่อค่าเภสัชจลนศาสตร์ การกระจายและการปลดปล่อยในร่างกาย (Parveen, *et al.*, 2012) แบบ modified release ซึ่งเป็นรูปแบบที่ควบคุมการปลดปล่อยยาด้วยวัตถุประสงค์ต่างๆ เช่น ให้มีระดับยาคงที่ในช่วงเวลาที่นานขึ้นหรือให้เกิดการปลดปล่อยยา ณ ตำแหน่งที่ต้องการ เช่น วิธี cardil control release, isoptin sustained release, mucosolvan prolonged release, xatral extended release เป็นต้น (สุพัตรา ผ่องใส, 2015) การพัฒนาการควบคุมการปลดปล่อยยามีจุดมุ่งหมายเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของการรักษาอาการเจ็บป่วยและลดอาการไม่พึงประสงค์หรืออาการข้างเคียงจากการใช้ยา ซึ่งการควบคุมการปลดปล่อยยามีหลายแบบทั้งในรูปโปรดรักส์ (prodrugs) ระบบนำส่งยาแบบกัมมันต์และระบบนำส่งยาแบบกายภาพ โดยเตรียมรูปแบบยาที่เหมาะสมต่างๆ ทั้งที่เป็นรูปแบบที่เตรียมโดยวิธีดั้งเดิม เช่น ยาเม็ด อิมัลชัน และรูปแบบที่เตรียมโดยเทคนิคเฉพาะที่พัฒนาขึ้นมาเพื่อให้ยามีอนุภาคเล็ก ได้แก่ ยารูปคอลลอยด์ เช่น โลโซโซม อนุภาคนาโน นาโนสเฟียร์ ไมโครสเฟียร์ เป็นต้น ระบบนำส่งยาโดยใช้เม็ดเลือดแดง โมโนโคลนอลแอนติบอดี ยาที่จับกับลิแกนด์ (ligand) หรือเวกเตอร์ที่เหมาะสมเพื่อนำส่งยาหรือ DNA ผ่านตัวรับ

จำเพาะของเซลล์ในอวัยวะต่างๆ เช่น ตับ ม้าม ไต ปอด และสมอง เป็นต้น ตลอดจนการใช้สนามแม่เหล็กในการนำส่งอนุภาคของยาผสมแม่เหล็กไปสู่อวัยวะเป้าหมาย การใช้ความร้อน แสงและการใช้เทคโนโลยีเข้ามามีส่วนร่วมช่วยในการนำส่งยา (จุไรรัตน์ นันทานิช, 2545)

วัสดุระดับนาโน (Gogotsi, 2006) มีความสำคัญในการประยุกต์ใช้งานหลายด้านด้วยกัน เช่น การศึกษาตัวตรวจวัดทางชีวภาพหรือไบโอเซ็นเซอร์ (biosensor) การสร้างภาพโมเลกุลซึ่งมีประโยชน์มากในทางการแพทย์ใช้สำหรับการวินิจฉัยโรค รวมถึงการรักษาอาการเจ็บป่วยด้วยยาที่ออกฤทธิ์ด้านมะเร็ง หนึ่งในวัสดุนาโนที่น่าสนใจและมีการศึกษาทางทฤษฎีและการทดลองกันอย่างกว้างขวางคือท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (boron nitride nanotube) (Baei, *et al.*, 2011) เนื่องจากมีสมบัติพิเศษต่างๆ อาทิเช่น ไม่เป็นพิษต่อร่างกายมนุษย์ มีสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติเชิงกล สมบัติทางความร้อน และสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ที่ดี มีพื้นที่ผิวมาก จากสมบัตินี้จึงมีการศึกษาการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์สำหรับนำไปประยุกต์ใช้ประโยชน์ในงานด้านไบโอเซ็นเซอร์ หรือวัสดุดูดซับ (adsorbent) และนำส่งยา (drug delivery) (Ciofani, 2010; Merlo, *et al.*, 2018) เพื่อควบคุมการปลดปล่อยและการนำโมเลกุลยาไปสู่อวัยวะเป้าหมาย มีงานวิจัยหลายชิ้นที่แสดงให้เห็นว่าการเติมอะตอมแปลกปลอม (impurity atom) หรือโลหะแทรนซิชันบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์สามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโมเลกุลยา ปรับปรุงความสามารถในการละลายในตัวทำละลายชนิดต่างๆ เช่น น้ำ ไดเมทิลซัลฟอกไซด์ (DMSO) และปรับปรุงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบปกติได้ ซึ่งการเติมอะตอมโลหะต่างชนิดกันบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และการดูดซับโมเลกุลยาที่มีโครงสร้างที่แตกต่างกันจะส่งผลให้ประสิทธิภาพในการดูดซับความสามารถในการละลายและการปรับปรุงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ที่แตกต่างกัน (Shakerzadeh & Noorizadeh, 2014; Soltani, *et al.*, 2015; Hesabi & Ardakani 2017)

การศึกษาเชิงทฤษฎี (theoretical study) หรือเคมีการคำนวณ (computational chemistry) เป็นสาขาหนึ่งของเคมีเชิงทฤษฎี (theoretical chemistry) เป็นการใช้แนวคิดทางทฤษฎีเคมีควอนตัมที่พิสูจน์ได้ทางฟิสิกส์และเคมีมาออกแบบหรือสร้างระบบจำลองโมเลกุลได้อย่างมีประสิทธิภาพ ยกตัวอย่างเช่น ระบบจำลองดีเอ็นเอ ระบบจำลองโปรตีน ระบบจำลองโครงสร้างระดับนาโน เป็นต้น ซึ่งสมการทางคณิตศาสตร์ในวิชาเคมีควอนตัมมีความซับซ้อนและความยุ่งยากจึงต้องใช้โปรแกรมการคำนวณโดยใช้คอมพิวเตอร์เข้ามาช่วยในการทำงาน ซึ่งคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงนี้เองที่เป็นเครื่องมือที่ช่วยให้นักเคมีคำนวณ เพื่อลดระยะเวลาในการค้นหาโครงสร้างหรือสมบัติต่างๆ ของโมเลกุลและลดการใช้สารเคมีในห้องปฏิบัติการก่อนทำการทดลองจริง การศึกษาในหัวข้อที่เกี่ยวข้องกับการดูดซับโมเลกุลยาจึงมีความจำเป็นที่ต้องมีการศึกษาเพิ่มเติม ซึ่งในงานวิจัยชิ้นนี้เลือกที่จะศึกษาเชิงทฤษฎีด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น ซึ่งเป็นวิธีที่ได้รับการยอมรับและมีความถูกต้องสูง โดยใช้การจำลองโมเลกุลในโปรแกรมทางคอมพิวเตอร์เพื่อออกแบบโมเลกุลยากับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ และศึกษาอันตรกิริยาที่เกิดขึ้น

## 1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ

1) เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิด (5,5) อาร์มแชร์และ (9,0) ซิกแซก

2) เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงาน ความสามารถในการละลายและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบอาร์มแชร์ขนาด (5,5) และซิกแซกขนาด (9,0) ที่มีการเติมสแกนเดียมและไททาเนียม

3) เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงาน ความสามารถในการละลายและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซกขนาด (9,0) ที่มีการเติมแมงกานีส เทคนิเชียมและรีเนียม

4) เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงาน ความสามารถในการละลายและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบอาร์มแชร์ขนาด (5,5) ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันหมู่ 8B

### 1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากการวิจัย

1) ได้สมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ สมบัติทางพลังงานของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

2) เข้าใจถึงความสามารถในการดูดซับ ความสามารถในการนำไฟฟ้าและความสามารถในการละลายของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ซึ่งเป็นความรู้พื้นฐานที่จะนำไปสู่การออกแบบการทดลองจริงในห้องปฏิบัติการสำหรับการศึกษาด้านไบโอเซ็นเซอร์และการดูดซับยาสำหรับการนำส่งและควบคุมการปลดปล่อยยา นำไปสู่ไปการพัฒนางานวิจัยด้านนาโนเทคโนโลยี

3) นำองค์ความรู้ที่ได้จากการทำงานวิจัยมาบูรณาการเข้ากับการเรียนการสอนในรายวิชา วิศวกรรมวิจัย วิชานาโนเทคโนโลยี วิชาวิทยาการใหม่ทางนาโนและนำองค์ความรู้ไปเผยแพร่ในการประชุมทางวิชาการหรือตีพิมพ์ในวารสารระดับชาติหรือนานาชาติ

### 1.4 ขอบเขตของการวิจัย

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาเชิงทฤษฎีด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ด้วยโปรแกรม Gaussian 09 โดยการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง คือความยาวพันธะและมุมพันธะ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ คือ พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (highest occupied molecular orbital energy, HOMO) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (lowest unoccupied molecular orbital energy, LUMO) แฉกพลังงาน (energy gap) การเปลี่ยนแปลงพลังงาน (energy gap change) การถ่ายโอนประจุ (charge transfer) การพล็อตออร์บิทัลของระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และออร์บิทัลของระดับพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO-LUMO plots) และความหนาแน่นสถานะ (density of states, DOS) และสมบัติทางพลังงานคือพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) พลังงานการละลาย (solvation energy) ในตัวทำละลายน้ำของการดูดซับโมเลกุลยากุ่มต้านมะเร็ง 3 ชนิดคือ 5-ฟลูออโรยูราซิล (5-fluorouracil) คาร์มีสทีน (carmustine) และไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ (hydroxylcarbamide) บนท่อ

นาโนโบรอนไนไตรด์ 2 ชนิดคืออาร์มแชร์ ขนาด (5,5) และซิกแซก ขนาด (9,0) ที่มีการเติมโลหะ  
แทรนซิชั่นดังนี้ การดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบอาร์มแชร์และซิกแซกที่มี  
การเติมสแกนเดียมและไททาเนียม การดูดซับคาร์มัสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซกที่มี  
การเติมแมงกานีส เทคนิเซียมและรีเนียมและการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนคาร์บอน  
แบบอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชั่นหมู่ 8B เนื่องจากเป็นการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโน  
โบรอนไนไตรด์ที่มีโครงสร้างและการเติมโลหะแทรนซิชั่นที่แตกต่างกัน ดังนั้นผู้วิจัยจะไม่เปรียบเทียบ  
ความสามารถในการดูดซับยาทั้งสามชนิด



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



## บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

งานวิจัยเรื่อง การศึกษาด้วยทฤษฎีเคอพีทีของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน เป็นการศึกษาเชิงทฤษฎีของการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์เพื่อเป็นความรู้พื้นฐานในการพัฒนาเป็นวัสดุสำหรับตรวจจับหรือกักเก็บและนำส่งยา ในบทที่ 2 ผู้วิจัยจะได้กล่าวถึงทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับนาโนเทคโนโลยี วัสดุระดับนาโน ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ ระบบนำส่งยา ยากลุ่มต้านมะเร็ง เคมีคำนวณหรือการศึกษาเชิงทฤษฎี สมบัติของโมเลกุล และงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง โดยมีรายละเอียดดังนี้

### 2.1 นาโนเทคโนโลยี

ปัจจุบันนาโนเทคโนโลยีเข้ามามีบทบาทอย่างมากในการพัฒนาประเทศ ไม่ว่าจะเป็นเทคโนโลยีด้านชิ้นส่วนอิเล็กทรอนิกส์ เทคโนโลยีด้านสุขภาพ เทคโนโลยีด้านพลังงาน เป็นต้น ซึ่งในอนาคตเทคโนโลยีระดับนาโนจะได้รับการพัฒนาอย่างต่อเนื่องไม่มีที่สิ้นสุด นักวิทยาศาสตร์ได้แบ่ง นาโนเทคโนโลยีเป็น 3 สาขาหลัก คือ นาโนเทคโนโลยีชีวภาพ นาโนอิเล็กทรอนิกส์และวัสดุระดับนาโนซึ่งนักวิทยาศาสตร์หลายแขนงได้นำวัสดุระดับนาโนมาใช้ในการพัฒนาเทคโนโลยีระดับนาโน เช่น วัสดุนาโนสำหรับการกักเก็บพลังงานสะอาด เช่น การกักเก็บแก๊สไฮโดรเจน วัสดุนาโนสำหรับใช้ในทางการแพทย์เพื่อเป็นสารนำส่งยา วัสดุนาโนที่ใช้เป็นชิ้นส่วนอิเล็กทรอนิกส์เพื่อควบคุมการนำไฟฟ้า วัสดุผสมระดับนาโนสำหรับการตรวจจับแก๊สที่มีความไวและเจาะจง วัสดุผสมพอลิเมอร์ระดับนาโนเพื่อให้ได้วัสดุใหม่ที่มีความแข็งแรง ทนความร้อน แร้งอัดและสามารถยืดหยุ่นได้ เป็นต้น วัสดุระดับนาโนที่ได้รับความสนใจเป็นอย่างมาก เป็นที่รู้จักอย่างกว้างขวางและมีงานวิจัยตีพิมพ์ออกมาอย่างต่อเนื่องคือท่อนาโนคาร์บอน (carbon nanotube) ท่อนาโนคาร์บอนถูกสังเคราะห์ขึ้นครั้งแรกในปี ค.ศ. 1991 โดยนักวิทยาศาสตร์ชาวญี่ปุ่น ชื่อซูมิโอะ อิจิมะ (Sumio Iijima) ไม่เพียงแต่ท่อนาโนคาร์บอนจะเป็นอนุภาคที่มีขนาดเล็กระดับนาโนเท่านั้น แต่ยังมีสมบัติที่โดดเด่นอีกหลายประการ เช่น มีสมบัติเชิงกลที่ดีคือมีความแข็งแรงกว่าเหล็ก แต่สามารถยืดหยุ่นได้ มีสมบัติทางความร้อนที่ดีคือมีความจุความร้อนที่สูง มีสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ที่ดีคือเป็นได้ทั้งตัวไฟฟ้าและสารกึ่งตัวนำไฟฟ้า เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา มีพื้นที่ผิวมาก สามารถยึดเกาะกับโมเลกุลชนิดอื่นได้และอื่นๆ ดังที่ได้กล่าวไว้แล้วในข้างต้น (Iijima, 1991; Iijima & Ichihashi, 1993)

นาโนเทคโนโลยี (nanotechnology) (ศูนย์นาโนเทคโนโลยี, ม.ป.ป.) เป็นสหสาขาวิชา (multidisciplinary area) ที่ต้องอาศัยความรู้ทางวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีจากหลากหลายสาขารวมเข้าด้วยกันทั้งเคมี ฟิสิกส์ ชีววิทยา อิเล็กทรอนิกส์และอื่นๆ โดยเฉพาะอย่างยิ่งสาขาคอมพิวเตอร์ สำหรับการประกอบและผลิตสิ่งต่างๆ จากการจัดเรียงตัวของอนุภาคที่มีขนาดเล็ก เช่น อะตอมหรือโมเลกุลในระดับนาโนเมตร อุตสาหกรรมนาโนในอนาคตจะเป็นอุตสาหกรรมระดับโมเลกุลที่มีการจัดเรียงอนุภาคอะตอมตามความต้องการในการใช้งานวิวัฒนาการของนาโนเทคโนโลยีสู่เชิงพาณิชย์ได้มากยิ่งขึ้น นาโนเทคโนโลยี มี 3 สาขาหลัก คือ



ก. นาโนเทคโนโลยีชีวภาพ (nanobiotechnology) เป็นการประยุกต์ใช้นาโนเทคโนโลยีศาสตร์ด้านชีวภาพ เช่น การพัฒนานาโนไบโอเซนเซอร์ หรือ หัวตรวจวัดสารชีวภาพ และสารวินิจฉัยโรคโดยใช้วัสดุชีวโมเลกุล การปรับโครงสร้างระดับโมเลกุลของยา ที่สามารถหวังผลการมุ่งทำลายชีวโมเลกุลที่เป็นเป้าหมายเฉพาะเจาะจง เช่น เซลล์มะเร็ง การประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมเครื่องสำอาง ในการส่งผ่านสารบำรุงเข้าสู่ชั้นใต้ผิวหนังได้ดียิ่งขึ้น เป็นต้น

ข. นาโนอิเล็กทรอนิกส์ (nanoelectronics) เป็นการประยุกต์ใช้นาโนเทคโนโลยีศาสตร์ด้านนาโนอิเล็กทรอนิกส์ (ไฮเทค) เพื่อทำให้ผลิตภัณฑ์มีคุณภาพและทำงานด้วยประสิทธิภาพสูง ตัวอย่างเช่น การพัฒนาระบบไฟฟ้าเครื่องกลจุลอุปกรณ์ การผลิตเซลล์แสงอาทิตย์ การพัฒนานาโนชิป ทำให้คอมพิวเตอร์ทำงานได้รวดเร็วและมีประสิทธิภาพสูง การพัฒนา high density probe storage device เป็นต้น

ค. วัสดุนาโน (nanomaterials) การประยุกต์ใช้นาโนเทคโนโลยีศาสตร์ด้านวัสดุนาโน เช่น การเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาในอุตสาหกรรม การพัฒนาฟิล์มพลาสติกนาโนคอมโพสิตหรือพอลิเมอร์ผสม (nanocomposite) ที่มีความสามารถในการสกัดกั้นการผ่านของแก๊สบางชนิดและไอน้ำ เพื่อใช้ทำบรรจุภัณฑ์เพื่อยืดอายุความสดของผักและผลไม้และเพิ่มมูลค่าการส่งออก การผลิตผลอนุภาคนาโนมาใช้ในการฆ่าเชื้อแบคทีเรีย ไวรัส หรือทำให้ไม่เปียกน้ำ เป็นต้น

## 2.2 วัสดุนาโน

วัสดุนาโน (nanomaterial) หมายถึงวัสดุที่มีขนาดอย่างน้อยหนึ่งมิติเป็นขนาดนาโน ขนาดประมาณ 1 ถึง 100 นาโนเมตร ตามมาตรฐาน ISO/TS 80004-1:2010(E) ซึ่งพัฒนามาจากมาตรฐาน ISO/TS 27687:2008 หรือมีโครงสร้างของพื้นผิวหรือของโพรงภายในอยู่ในระดับนาโน (Nano safety, 2010) วัสดุนาโนเป็นวัสดุที่กำลังดึงดูดความสนใจของนักวิทยาศาสตร์ทั่วโลกในช่วงทศวรรษนี้เป็นอย่างมากและเป็นไปด้วยความรวดเร็วอย่างที่วัสดุอื่นๆ ไม่เคยได้รับมาก่อน สาเหตุสำคัญเนื่องมาจากศักยภาพของวัสดุนาโนที่สามารถทำการปฏิวัติงานด้านวัสดุศาสตร์ให้เกิดขึ้นและนำมาใช้ประโยชน์ได้อย่างมหัศจรรย์ผ่านโครงสร้างในระดับอะตอมซึ่งเป็นตัวควบคุมสมบัติทางด้านวิศวกรรมศาสตร์ สมบัติทางฟิสิกส์และทางเคมี เช่น สภาพแม่เหล็ก (magnetic) ตัวเร่งปฏิกิริยา (catalysis) หรือพฤติกรรมทางแสง (optic) เป็นต้น นอกจากนี้ยังทำให้เกิดการพัฒนาเทคโนโลยีและนวัตกรรมด้านต่าง ๆ เช่น ด้านอิเล็กทรอนิกส์ เซรามิกส์ ตัวเก็บข้อมูลแม่เหล็ก (magnetic data Storage) รวมทั้งพฤติกรรมเชิงกลของวัสดุ ก่อรูปพลาสติกยิ่งยวด (superplastic) ตลอดจนวิทยาศาสตร์และวิทยาการด้านอื่น ๆ มากมาย การพัฒนาโครงสร้างนาโนของวัสดุก่อให้เกิดคำถามที่เพิ่มขึ้นอย่างมากมายว่าทำไม คุณสมบัติต่าง ๆ ของวัสดุจึงเปลี่ยนแปลงไปเมื่อลดสเกลโครงสร้างจากระดับไมโครสเกล ( $10^6$  เมตร) ลงสู่ระดับนาโนสเกล ( $10^9$  เมตร) เช่น มีค่าความเครียดเชิงกลสูงชัน (mechanical strength) การกระจายแสงเพิ่มขึ้น ค่าความร้อนจำเพาะสูงชันและสภาพความต้านทานไฟฟ้าเปลี่ยนไป เมื่อเปรียบเทียบกับวัสดุเดิมของตัวมันเอง (ศุภกร ภูเกิด, 2549)

### 2.1.1 ชนิดของวัสดุนาโน

วัสดุนาโนสามารถแบ่งออกเป็นประเภทย่อยๆ 2 วิธีด้วยกัน ได้แก่

วิธีที่ 1 แบ่งโดยพิจารณาว่าวัสดุนั้นได้รับการผลิตขึ้นโดยตั้งใจหรือไม่ วิธีนี้แบ่งวัสดุนาโนออกได้เป็น 3 ประเภท ได้แก่

ก. วัสดุนาโนที่พบได้ตามธรรมชาติ (natural nanomaterial) หมายถึงวัสดุนาโนที่มีปะปนอยู่กับสิ่งแวดล้อม (ดิน น้ำ บรรยากาศ) ทั่วไป เช่น อนุภาคของแร่ต่างๆ จากไฟไหม้ป่า ฯลฯ

ข. วัสดุนาโนที่มนุษย์สร้างขึ้นโดยบังเอิญ (incidental nanomaterial) หมายถึงวัสดุนาโนที่ไม่ได้มีอยู่เดิมในธรรมชาติ แต่ไม่ได้รับการสังเคราะห์ขึ้นมาอย่างจงใจ เป็นต้นว่าอนุภาคในควันไฟที่พบได้เสมอในครัว หรือแม้แต่ที่มองไม่เห็นว่าเป็นควัน เช่นจากการเผาเชื้อเพลิงที่เรียกว่าแอลกอฮอล์แข็ง หรือในไอเสียจากเครื่องยนต์ชนิดต่างๆ

ค. วัสดุนาโนที่มนุษย์สร้างขึ้นโดยบังเอิญ มักจะมีขนาดต่างๆ กัน ทั้งในระดับนาโนและใหญ่กว่านาโน ปะปนกันอยู่วัสดุนาโนที่ผลิตขึ้น (manufactured nanomaterial) หมายถึงวัสดุนาโนที่ไม่พบปกติในธรรมชาติ แต่ได้รับการออกแบบ และผลิตขึ้นอย่างจงใจ ให้มีสมบัติโดยเฉพาะเจาะจง และมีขนาดใกล้เคียงกัน

วิธีที่ 2 แบ่งโดยพิจารณาโครงสร้างของวัสดุนั้น ว่ามีขนาดภายนอกอยู่ในระดับขนาดนาโนหรือไม่ วิธีนี้แบ่งวัสดุนาโนออกได้เป็น 2 ประเภท ได้แก่

ก. วัสดุนาโน (nano-object) มีขนาดภายนอก ไม่ว่าจะ 1 หรือ 2 หรือทั้ง 3 มิติเป็นขนาดนาโน

ข. วัสดุที่มีโครงสร้างนาโน (nanostructured material) ถึงแม้ภายนอกจะมีขนาดใหญ่กว่านาโน แต่ก็มีโพรง มีรู หรือมีส่วนประกอบที่มีขนาดนาโน ผสมหรือเป็นส่วนประกอบอยู่ด้วย ตัวอย่างเช่นผงที่มีโครงสร้างนาโน (nanostructured powder) วัสดุผสมนาโน (nanocomposite) วัสดุนาโนกระจายตัว (dispersion) วัสดุนาโนที่มีรูพรุน (nanoporous material) วัสดุที่มีนาโนบนพื้นผิว (surface-structured nanomaterial) และ อนุภาคที่มีโครงสร้างนาโนเป็นแกนและเปลือก (nanostructured core-shell particle) (Nano safety, 2010)

### 2.2.2 คุณสมบัติของวัสดุนาโน

ก. คุณสมบัติเชิงแสงที่ต่างไปจากเดิม

โดยทั่วไป ทองคำแบบก้อนจะมีสีเหลืองอย่างที่เรารู้จักกัน แต่ถ้าย่อขนาดทองคำให้เล็กลงไปเรื่อย ๆ จนมีขนาดอนุภาคเล็กกว่าความยาวคลื่นแสงที่มากตกกระทบมาก ๆ จะทำให้เกิดปรากฏการณ์เชิงแสงที่เรียกว่าเซอร์เฟซ พลาสมอน เรโซแนนซ์ (surface plasmon resonance: SPR) ซึ่งจะทำให้อนุภาคนาโนของทองคำนั้นดูดกลืนสเปกตรัมของแสงที่อยู่ในช่วงสีเขียว (ความยาวคลื่นประมาณ 520 นาโนเมตร)

ข. ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่สูงขึ้น

วัสดุที่มีขนาดในระดับนาโนเมตรจะมีอัตราส่วนระหว่างพื้นที่ผิวต่อปริมาตรสูงมาก เมื่อเปรียบเทียบกับวัสดุชนิดเดียวกันที่มีขนาดใหญ่กว่า ด้วยเหตุนี้จึงทำให้วัสดุที่มีขนาดระดับนาโน

มีจำนวนอะตอมที่อยู่บริเวณผิวหน้าสูงมาก ส่งผลให้เกิดปฏิกิริยาเคมีบนพื้นผิวหน้าวัสดุได้ง่ายขึ้น และยังเอื้อต่อการเกิดปรากฏการณ์ต่าง ๆ อันเนื่องมาจากความเร็วต่อการเกิดปฏิกิริยาทางเคมีของบริเวณผิวหน้าของวัสดุ ตัวอย่างเช่น วัสดุที่มีความขุ่นกลายเป็นใส (ทองแดงนาโน) สารเคลือบที่เกิดปฏิกิริยายากกลายเป็นสารเร่งปฏิกิริยาที่มีความว่องไวสูง (ทองคำขาวนาโน) สารที่มีความเสถียรกลับกลายเป็นติดไฟได้ง่าย (อะลูมิเนียมนาโน) ของแข็งกลายเป็นของเหลวที่อุณหภูมิห้อง (ทองคำนาโน) และสารที่เป็นฉนวนไฟฟ้ากลายเป็นสารนำไฟฟ้า (ซิลิคอนนาโน) ทองคำเห็นเป็นสีแดงทับทิม (ruby red)

ค. ความแข็งและความแข็งแรงที่เพิ่มขึ้นกว่าเดิม

วัสดุโลหะและเซรามิกส์ที่มีขนาดเกรน (grain size) ในระดับนาโนเมตรจะมีความแข็งแรงและความทนทานต่อการแตกหักสูงมากกว่าวัสดุชนิดเดียวกันที่มีขนาดเกรนในระดับไมโครเมตรหรือที่ใหญ่กว่า เช่นเดียวกันกับโลหะที่มีโครงสร้างผลึกในระดับนาโนจะมีความแข็งแรงและความแข็งสูงกว่าโลหะที่มีขนาดผลึกใหญ่ มีสมบัติในการต้านทานกระแสไฟฟ้าได้มากขึ้น มีความจุความร้อนจำเพาะมากขึ้นและสามารถขยายตัวได้ดีมากขึ้นกว่าเดิม ตัวอย่างเช่น โลหะทองแดงที่มีขนาดเกรนในระดับนาโนเมตรจะมีความแข็งสูงกว่าทองแดงปกติถึง 5 เท่า หรืออนุภาคระดับนาโนเมตรของอะลูมิเนียมส่งผลให้โครงสร้างของอะลูมิเนียมนาโนมีความเหนียวและแข็งแรงมากขึ้นกว่าอะลูมิเนียมในขนาดปกติ

### 2.2.3 การนำวัสดุนาโนมาใช้ประโยชน์

การใช้ประโยชน์จากวัสดุนาโน (ศุภกร ภูเกิด, 2549) มีหลากหลายศาสตร์สาขา เนื่องจากวิทยาการทางด้านนาโนศาสตร์เป็นความรู้ใหม่ อีกทั้งศักยภาพของวัสดุนาโนมีคุณสมบัติครอบคลุมศาสตร์ต่างๆ หลากหลายแขนงการประยุกต์ใช้ประโยชน์ในภาพรวมดังนี้

ก. ทางด้านอิเล็กทรอนิกส์ (integrated electronics and optoelectronics) เช่น หน่วยความจำ (memory cell) ที่มีขนาดประมาณ 90 นาโนเมตรและคาดว่าจะลดขนาดลงเหลือประมาณ 22 นาโนเมตร วัสดุพลาสติกอิเล็กทรอนิกส์ (plastic electronics) อุปกรณ์ตรวจวัดทางชีวภาพ (biosensors) อุปกรณ์ตรวจจับทางเคมี (chemical sensors) หรืออุปกรณ์แสดงผลโครงสร้างสุขภาพ (structural health monitoring) เป็นต้น

ข. ทางด้านเทคโนโลยีชีวภาพนาโนและการแพทย์นาโน (bionanotechnology and nanomedicine) เช่น การขนส่งยาไปยังที่หมายเฉพาะ (targeted drug delivery) การแสดงภาพโมเลกุล (molecular imaging) ตัวต่อต้านจุลชีพ (antimicrobial agents) เนื้อเยื่อและโครงนาโน (tissues and scaffolds) หรือเครื่องแสดงผลสุขภาพอัจฉริยะ (smart health monitoring)

ค. ทางด้านวิศวกรรมศาสตร์ (engineering) เช่น วัสดุเชิงกลนาโน (nanomechanics materials) ระบบไฟฟ้าเชิงกลนาโน (nanoelectro-mechanical systems) วัสดุโครงสร้างอัจฉริยะ (smart materials structures) วัสดุและโครงสร้างป้องกันไฟ (fire retardant materials and structures) วัสดุประกอบ (composites) หรือพลาสติกยิ่งยวด (superplastic) เป็นต้น

4. ทางด้านพลังงาน เช่น เป็นวัสดุกักเก็บเชื้อเพลิงไฮโดรเจน (hydrogen storage) ไฟฟ้าเคมี (electrochemistry) เซลล์สุริยะ (solar cell) หรือท่อคาร์บอนความหนาแน่นกระแสสูง (highest current density carbon nanotubes) เป็นต้น

5. การวิจัยวิทยาศาสตร์พื้นฐาน ฟิสิกส์ เคมีและชีวภาพ งานวิจัยทางด้านนาโนศาสตร์ยังมีความจำเป็นอย่างยิ่งในการอาศัยหลักการ ทฤษฎีและองค์ความรู้ทางวิทยาศาสตร์พื้นฐาน ในการอธิบายปรากฏการณ์ต่าง ๆ ที่เกิดขึ้น เช่น คุณสมบัติที่เปลี่ยนแปลงไปทางฟิสิกส์หรือเคมีของวัสดุนาโนที่แตกต่างไปจากวัสดุเดิมในระดับไมโคร เป็นต้น

### 2.3 ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์

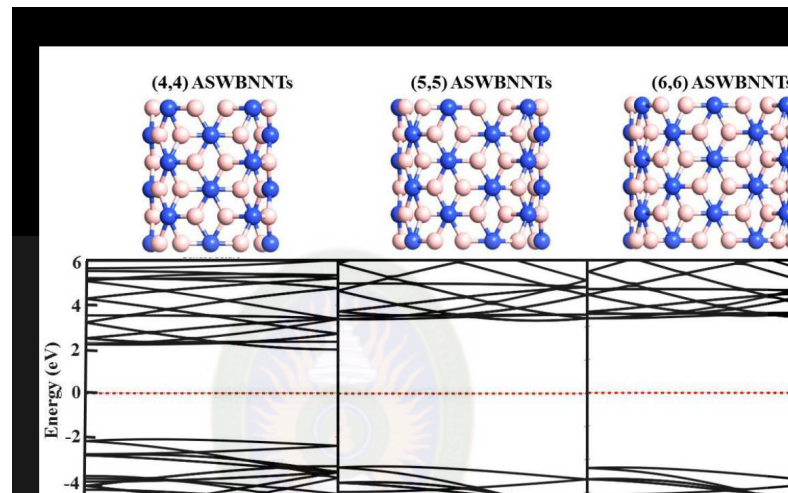
ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (boron nitride nanotube, BNNT) มีการจำลองโมเลกุลเชิงทฤษฎีในปี ค.ศ 1994 (Rubio, 1994) และถูกสังเคราะห์ขึ้นในปี 1995 โดย Chopra และคณะ (Chopra, *et al.*, 1995) จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์พบว่าจัดเป็นสารกึ่งตัวนำที่มีค่าแถบพลังงานอยู่ในช่วง 3.5 - 5.5 อิเล็กตรอนโวลต์ ขึ้นอยู่กับความยาวของท่อและลักษณะของโครงสร้าง มีความเสถียรที่อุณหภูมิสูงถึง 2,300 องศาเซลเซียส มีคุณสมบัติเหมือนกราฟไฟต์คือเป็นวัสดุที่โปร่งใสและนำไฟฟ้าได้ดีโดยเฉพาะอย่างยิ่งที่อุณหภูมิสูง ( $10^6 \Omega\text{m}$  ที่ 1000 องศาเซลเซียส) มีความคงทนต่อสารเคมี มีความแข็งแรงมาก โครงสร้างโบรอนไนไตรด์ เป็นคู่สารประกอบที่มีการสังเคราะห์ขึ้นระหว่างธาตุโบรอนซึ่งอยู่หมู่ 3 และไนโตรเจนซึ่งอยู่หมู่ 5 ในตารางธาตุ และแสดงคุณสมบัติมีหลายหลายรูปแบบและมีลักษณะเชิงกลใกล้เคียงกับคาร์บอน และมีสารประกอบที่มีอยู่ในธาตุหมู่ 3 และหมู่ 5 เช่น แกลเลียมไนไตรด์ อะลูมิเนียมไนไตรด์ ถูกจำลองโมเลกุลเชิงทฤษฎีได้เช่นกัน โครงผลึกของโบรอนไนไตรด์พบว่าจะตกผลึกเป็นชั้นมีโครงสร้างพันธะแบบเตตระฮีดรอลลักษณะคล้ายกราฟไฟต์และเพชร ขึ้นอยู่กับขั้นตอนในการการเตรียมโดยเฉพาะอย่างยิ่งการใช้ความดัน เช่น ความสัมพันธ์ระหว่างพันธะโบรอน ไนโตรเจนและคาร์บอน การเปรียบเทียบคุณสมบัติของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และท่อนาโนคาร์บอนแสดงดังตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 เปรียบเทียบคุณสมบัติของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และท่อนาโนคาร์บอน

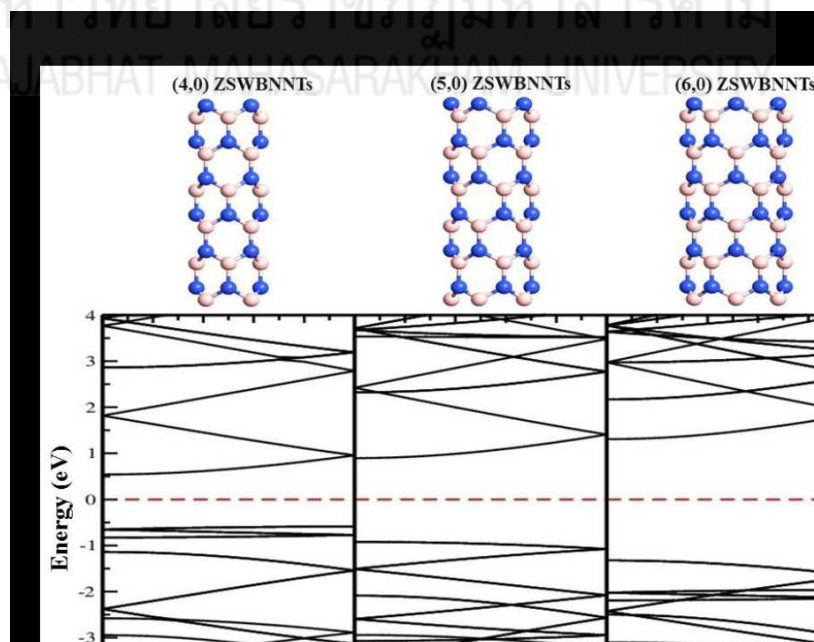
คุณสมบัติ	ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์	ท่อนาโนคาร์บอน
สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์	ฉนวน ค่าแถบพลังงานประมาณ 5.5 eV	ตัวนำไฟฟ้าหรือกึ่งตัวนำ
ค่ามอดูลัสของยัง	1.18 TPa	1.33 TPa
การนำความร้อน	~ 3,000 W/mK (Cu=400 W/mK)	60 - 40,000 W/mK
ความเป็นขั้ว	มีขั้วถาวร, Piezoelectric = 0.25-0.4 C/m <sup>2</sup>	ไม่มีขั้ว
ชีวการแพทย์	ไม่เป็นพิษ	มีความเป็นพิษ
สี	ขาว/เทา	ดำ
พื้นผิว	ลูกฟูก	เรียบ
ค่าสัมประสิทธิ์การขยายตัวเนื่องจากความร้อน	$-1 \times 10^{-6}$	$-1 \times 10^{-6}$

ที่มา: Chopra & Zettl, 1998; Dolati, *et al.*, 2012; Duclaux, *et al.*, 1992; Jakubinek, *et al.*, 2015; Kim, *et al.*, 2001; Krishnan, *et al.*, 1998

Mohammed ได้สร้างแบบจำลองเชิงทฤษฎีด้วยวิธีฟังก์ชันความหนาแน่น (density function theory, DFT) ของโครงสร้างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (4,4), (5,5) และ (6,6) อาร์มแชร์ (armchair boron nitride nanotube, aBNNT) และ (4,0), (5,0) และ (6,0) ซิกแซก (zigzag boron nitride nanotube) พร้อมทั้งรายงานคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และเทอร์โมอิเล็กทริกส์ของท่อทั้งสองชนิด (Mohammed, 2018) โครงสร้างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์และซิกแซกและแถบพลังงานแสดงดังภาพที่ 2.1 และ 2.2 ตามลำดับ



ภาพที่ 2.1 โครงสร้างและแถบพลังงานของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (4,4), (5,5) และ (6,6) อาร์มแชร์ (อะตอมสีน้ำเงินคือไนโตรเจนและอะตอมสีชมพูคือโบรอน)



ภาพที่ 2.2 โครงสร้างและแถบพลังงานของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (4,0), (5,0) และ (6,0) ซิกแซก



## 2.4 ระบบนำส่งยา

ปัจจุบันมีการพัฒนาเทคนิคการนำส่งยา (drug delivery) หลากหลายรูปแบบ การนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโนแม่เหล็ก (magnetic drug targeting: MDT) เป็นอีกหนึ่งวิธีที่กำลังได้รับความสนใจ ข้อดีของระบบการนำส่งยาดังกล่าวคือ (1) สามารถนำส่งยาไปยังอวัยวะเป้าหมายในร่างกายได้อย่างมีประสิทธิภาพ (2) ลดขนาดยา (dose) ที่จะถูกนำส่งเข้าสู่ร่างกาย โดยที่ปริมาณยายังอยู่ในระดับที่เหมาะสมต่อการรักษาบริเวณเป้าหมาย (3) การลดขนาดยาที่นำส่งเข้าสู่ร่างกายผู้ป่วยจะช่วยลดผลข้างเคียงที่เกิดขึ้นได้ (ธีระพงศ์ พวงมะลิ, 2556) แต่อย่างไรก็ตาม จากการศึกษาในปัจจุบันพบว่าระบบการนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโนแม่เหล็กยังมีขีดจำกัดหลายประการ ปัจจัยหลักที่ส่งผลกระทบต่อประสิทธิภาพการนำส่งยา คือ ความเข้มของสนามแม่เหล็กที่สามารถควบคุมตำแหน่งของอนุภาคแม่เหล็กในบริเวณที่ลึกจากผิวหนังมากๆ เนื่องจากอนุภาคแม่เหล็กมีขนาดเล็กมาก จะมีการตอบสนองต่อสนามแม่เหล็กภายนอกลดลงตามไปด้วย และกระแสเลือดในร่างกายก็มีผลต่อการควบคุมตำแหน่งของอนุภาคนาโนแม่เหล็กไปยังอวัยวะเป้าหมายเช่นเดียวกัน นอกจากนี้ ระบบนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโนที่มีการศึกษา ในปัจจุบันมักมุ่งเน้นไปยังมะเร็ง หรือเนื้องอกในระยะที่ตรวจพบและเห็นได้ชัดเจนแล้วเท่านั้น ในขณะที่มะเร็งในระยะเริ่มต้นยังไม่มีการศึกษามากเท่าที่ควร ถึงแม้ว่าการนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโนแม่เหล็กยังอยู่ในช่วงเริ่มต้นการศึกษา และการพัฒนาเทคนิคเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการนำส่งยา แต่จากผลการศึกษาครั้งแรกในกลุ่มสัตว์ทดลอง (Lubbe, *et al.*, 1996) พบว่าอนุภาคนาโนแม่เหล็กกว่า 50% สามารถเข้าสู่เซลล์เป้าหมายได้ จากการทดลองดังกล่าวทำให้มีแนวโน้มที่จะประยุกต์ใช้ในการรักษาโรคต่าง ๆ เช่น โรคมะเร็ง (Ferrari, 2005) โรคหัวใจ (Wickline, *et al.*, 2007) หรือโรคที่เกี่ยวข้องกับระบบประสาท (Corotet, *et al.*, 2004) เป็นต้น จากความก้าวหน้าในการวิจัยเกี่ยวกับระบบการนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโนแม่เหล็กทำให้แนวคิดของ Paul Ehrlich ที่ถูกนำเสนอในช่วงปี ค.ศ. 1854-1915 เกี่ยวกับ กระสุนวิเศษ (magicbullet) หรือการรักษาโรคเฉพาะจุดด้วยตัวนำส่งยาที่สามารถเลือกเป้าหมายการรักษาได้ มีแนวโน้มที่จะเข้าใกล้สู่ความจริงมากยิ่งขึ้น

ข้อเสียหลักของการรักษามะเร็งด้วยวิธีทั่วไป เช่น วิธีเคมีบำบัด (chemotherapy) คือการรักษาไม่เฉพาะจุด ทำให้ผู้ป่วยต้องรับยาด้วยปริมาณที่มากเพียงพอต่อการรักษา ส่งผลต่อเนื้อเยื่อปกติในร่างกายของผู้ป่วย และเกิดผลข้างเคียงตามมา อย่างไรก็ตามหากการรักษาสามารถนำส่งยาไปยังอวัยวะเป้าหมายในร่างกายได้อย่างมีประสิทธิภาพ และลดขนาดยาที่จะถูกนำส่งเข้าสู่ร่างกาย โดยที่ปริมาณของยายังอยู่ในระดับที่เหมาะสมต่อการรักษาอวัยวะเป้าหมายจะช่วยลดผลข้างเคียงที่เกิดขึ้นกับผู้ป่วยได้

แนวคิดการนำส่งยาไปยังอวัยวะเป้าหมาย (บริเวณที่เกิดเนื้องอก หรือมะเร็ง) ด้วยอนุภาคนาโนแม่เหล็ก เริ่มขึ้นในปี ค.ศ. 1970 โดยมีเป้าหมายในการนำส่งยาเพื่อ (1) สามารถนำส่งยาไปยังอวัยวะเป้าหมายในร่างกายได้อย่างมีประสิทธิภาพ (2) ลดปริมาณยาที่จะถูกนำส่งเข้าสู่ร่างกาย โดยที่ขนาดของยายังอยู่ในระดับที่เหมาะสมต่อการรักษาอวัยวะเป้าหมาย (3) ลดปริมาณยาที่นำส่งเข้าสู่ร่างกายจะช่วยลดผลข้างเคียงที่เกิดขึ้นกับผู้ป่วย โดยยารักษาโรคมะเร็งจะถูกยึดติดกับอนุภาคนาโนแม่เหล็กที่ถูกเคลือบด้วยสารที่สามารถเข้ากับร่างกายของสิ่งมีชีวิตอนุภาคที่ถูกเคลือบด้วย ยาเหล่านี้จะถูกฉีดเข้าสู่ร่างกายและกระจายไปยังส่วนต่าง ๆ ของร่างกายผ่านระบบหมุนเวียนเลือด การควบคุมอนุภาค

เหล่านี้ไปยังอวัยวะเป้าหมายทำได้โดยการควบคุมเกรเดียนท์ที่เกิดขึ้นจากสนามแม่เหล็กภายนอก เมื่ออนุภาคเหล่านี้มาถึงตำแหน่งเป้าหมาย การควบคุมการปลดปล่อยยาสามารถทำได้โดยกระบวนการควบคุมโดยเอนไซม์เฉพาะที่เกิดขึ้นบริเวณของเนื้อเยื่อที่ผิดปกติหรืออาจควบคุมการปลดปล่อยยาผ่านเงื่อนไขของค่า pH ที่สามารถเกิดปฏิกิริยาเคมี หรือแม้กระทั่งอุณหภูมิที่เกิดปฏิกิริยาทางเคมีระหว่างสารที่เคลือบกับอนุภาคนาโนแม่เหล็ก และเอนไซม์ที่เกิดจากเนื้อเยื่อที่ผิดปกติจะเห็นว่าวิธีการนำส่งยาดังกล่าวจะช่วยลดขนาดยาและสามารถนำส่งยาไปยังอวัยวะเป้าหมายได้อย่างมีประสิทธิภาพ

กลไกการนำยาเข้าสู่เซลล์เป้าหมายถือเป็นอีกหนึ่งประเด็นที่กำลังได้รับความสนใจ โดยในปัจจุบันมีหลากหลายเทคนิคในการเพิ่มประสิทธิภาพการนำส่งยาสู่เซลล์เป้าหมาย โดยทั่วไปแล้วมักมีการเคลือบผิวอนุภาคแม่เหล็กด้วยโมเลกุลที่มีความจำเพาะต่อเนื้อเยื่อที่ผิดปกติ หรือเซลล์มะเร็ง (tumor cell) ตัวอย่างเช่น การเคลือบด้วย receptor-ligand หรือแอนติเจน-แอนติบอดี (antigen-antibody) ที่มีความจำเพาะกับเซลล์มะเร็งก็จะช่วยให้อนุภาคแม่เหล็กอยู่ในบริเวณเป้าหมายได้นานยิ่งขึ้น ตัวอย่างของลิแกนด์ที่มีถูกใช้ เช่น โพรตีน (Kresse, *et al.*, 1998) เปปไทด์ (Wunderbaldinger, *et al.*, 2002) หรือโมเลกุลเล็ก ๆ เป็นต้น monoclonal antibodies (mAbs) เป็นอีกหนึ่งตัวอย่างของแอนติบอดีที่มีการศึกษาอย่างแพร่หลาย (Tiefenauer, *et al.*, 1993) เนื่องจากมีความสามารถในการจดจำเชิงโมเลกุล (molecular recognition) และสามารถนำพาอนุภาคแม่เหล็กไปยังเซลล์มะเร็งได้อย่างมีประสิทธิภาพ

## 2.5 ยาต้านมะเร็ง

ยาต้านมะเร็ง (anti-cancer drug) หรือ ยาเคมีบำบัด ยาซีโม ที่มาจากคำว่า chemotherapy รวมไปถึงชื่อเรียกสั้นๆ ว่า ยามะเร็ง จุดมุ่งหมายในการใช้มีหลายประการด้วยกัน เช่น การให้ยาก่อนการผ่าตัดเพื่อลดขนาดก้อนมะเร็ง หรือการให้ยาหลังการผ่าตัดเพื่อป้องกันการแพร่กระจายของเซลล์มะเร็ง นอกจากนี้ยังให้ยาเพื่อรักษามะเร็งโดยตรง (วสุ ศุภรัตน์สิทธิ, 2556)

### 2.5.1 ฟลูออโรยูราซิล (5-fluorouracil)

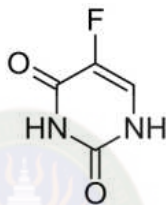
ยาฟลูออโรยูราซิลหรืออีกชื่อหนึ่งว่า “5FU (5 fluorouracil)” มีฤทธิ์ในการยับยั้งการสร้างสารรหัสพันธุกรรมโดยขัดขวางการสังเคราะห์โครงสร้างพื้นฐานของสารรหัสพันธุกรรมดีเอ็นเอและอาร์เอ็นเอที่มีชื่อว่า ไทมิดีน (thymidine) ทำให้ร่างกายไม่สามารถสร้างสารรหัสพันธุกรรมที่สมบูรณ์ได้จึงนำไปสู่การยับยั้งการแบ่งตัวของเซลล์เก่าเพื่อให้ได้เซลล์ใหม่

ปัจจุบันยาฟลูออโรยูราซิลมี 2 รูปแบบเภสัชภัณฑ์คือ ยาฉีดเข้าเส้นเลือด/หลอดเลือดดำ (intravenous, IV) และยาน้ำชนิดใช้ภายนอก (topical solution) ซึ่งยาทั้งสองรูปแบบมีสถานะทางกฎหมายเป็นยาควบคุมพิเศษและยาอันตราย อย่างไรก็ตามการใช้ยานี้ควรอยู่ภายใต้ความดูแลของแพทย์เฉพาะทางด้านโรคมะเร็งเท่านั้น

ยาฟลูออโรยูราซิลมีสรรพคุณ/ข้อบ่งใช้เพื่อรักษามะเร็งดังต่อไปนี้เช่น

- ก. มะเร็งเต้านม (breast cancer)
- ข. มะเร็งลำไส้ใหญ่ที่รวมลำไส้ใหญ่ส่วนลำไส้ตรงด้วย (colonrectal cancer)
- ค. มะเร็งตับอ่อน (pancreatic cancer)
- ง. มะเร็งกระเพาะอาหาร (gastric cancer)

นอกจากนี้ยังมีการใช้ในข้อบ่งใช้อื่นๆ ที่ไม่ได้รับการขึ้นทะเบียน (unlabeled use) ซึ่งขึ้นอยู่กับพิจารณาของแพทย์ผู้รักษาเช่น มะเร็งทวารหนัก (anal cancer) มะเร็งกระเพาะปัสสาวะ (bladder cancer) มะเร็งปากมดลูก (cervical cancer) มะเร็งอวัยวะระบบศีรษะและคอ (head and neck cancer) มะเร็งท่อน้ำดี (hepatobiliary cancer) เนื้องอกหรือมะเร็งเนื้องอก (NET; Neuro endocrine tumor) เนื้องอกหรือมะเร็งที่เกิดจากความผิดปกติของเซลล์อวัยวะระบบต่อมไร้ท่อ หรือเซลล์ที่สร้างฮอร์โมนได้ มะเร็งองคชาติ/มะเร็งอวัยวะเพศชาย (penile cancer) มะเร็งต่อมไทมัส (thymic cancer) สำหรับยาฟลูออโรยูราซิลชนิดใช้ทาภายนอก มีข้อบ่งใช้เพื่อรักษาเนื้องอกที่ผิวหนังชนิด Actinic Keratosis และมะเร็งผิวหนังชนิด superficial basal cell carcinoma โครงสร้างของ 5-ฟลูออโรยูราซิล แสดงดังภาพที่ 2.3



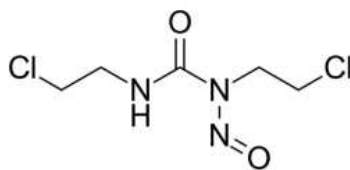
ภาพที่ 2.3 โครงสร้างของ 5-ฟลูออโรยูราซิล

### 2.5.2 คาร์มัสทีน

คาร์มัสทีน (carmustine) หรือ ไบคลอโรเอทิลไนโตรโซยูเรีย (bischloroethylnitrosourea) (BCNU) เป็นยากลุ่มไนโตรโซยูเรีย ออกฤทธิ์โดยเกิดหมู่แอลคิล (alkyl group) ซึ่งไวต่อการเกิดปฏิกิริยาทางเคมีเข้าไปจับกับดีเอ็นเอ (DNA) หรืออาร์เอ็นเอ (RNA) ของเซลล์มะเร็ง ส่งผลให้สายดีเอ็นเอแยกจากกันไม่ได้ ทำให้เซลล์แบ่งตัวไม่ได้และตายไปในที่สุด

คาร์มัสทีน ใช้รักษาโรคมะเร็งต่างๆ เช่น มะเร็งของสมองชนิดต่างๆ เช่น เนื้องอกแบบเซลล์อ่อนของเซลล์ กลีโมา (glioblastoma) เนื้องอกของเซลล์กลีโมาของก้านสมอง (brainstem glioma) เนื้องอกแบบเซลล์อ่อนของเมดัลลา (medulloblastoma) เนื้องอกของเซลล์ประสาท หรือ แอสโตรไซโทมา (astrocytoma) เนื้องอกของอีเพนไดมาซึ่งเป็นเนื้อเยื่อชนิดหนึ่งของระบบประสาทส่วนกลาง (ependymoma) และมะเร็งที่มีการแพร่กระจายไปที่สมอง ใช้ร่วมกับเพรดนิโซโลน (prednisone) ในการรักษามะเร็งไขกระดูกชนิดที่เป็นเซลล์พลาสมา (multiple myeloma) ใช้ร่วมกับยาอื่นในการรักษาโรคมะเร็งต่อมน้ำเหลืองฮอดจกิน (Hodgkin's disease) หลังจากล้มเหลวจากการรักษาด้วยยาที่ใช้เป็นอันดับแรก ใช้ร่วมกับยาอื่นในการรักษามะเร็งต่อมน้ำเหลืองที่ไม่ใช่โรคมะเร็งฮอดจกิน (non-Hodgkin's lymphomas) หลังจากล้มเหลวจากการรักษาด้วยยาที่ใช้เป็นอันดับแรก โครงสร้างแสดงดังภาพที่ 2.4

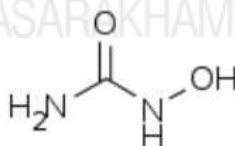




ภาพที่ 2.4 โครงสร้างของคาร์บามัสทีน

### 2.5.3 ไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์

ไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ (hydroxylcarbamide) หรือไฮดรอกซียูเรีย (hydroxyurea) หรือมีชื่อการค้าในประเทศไทยว่า ไฮเดรีย (hydra) เป็นยาเคมีบำบัดชนิดรับประทาน ยาถูกนำมาใช้ในการรักษาโรคมะเร็งได้หลายชนิดเช่น มะเร็งในระบบสืบระและคอ มะเร็งผิวหนังเมลาโนมา มะเร็งรังไข่ นอกจากนี้ ยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ยังถูกนำมาใช้ควบคู่กับรังสีรักษา เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการรักษามะเร็งในระบบสืบระและลำคอ ในมะเร็งปากมดลูก โรคมะเร็งทางระบบโลหิตวิทยาเช่น มะเร็งเม็ดเลือดขาวเอเอ็มแอลชนิดเฉียบพลัน (Acute Myeloid Leukemia: AML) อีกทั้งยังถูกนำมาใช้ในการรักษาโรคทางโลหิตวิทยา/โรคเลือดอื่น ๆ เช่น ภาวะโลหิตจางชนิด Sickle Cell Anemia ภาวะปริมาณเม็ดเลือดขาว อีโอซิโนฟิลล์สูง (Hypereosinophilic syndrome) หรือภาวะเม็ดเลือดแดงขึ้น/โรคเลือดหนืด (Polycythemia Vera: ภาวะเลือดข้นที่เกิดจากความผิดปกติของไขกระดูกโดยตรง) เนื่องจากยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์มีข้อบ่งใช้หลายประการ ขนาดยาและวิธีการบริหารยาจึงแตกต่างกันออกไป ดังนั้นการใช้ยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์จึงควรอยู่ภายใต้การดูแลจากแพทย์ผู้ให้การรักษา ผู้ป่วยที่ได้รับยาควรให้ความใส่ใจในการใช้ยาและติดตามอาการไม่พึงประสงค์ (ผลข้างเคียง) ที่อาจเกิดขึ้นได้ตลอดการรักษาด้วยยาเคมีบำบัด โครงสร้างของไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์แสดงดังภาพที่ 2.5 (ทาหมอ, 2011-2012)



ภาพที่ 2.5 โครงสร้างของไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์

### 2.6 เคมีคำนวณหรือการศึกษาเชิงทฤษฎี

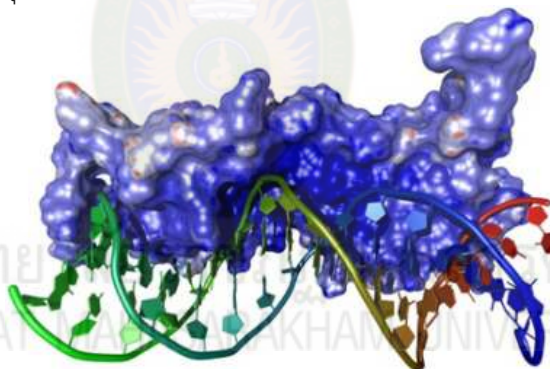
เคมีคำนวณหรือเคมีเชิงคอมพิวเตอร์ (computational chemistry) หรือการศึกษาเชิงทฤษฎี (theoretical study) เป็นวิชาเคมีแขนงหนึ่งที่มีการนำเอาคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงมาใช้ในการศึกษาทางทฤษฎี ซึ่งเป็นการคำนวณโครงสร้างและสมบัติต่างๆ ของโมเลกุลโดยอาศัยหลักการที่ว่า สมบัติที่คำนวณได้นั้นขึ้นกับโครงสร้าง 3 มิติของโมเลกุล การศึกษานี้เรียกอีกอย่างหนึ่งว่า แบบจำลองเชิงโมเลกุล (molecular modeling) ผลการคำนวณที่ได้จากการศึกษาทางเคมีเชิงคอมพิวเตอร์นี้ จะใช้ในการอธิบายผลการทดลองในห้องปฏิบัติการซึ่งเป็นการอธิบายในระดับโมเลกุล รวมถึงการทำนายผลการทดลองที่ไม่สามารถทำได้หรือทำได้ยากในห้องปฏิบัติการ นอกจากนี้ผลการคำนวณทางทฤษฎียังใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานที่ช่วยลดขอบเขตการทดลองในห้องปฏิบัติการ เช่น การสกัดยาจากสมุนไพร

อาจจะได้โมเลกุลของสารที่คาดว่าจะเป็นตัวยาจำนวนหลายชนิด หากต้องนำสารทุกชนิดที่สกัดได้ไปทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพว่าสามารถรักษาโรคได้หรือไม่นั้น จะต้องใช้ระยะเวลาและต้นทุนในการทดสอบสูงมาก ดังนั้นหากนำเทคนิคทางเคมีเชิงคอมพิวเตอร์เข้ามาช่วยในการคัดสรรเฉพาะสารที่คาดว่าจะเป็นตัวยาจริงๆ จะสามารถลดจำนวนสารที่เหลือไม่ก็ชนิดที่จะนำไปทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพต่อไปได้ อย่างไรก็ตาม การศึกษาทางเคมีเชิงคอมพิวเตอร์หรือแบบจำลองโมเลกุลนี้ไม่สามารถทดแทนการศึกษาในห้องปฏิบัติการได้ (บรรจบ, 2013)

ข้อมูลที่ได้จากการศึกษาทางเคมีเชิงคอมพิวเตอร์นั้น ส่วนใหญ่เป็นข้อมูลเกี่ยวกับสมบัติทางโครงสร้างและพลังงานของระบบที่เป็นอะตอม ไอออน หรือโมเลกุลที่สนใจศึกษา เทคนิคหรือวิธีการคำนวณในการศึกษาทางเคมีเชิงคอมพิวเตอร์ (คัชรินทร์ ศิริวงศ์, 2550) ที่สำคัญได้แก่

#### 2.6.1 การจำลองแบบทางคอมพิวเตอร์ (computer simulation)

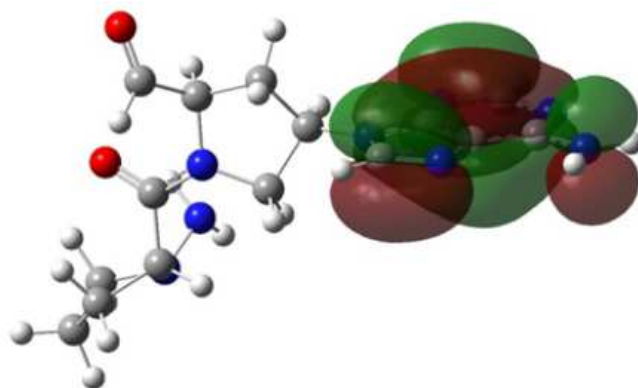
เป็นการศึกษาโครงสร้างเฉลี่ยหรือโครงสร้างที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาของระบบที่สนใจศึกษา การจำลองแบบทางคอมพิวเตอร์มีอยู่ 2 วิธี คือ การจำลองแบบทางพลวัตเชิงโมเลกุล (molecular dynamics simulation, MD) และการจำลองแบบโดยวิธีมอนติ คาร์โล (Monte Carlo simulation, MC) ตัวอย่างการศึกษาโครงสร้างของ glucocorticoid receptor กับ DNA โดยวิธีการจำลองแบบทางพลวัตเชิงโมเลกุลแสดงดังภาพที่ 2.6



ภาพที่ 2.6 การยึดจับกันของ glucocorticoid receptor กับ DNA ที่ได้จากการจำลองทางพลวัตเชิงโมเลกุล (Eriksson, *et al.*, 2001)

#### 2.6.2 การหาโครงสร้างที่เหมาะสมและคำนวณพลังงานของโมเลกุล

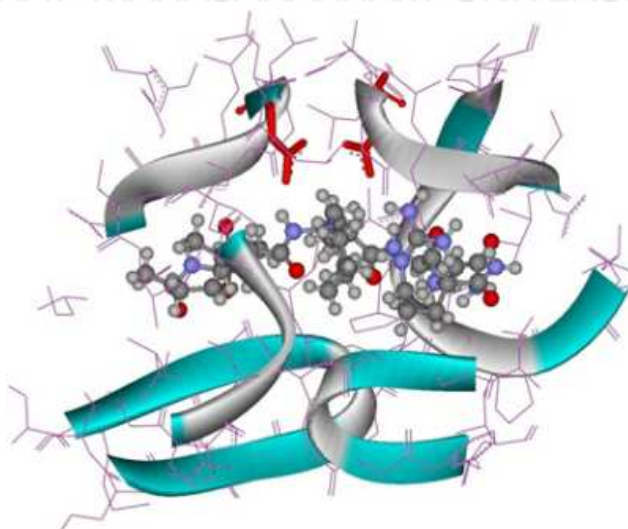
การหาโครงสร้างที่เหมาะสม (optimization) เป็นการปรับเปลี่ยนโครงสร้างของโมเลกุลเพื่อให้ได้โครงสร้างที่มีพลังงานต่ำที่สุดหรือเสถียรที่สุดหรือโครงสร้างที่เหมาะสมที่สุดโดยการคำนวณพลังงานของโมเลกุลของแต่ละโครงสร้างจะใช้วิธีทางกลศาสตร์ควอนตัม (quantum mechanics, QM) ซึ่งเป็นวิธีที่มีความถูกต้องสูง แต่จะใช้เวลาในการคำนวณนานมาก จึงเหมาะกับระบบที่ประกอบด้วยจำนวนอะตอมไม่มากนัก สำหรับระบบ ที่ประกอบด้วยโมเลกุลหรืออะตอมจำนวนมากจะใช้การคำนวณโดยวิธีกลศาสตร์ โมเลกุล (molecular mechanics, MM) ซึ่งใช้เวลาในการคำนวณน้อย แต่ก็มีมีความถูกต้องต่ำกว่า วิธีกลศาสตร์ควอนตัม โครงสร้างที่เหมาะสมของอะดีนีนที่มีแกนหลักเป็นหมู่เปปไทด์ นิวคลีอิกแอซิด แสดงดังภาพที่ 2.7



ภาพที่ 2.7 ออร์บิทัลเชิงโมเลกุลสูงสุดที่มีการบรรจุอิเล็กตรอน (HOMO) ของเบสอะดีนีนที่มีแกนหลักเป็นหมู่เปปไทด์นิวคลีอิกแอซิด ซึ่งได้จากการคำนวณทางกลศาสตร์ควอนตัม (คัชรินทร์ ศิริวงศ์, 2550)

### 2.6.3 การออกแบบโมเลกุล (molecular design)

การออกแบบโมเลกุล (molecular design) เป็นการออกแบบโมเลกุลชนิดใหม่เพื่อให้มีคุณสมบัติตามต้องการ เช่น การออกแบบโมเลกุลของยา (drug design) โดยเทคนิคที่นิยมใช้ได้แก่ วิธีโมเลกุลาร์ด็อกกิง (molecular docking) ซึ่งเป็นการศึกษาการเข้ายึดจับกันและศึกษาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลยากับตำแหน่งที่มีความว่องไว (active site) ของโมเลกุลเป้าหมาย (เช่น ดีเอ็นเอ โปรตีนและเอนไซม์) และวิธีการศึกษาถึงความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้าง 3 มิติของโมเลกุลยากับการออกฤทธิ์ (3D quantitative structure-activity relationships, 3D QSAR) ตัวอย่างของการออกแบบโมเลกุล การยึดจับกันของ HIV protease กับโมเลกุลตัวยับยั้งที่ได้จากวิธี molecular docking แสดงดังภาพที่ 2.8



ภาพที่ 2.8 การยึดจับกันของ HIV protease กับโมเลกุลตัวยับยั้งที่ได้จากวิธี molecular docking (ภาพโดยโปรแกรม DS Viewer Pro 5.0 โดยใช้โครงสร้างโมเลกุลจากตัวอย่างที่มีมากับโปรแกรม)

#### 2.6.4 วิธีกลศาสตร์ควอนตัม

วิธีกลศาสตร์ควอนตัม (quantum mechanics, QM) เป็นวิธีคำนวณภายใต้ทฤษฎีควอนตัม แบ่งได้ 2 วิธี คือ วิธีเซมิ-เอมไพริคัล (semi-empirical) และวิธีแอบ อินิซิโอ (*ab initio*)

##### ก. วิธีเซมิ-เอมไพริคัล

เป็นวิธีการคำนวณทางเคมีควอนตัมที่อาศัยข้อมูลจากการทดลอง การคำนวณด้วยวิธีนี้มีหลายวิธีซึ่งแตกต่างกันที่การประมาณค่าอินทิกรัล เช่น

- complete neglect of differential overlap (CNDO)
- modified intermediate neglect of differential overlap (MINDO)
- modified neglect of diatomic differential overlap (MNDO)
- Austin model 1 (AM1)

ในทางปฏิบัติการคำนวณอินทิกรัลใช้เวลานานมาก ซึ่งในกรณีที่มีโมเลกุลมีขนาดใหญ่มาก การคำนวณดังกล่าวก็เป็นไปไม่ได้ (ช้าเกินไปสำหรับจะนำผลมาใช้) จึงจำเป็นต้องประมาณค่าอินทิกรัลแทนการคำนวณโดยตรงจริงๆ การประมาณทำได้โดยนำผลการทดลอง เช่น ศักย์ไฟฟ้าไอออไนเซชัน (ionization potential; IP) พลังงานสัมพรรคภาพอิเล็กตรอน (electron affinity; EA) มาใช้แทนค่าอินทิกรัล ใช้สมมาตรของโมเลกุลและข้อสมมุติฐาน เช่น อะตอมในโมเลกุลที่ไม่ติดกันจะไม่ซ้อนเหลื่อมกัน (zero differential overlap; ZDO) เพื่อลดการคำนวณอินทิกรัลลง ดังนั้นจำนวนอินทิกรัลที่ต้องคำนวณจึงเหลือน้อยมากสามารถทำให้ประยุกต์กับโมเลกุลขนาดใหญ่ได้ วิธีที่ใช้การประมาณพลังงานดังกล่าวเรียกว่า “วิธีเซมิ-เอมไพริคัล” (แต่ถ้าหากคำนวณค่าอินทิกรัลโดยตรงไม่มีการประมาณก็จะเรียกว่า “วิธีแอบอินิซิโอ”)

วิธีเซมิ-เอมไพริคัล มีการออกแบบเพื่อใช้อธิบายระบบที่แตกต่างกัน บางวิธีออกแบบสำหรับอธิบายสเปกตรัม (โดยการ fit กับข้อมูลทางสเปกโทรสโคปี) จึงนำมาใช้อธิบาย หรือพยากรณ์สเปกตรัมได้ดี แต่อาจอธิบายเกี่ยวกับพลังงานและโครงสร้างไม่ค่อยดี และถ้าสิ่งที่น่าสนใจทางไกล จากข้อมูลทางการทดลองที่นำมาใช้ fit มาก การคำนวณด้วยวิธีเซมิ-เอมไพริคัลก็จะได้ผลที่ไม่ดี ดังนั้นการเลือกใช้วิธีที่เหมาะสมสำหรับงานที่ต้องการศึกษาจึงมีความสำคัญมากวิธี AM1 และ PM3 เป็นวิธีที่พัฒนาหลังสุดจึงมีความน่าเชื่อถือสูงกว่าวิธีอื่นๆ

##### ข. วิธีแอบอินิซิโอ

เป็นวิธีการคำนวณโดยอาศัยทฤษฎีที่ได้จากการแก้สมการ Schrödinger นับเป็นวิธีที่ให้ความแม่นยำสูงแต่ก็ใช้เวลาในการคำนวณนานจึงไม่เหมาะที่จะนำมาใช้ศึกษาโมเลกุลขนาดใหญ่ ในงานวิจัยนี้จึงได้ใช้ทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่น (density functional theory, DFT) ในการคำนวณหาโครงสร้างของสารและพลังงานของสารประกอบเพราะเป็นวิธีที่มาตรฐานใช้กันอยู่ทั่วไปและให้ผลการคำนวณที่ค่อนข้างดีมาก ซึ่งจะแตกต่างจากวิธีเซมิเอมไพริคัลคือไม่ต้องอาศัยข้อมูลจากการทดลอง

ในกลศาสตร์ควอนตัม พลังงานและสมบัติต่าง ๆ ของโมเลกุลสามารถหาได้จากสมการ Schrödinger ดังนี้

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

โดย H คือ ตัวปฏิบัติการฮามิลโทเนียน

E คือ พลังงาน

$\Psi$  คือ ฟังก์ชันคลื่นซึ่งเก็บข้อมูลทั้งหมดของโมเลกุลไว้

ดังนั้นการได้ฟังก์ชันคลื่นจึงมีความสำคัญที่สุดในกลศาสตร์ควอนตัมและฟังก์ชันคลื่นจริง (exact wavefunction) ก็ได้จากการแก้สมการ Schrödinger เท่านั้น แต่ทว่าสมการ Schrödinger ที่คำนึงถึงแรงกระทำระหว่างอิเล็กตรอนซึ่งรวมทั้งระบบโมเลกุลไม่สามารถหาคำตอบได้ ดังนั้นจึงไม่สามารถหาฟังก์ชันคลื่นจริงได้ อย่างไรก็ตามกลศาสตร์ควอนตัมบอกว่าเราสามารถหาสมบัติและพลังงานของฟังก์ชันคลื่นที่ไม่ใช่ฟังก์ชันคลื่นจริงได้จาก

$$E' = \int \Psi_{\text{trial}}^* H \Psi_{\text{trial}} dT / \int \Psi_{\text{trial}}^* \Psi_{\text{trial}} dT \quad (2.2)$$

โดย E คือ พลังงานประเมิน (expectation energy) ซึ่งจะมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับ พลังงานจริง (exact energy) เสมอ ( $E' \geq E$ ) และ  $\Psi_{\text{trial}}$  คือ ฟังก์ชันคลื่นจำลอง (trial wavefunction) ซึ่งจะเข้าใกล้ฟังก์ชันคลื่นจริง (exact wavefunction) เมื่อพลังงานประเมินเข้าใกล้ พลังงานจริง ดังนั้นแม้ว่าจะไม่สามารถหาฟังก์ชันคลื่นจริงและพลังงานจริงก็จะสามารถเลือกฟังก์ชัน ใดๆ เป็นฟังก์ชันคลื่นจำลองและหาพลังงานประเมินได้เสมอ ถ้าหากเลือกฟังก์ชันที่อยู่ในรูป พารามิเตอร์ เช่น ฟังก์ชันคลื่นจำลองจากผลรวมเชิงเส้นของอะตอมมิกออร์บิทัล (linear combination of atomic orbital; LCAO) สามารถปรับค่าพารามิเตอร์เหล่านั้นด้วยเทคนิคทาง คณิตศาสตร์จนค่าพลังงานประเมินมีค่าต่ำที่สุด ซึ่งหมายความว่าฟังก์ชันคลื่นจำลองที่ได้ใกล้เคียงกับ ฟังก์ชันคลื่นจริงมากที่สุดสำหรับชุดพารามิเตอร์นั้น เทคนิคที่กล่าวถึงนี้เรียกว่า เทคนิค variation ถ้า เลือกสเลเตอร์ดีเทอร์มิแนนต์ (slater determinant) หรือ ดีเทอร์มิแนนต์ของผลคูณของออร์บิทัลเชิง โมเลกุลเป็นฟังก์ชันคลื่นจำลองพลังงานประเมินก็สามารถเขียนได้ในรูปสมการอินทิกรัล

$$E = [T] + [V_{ne}] + [V_{ee}] \quad (2.3)$$

โดยที่ [T] เป็น อินทิกรัลของตัวปฏิบัติการพลังงานจลน์ (kinetic operator)

$[V_{ne}]$  เป็น อินทิกรัลของพลังงานศักย์ระหว่างนิวเคลียสและอิเล็กตรอน

$[V_{ee}]$  เป็น อินทิกรัลของพลังงานศักย์ระหว่างอิเล็กตรอนและอิเล็กตรอน

ซึ่งถ้าจำแนกอินทิกรัลเหล่านี้ตามจำนวนอิเล็กตรอนที่เกี่ยวข้องพบว่า 2 เทอมแรกเกี่ยวข้องกับ หนึ่งอิเล็กตรอนเป็น one-electron integral และเทอมสุดท้ายเกี่ยวข้องกับสองอิเล็กตรอนเป็น two-electron integral พลังงานจะแสดงได้ดังสมการ (2.4) – (2.7)



$$E = [\text{one-e integral}] + [\text{two-e integral}] \quad (2.4)$$

$$= \sum H_a^{\text{core}} + \sum \sum G_{ab} \quad (2.5)$$

โดยที่  $H_a^{\text{core}}$  แทน อินทิกรัลแบบหนึ่งอิเล็กตรอนในฐานออร์บิทัลเชิงโมเลกุล a  
 $G_{ab}$  แทน อินทิกรัลแบบสองอิเล็กตรอนในฐานออร์บิทัลเชิงโมเลกุล a และ b  
 เมื่อแทนออร์บิทัลเชิงโมเลกุลด้วย LCAO พลังงานก็จะแสดงผลได้ดัง

$$E = \frac{1}{2} \{ \sum D_{\mu\nu} H_{\mu\nu}^{\text{core}} + \sum \sum D_{\mu\nu} D_{\lambda\sigma} G_{\mu\nu\lambda\sigma} \} \quad (2.6)$$

$$= \frac{1}{2} \sum D_{\mu\nu} [H_{\mu\nu}^{\text{core}} + \sum D_{\lambda\sigma} G_{\mu\nu\lambda\sigma}] \quad (2.7)$$

โดยที่  $D$  คือ เมทริกซ์ความหนาแน่นอิเล็กตรอน (density matrix) ในฐานอะตอมมิกออร์บิทัล  
 $H$  และ  $G$  คือ อินทิกรัลแบบหนึ่งและสองอิเล็กตรอนในฐานอะตอมมิกออร์บิทัล

### 2.6.5 ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น

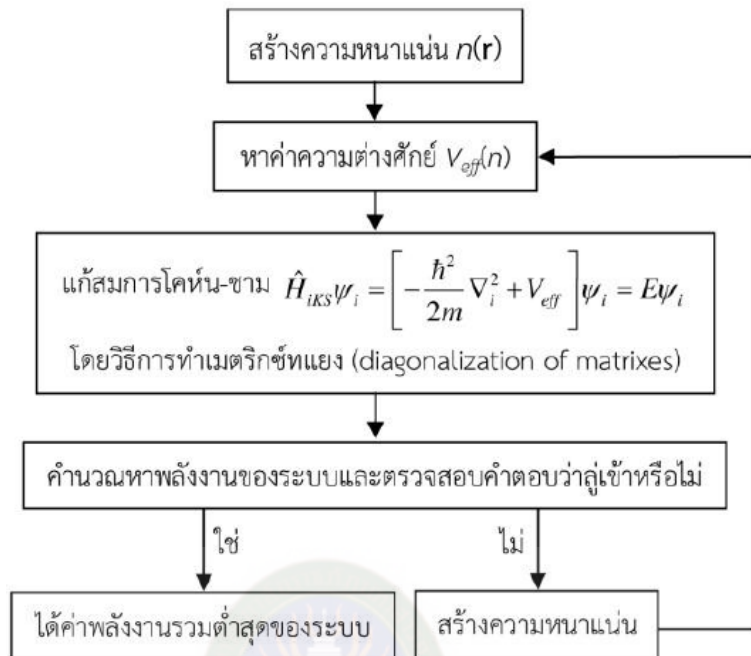
ในการศึกษาทางทฤษฎีเพื่อวัดสมบัติของสาร ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (density functional theory, DFT) เป็นวิธีที่นิยมใช้ซึ่งเหมาะสมกับการคำนวณหาสมบัติต่างๆ ของโมเลกุล เช่น สมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานหรือสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นเป็นหนึ่งในกระบวนการแบบแอบอินิซิโอ (*ab initio* method) โดยเริ่มจากการใช้กฎเกณฑ์หรือทฤษฎีพื้นฐานในระบอบอนุภาคและใช้การประมาณบางอย่างเพื่อที่จะทำนายสมบัติของสารทั้งก่อน โดยกระบวนการดังกล่าวไม่ได้พึ่งพาหรือนำผลการทดลองมาใช้ในการคำนวณ ดังนั้นกระบวนการแบบแอบอินิซิโอจึงเป็นกระบวนการที่ประสบความสำเร็จในระดับหนึ่งในการนำทฤษฎีในระดับอนุภาคมาทำนายสมบัติของสารก่อนใหญ่ได้ หลักการเบื้องต้นของทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นเริ่มจากทฤษฎีบทของโฮเฮนเบิร์กและโคห์น (Hohenberg-Kohn theorems) (Hohenberg & Kohn, 1964) ซึ่งกล่าวโดยสรุปอย่างง่ายว่าปริมาณต่างๆ ที่สามารถตรวจวัดได้เป็นฟังก์ชันนัลของความหนาแน่นของอิเล็กตรอน และกล่าวว่าจะมีความหนาแน่นของอิเล็กตรอนรูปแบบเดียวที่ทำให้เกิดระดับพลังงานต่ำสุดในสถานะพื้นของระบบ จากทฤษฎีบทดังกล่าวและการใช้วิธีวาริเอชันนัล (variational method) (Sholl & Steckel, 2009; Parr & Weitao, 1994) จะได้สมการคล้ายสมการของชโรดิงเจอร์ คือ

$$\hat{H}_{iKS}\psi_i = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{eff}} \right] \psi_i = E\psi_i \quad (2.8)$$

เรียกว่า สมการโคห์น-ชาม (Kohn-Sham equations) โดยที่  $\hat{H}_{\text{KS}}$  คือ ฮามิลโตเนียนของโคห์น-ชาม และ  $V_{\text{eff}}$  คือ ศักย์ยังผล สมการโคห์น-ชามนั้นมีหน้าตาคล้ายคลึงกับสมการชโรดิงเจอร์ของระบบอนุภาคเดี่ยวก็เพราะว่าเราสามารถเปลี่ยนจากระบบอนุภาคหลายตัวให้อยู่ในรูปแบบเดียวกันกับระบบอนุภาคเดี่ยว แต่สิ่งที่แตกต่างคือผลเฉลยของไอเกนฟังก์ชัน ( $\psi_i$ ) ไม่ใช่ฟังก์ชันคลื่นแต่ถูกเรียกว่าโคห์น-ชามออร์บิทัล (Kohn-Sham orbital) ไม่มีความหมายโดยตรงทางฟิสิกส์ อย่างไรก็ตาม ความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ณ ตำแหน่ง  $r$  ( $n(r)$ ) สามารถหาได้จากความสัมพันธ์

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i^{\text{occ}} |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.9)$$

ค่า  $i$  คือ ดัชนีระบุสถานะ และ  $\text{occ}$  ระบุว่าเป็นสถานะที่มีการครอบครอง โคห์น-ชามออร์บิทัลกระจายในชุดเซต (basis set) (Payne, *et al.*, 1992) ของฟังก์ชันที่เหมาะสมกับระบบที่ศึกษา กระบวนการในการหาคำตอบของสมการโคห์น-ชามทำได้โดยใช้วิธีการวนวงจรดังภาพที่ 2.9 ซึ่งเรียกกระบวนการดังกล่าวว่า “self-consistent” (Kohn & Sham, 1965) เริ่มจากการสุ่มโคห์น-ชามออร์บิทัลขึ้นมา 1 ชุดภายใต้ชุดเซตฟังก์ชันที่เราเลือกใช้ จากสมการที่ (2.9) จะได้ค่าความหนาแน่นเริ่มต้น หลังจากได้ค่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแล้วค่าความต่างศักย์ก็จะถูกสร้างขึ้นตามมา เพราะว่าความต่างศักย์เป็นฟังก์ชันนัลของความหนาแน่นอิเล็กตรอน หลังจากนั้นสมการโคห์น-ชามก็จะถูกแก้เพื่อหาผลเฉลยออกมา จากผลเฉลยนี้จะได้รับค่าไอเกนพลังงานและโคห์น-ชามออร์บิทัลชุดใหม่ ออกมา หลังจากนั้นนำคำตอบชุดใหม่คำนวณค่าพลังงานและเปรียบเทียบการลู่เข้ากับข้อมูลรอบก่อนหน้า หากชุดคำตอบดังกล่าวยังไม่ถูกต้อง เมื่อนำชุดของโคห์น-ชามออร์บิทัลที่ได้มารวมกันใหม่ก็จะได้ลักษณะของความหนาแน่นเปลี่ยนไป และก็จะไปเริ่มกระบวนการวนวงจรในขั้นตอนแรกใหม่อีกครั้งหนึ่ง โดยทำซ้ำจนกว่าจะพบคำตอบที่ให้ค่าพลังงานของระบบต่ำสุด (ประยูรศักดิ์ เปลื้องผล, 2557)



ภาพที่ 2.9 แผนภาพการหาคำตอบของสมการโคห์น-ฮามด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ (Payne, et al., 1992)

#### 2.6.6 เบซิสเซต ฟังก์ชัน

โมเลคิวลาร์ออร์บิทัลซึ่งอยู่ในรูปของอะตอมมิกออร์บิทัลที่รวมกันแบบเชิงเส้น มีความถูกต้องมากน้อยเพียงใดขึ้นอยู่กับชนิดและจำนวนของเบซิสฟังก์ชัน (basis set function) ในการรวมกันเชิงเส้นตรงนั้น อะตอมมิกเบซิสฟังก์ชันที่นิยมใช้กันอย่างกว้างขวางมี 2 ชนิด คืออะตอมมิกออร์บิทัลแบบสเลเตอร์ (slater-type atomic orbital; STO) แทนอะตอมมิกออร์บิทัลที่สมเหตุสมผล ซึ่งใช้ค่ามาตรฐานที่แนะนำโดยสเลเตอร์ แต่ไม่เหมาะสมที่จะใช้ในงานเชิงตัวเลข และอะตอมมิกฟังก์ชันชนิดเกาส์เซียน (Gaussian-type atomic function; GTO)

Boys (Boys, 1950) เป็นผู้แนะนำเกาส์เซียน ฟังก์ชัน (Gaussian function) ในการคำนวณ โมเลคิวลาร์ออร์บิทัล แต่ให้ผลดีไม่เท่าอะตอมมิกออร์บิทัลแบบสเลเตอร์ เพราะไม่มี cusp ที่นิวเคลียสดังนั้นจึงแทนอะตอมมิกออร์บิทัลที่ค่ารัศมีน้อยๆ ได้ไม่ดี เพื่อให้ได้การแทนอะตอมมิกออร์บิทัลได้ถูกต้อง ควรใช้ผลรวมเชิงเส้นของหลายๆ เกาส์เซียน เพราะฉะนั้นการคำนวณ LC-GTO SCF MO จึงเกี่ยวข้องกับการหาค่าอินทิกรัลมากกว่าการคำนวณของ LC-STO SCF MO เนื่องจากจำนวนของ 2 อิเล็กตรอนอินทิกรัลที่มีสามและสี่ศูนย์กลางลดลงเหลือเป็นอินทิกรัลของสองศูนย์กลางในการใช้อะตอมมิกฟังก์ชันชนิดเกาส์เซียน ซึ่งใช้ในการรวมกันแบบเชิงเส้น เช่น เบซิส ฟังก์ชัน ( $\Phi_\mu$ ) อาจขยายให้อยู่ในรูปเกาส์เซียนชนิด s

$$\Phi_\mu = \sum d_{\mu s} g_s \quad (2.10)$$



ในที่นี้สัมประสิทธิ์  $d_{\mu s}$  เป็นค่าแน่นอน เบซิสฟังก์ชันแบบนี้เรียกว่าคอนแทรกต์เกาส์เซียน (contracted Gaussians) และแต่ละ  $g_s$  เรียกว่า ปริมิทีฟเกาส์เซียน (primitive gaussians)

วิธี B3LYP เป็นฟังก์ชันไฮบริดที่พัฒนาขึ้นในช่วงปลายยุค 80 ปรากฏว่าวิธีการที่ใช้ DFT และ Hartree-Fock นั้นพยายามทำสิ่งเดียวกัน - กู้คืนความสัมพันธ์ของอิเล็กตรอน อย่างไรก็ตามพวกมันมีปัญหาที่แตกต่างกัน วิธี Hartree-Fock สามารถรักษาความสัมพันธ์ของการแลกเปลี่ยนได้อย่างแน่นอน แต่มีความยากลำบากในการฟื้นฟูความสัมพันธ์ของอิเล็กตรอนแบบไดนามิกในขณะที่ DFT มีรูปแบบที่แน่นอนสำหรับความสัมพันธ์ของอิเล็กตรอนแบบไดนามิก แต่เนื่องจาก DFT ไม่ใช่กลไกเชิงควอนตัม

B3 เป็นฟังก์ชันการแลกเปลี่ยนความสัมพันธ์แบบ 3 พารามิเตอร์ของ Becke ซึ่งใช้พารามิเตอร์ 3 ตัวเพื่อผสมในความสัมพันธ์การแลกเปลี่ยน Hartree-Fock ที่แน่นอนและ LYP เป็นฟังก์ชันการทำงานร่วมกันของ Lee Yang และ Parr ที่กู้คืนความสัมพันธ์ของอิเล็กตรอนแบบไดนามิก B3LYP เป็นฟังก์ชันที่ได้รับความนิยมด้วยเหตุผลหลายประการ B3LYP เป็นหนึ่งในวิธีการ DFT ที่ถูกพัฒนาขึ้นในช่วงแรกๆ ที่มีการปรับปรุงอย่างมีนัยสำคัญมากกว่า Hartree-Fock โดยทั่วไปแล้ว B3LYP จะสามารถคำนวณได้เร็วกว่าเทคนิค Hartree-Fock และส่วนใหญ่ทำให้ผลลัพธ์ที่คล้ายคลึงกัน นอกจากนี้ยังเป็นวิธีที่ค่อนข้างแม่นยำสำหรับวิธี DFT ในระดับพื้นฐานมากขึ้น B3LYP ไม่ได้ถูกกำหนดค่าในสมการเท่ากับฟังก์ชันผสมอื่น ๆ โดยมีเพียง 3 พารามิเตอร์เท่านั้น ขณะที่บางวิธีมีถึง 26 พารามิเตอร์ สมการของ Becke เป็นหนึ่งในวิธีที่ถูกอ้างถึงมากที่สุด ดังนั้น B3LYP จึงถูกนำไปใช้อย่างกว้างขวางและได้รับการอ้างอิงในงานวิจัยจำนวนมากและมีความผิดพลาดจำนวนน้อยที่อาจเกิดขึ้นจากการคำนวณเมื่อเทียบกับฟังก์ชันที่ใหม่กว่า ดังนั้นก่อนจะทำการเลือกวิธีในการคำนวณด้วยวิธี DFT ควรดูว่าฟังก์ชันที่เลือกมีความเหมาะสมที่สุด (Becke, 1988)

สมการ B3LYP ประกอบไปด้วยพารามิเตอร์ 3 ส่วน ดังสมการ

$$E_{xc}^{B3LYP} = E_x^{LDA} + \alpha_0(E_x^{HF} - E_x^{LDA}) + \alpha_x(E_x^{GGA} - E_x^{LDA}) + E_c^{LDA} + \alpha_c(E_c^{GGA} - E_c^{LDA})$$

เมื่อ  $\alpha_0 = 0.20$ ,  $\alpha_x = 0.72$  และ  $\alpha_c = 0.81$   $E^{GGA}$  คือ generalized gradient approximations และ  $E^{LDA}$  คือ local-density approximation

เพื่อความสะดวกในการคำนวณจึงนิยมใช้แก๊สเซียนเบซิสฟังก์ชัน ( $g(r)$ ) อาจเลือกใช้แบบคอนแทรคเทดหรืออันคอนแทรคเทดแก๊สเซียน (uncontracted gaussians) ก็ได้ การใช้เบซิสฟังก์ชันในการคำนวณโมเลคิวลาร์ออร์บิทัลนั้นใช้ได้หลายวิธี ดังต่อไปนี้

ก. มินิมอลเบซิสเซต (minimal basis sets) เป็นระดับที่ง่ายสุดของทฤษฎีแออบินิซิโอโมเลคิวลาร์ออร์บิทัล ใช้มินิมอลเบซิสเซตที่มีจำนวนเบซิสฟังก์ชันเท่ากับจำนวนอะตอมมิกออร์บิทัลที่สถานะพื้น นั่นคือรวมออร์บิทัลของทั้งเซลล์ในและเวเลนซ์เซลล์ เช่น

H 1 อะตอม ใช้ 1s ออร์บิทัล (1 ฟังก์ชันชนิด  $s$ )

C 1 อะตอม ใช้ 1s, 2s และ 2p ออร์บิทัล (2 ฟังก์ชันชนิด  $s$  และ 1 ฟังก์ชันชนิด  $p$ )

ดังนั้น จำนวนเบซิสฟังก์ชันต่ออะตอมเป็นดังนี้

H 1 อะตอม ใช้ 1 เบซิสฟังก์ชัน (1 ฟังก์ชันชนิด  $s$ )

C 1 อะตอม ใช้ 3 เบซิสฟังก์ชัน (2 ฟังก์ชันชนิด  $s$  และ 1 ฟังก์ชันชนิด  $p$ )

มินิมอลเบซิสเซต ที่ใช้กันเรียกว่า STO-KG คือ ประกอบด้วยอะตอมมิกออร์บิทัลแบบสเลเทอร์ในเทอมของอะตอมมิกฟังก์ชันชนิดแก๊สเซียน ( $g(r)$ )K ตัวอย่างของเบซิสเซตประเภทนี้ เช่น STO-3G คือ ใช้ 3 ฟังก์ชันของอะตอมมิกฟังก์ชันชนิดแก๊สเซียน ในการแทน 1 ฟังก์ชันของอะตอมมิกออร์บิทัลแบบสเลเทอร์

ข. เอ็กซ์เทนเดดเบซิสเซต (extended basis sets) เนื่องจากมินิมอลเบซิสเซต เช่น STO-3G ยังไม่สมบูรณ์ เพราะจำนวนของอะตอมมิกเบซิสฟังก์ชันไม่เป็นสัดส่วนกับจำนวนอิเล็กตรอน ตัวอย่าง เช่น ลิเทียม 1 อะตอม มีเพียง 3 อิเล็กตรอน ใช้จำนวนฟังก์ชัน 5 ฟังก์ชัน เท่ากับฟลูออรีน 1 อะตอม ซึ่งมี 9 อิเล็กตรอน จึงพบว่าถ้าอธิบายสารประกอบที่มีธาตุ เช่น ออกซิเจนและฟลูออรีน ด้วยมินิมอลเบซิสฟังก์ชัน พบว่าไม่ดีเท่ากับโมเลกุลที่ประกอบด้วยธาตุที่มีอิเล็กตรอนน้อยกว่า อีกประการหนึ่งคือมินิมอลซิลเซตใช้แก๊สเซียนเอกซ์โพเนนซ์ที่แน่นอนซึ่งมีสามารถขยายและหดในสถานะแวลลุ่มของโมเลกุลที่ต่างกันเพราะว่ามินิมอลเบซิสเซตมีวาเลนซ์ฟังก์ชันเดี่ยวสำหรับสมมาตรแต่ละชนิด ส่วนเอกซ์เทนเดดเบซิสเซตจะมีจำนวนเบซิสฟังก์ชันมากกว่าอะตอมมิกออร์บิทัล เพื่อให้ให้ออร์บิทัลของโมเลกุลมีความยืดหยุ่นสามารถปรับขนาดได้เช่น H มี 1s ออร์บิทัล ใช้ 2 ฟังก์ชันชนิด  $s$ , C จะมีออร์บิทัล 1s, 2s และ 2p ใช้ 2 ฟังก์ชันชนิด  $s$  ออร์บิทัลและ 2 ฟังก์ชันชนิด  $p$  ออร์บิทัล

- 6-21G และ 3-21G สปลิท-วาเลนซ์เบซิสเซต (split-valence basis sets) กรณี 6-21G กำหนดสำหรับแถวที่สองของตารางธาตุ และ 3-21G กำหนดสำหรับแถวที่สามของตารางธาตุใช้ 2 เบซิสฟังก์ชัน สำหรับแต่ละวาเลนซ์อะตอมมิกออร์บิทัลใน 6-21G เบซิสเซตนั้น แต่ละอะตอมมิกออร์บิทัลใน 6-21G เบซิสเซตนั้น แต่ละอะตอมมิกออร์บิทัลซึ่งเป็นเซลล์ในแทนด้วยฟังก์ชันเดี่ยว และเขียนในเทอมของแก๊สเซียนส์ปริมิทีฟ 6 เทอม ดังนี้

$$\Phi_{nl}(r) = \sum_{k=1}^K g_l(\alpha_{n,k}, r) \quad (2.11)$$

ในการทำงานเดียวกันสำหรับ 3-21G เบซิสเซตนั้น  $K=3$

- 4-31G และ 6-31G สปลิท-วาเลนซ์เบซิสเซต ซึ่งในขณะนี้เบซิสเซต ซึ่งนิยมใช้แทน 3-21G และ 4-31G ซึ่งได้กำหนดไว้สำหรับธาตุแถวแรกของตารางธาตุ รวมทั้งธาตุแถวที่สองคือ ฟอสฟอรัส ซัลเฟอร์ และคลอรีน 4-31G ใช้ 4 เกาส์เซียนฟังก์ชัน สำหรับออร์บิทัลของเชลล์ใน ( $K = 4$ ) และใช้ 3 เกาส์เซียนและ 1 เกาส์เซียนฟังก์ชัน สำหรับ 2 วาเลนซ์เชลล์ ฟังก์ชันที่ใกล้เคียงกับ 4-31G และ 6-31G เบซิสเซต ซึ่งประกอบด้วย 6 เกาส์เซียน ในรูปรวมกันแบบเชิงเส้นสำหรับเชลล์ใน ( $K = 6$ ) 3 เกาส์เซียนฟังก์ชันสำหรับ 2 วาเลนซ์เชลล์ เพื่อความสะดวกในการคำนวณ มักใช้สปลิท-วาเลนซ์เบซิสเซต ในระดับ 3-21G มากกว่า 4-21G หรือ 6-21G สำหรับ 6-21G พบว่ามีความสำคัญมากในการใช้เป็นจุดเริ่มต้นในการสร้าง 6-31G\* และ 6-31G\* โพลาริเซชันเบซิสเซต

ค. โพลาริเซชันเบซิสเซต (polarization basis sets) จะเติมฟังก์ชันที่มีเลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม (angular momentum quantum number) ที่สูงกว่าชั้นนอกสุดหนึ่งค่าเรียกว่า โพลาริซฟังก์ชัน (polarized function) บนเอกซ์เทนเดดเบซิส เช่น H มีการเติมฟังก์ชันชนิด  $p$ , C มีการเติมฟังก์ชันชนิด  $d$  การเติมโพลาริซฟังก์ชันแสดงโดยเครื่องหมาย "\*" หรือ "\*\*\*" ตรงท้ายชื่อเบซิสเซต เช่น 6-31G และ 6-31G\*\* โดย "\*" หมายถึง โพลาริซฟังก์ชันเฉพาะอะตอมหนัก ส่วน "\*\*\*" หมายถึง โพลาริซฟังก์ชันทั้งอะตอมหนักและไฮโดรเจน

โพลาริเซชันเบซิสเซตที่ง่ายที่สุด คือ เบซิสเซต ที่เสนอโดย Hariharan และ Pople (Hariharan & Pople, 1972) สำหรับธาตุแถวแรกและธาตุแถวที่สอง คือ 6-31G\* ซึ่งทำได้โดยการเติม  $d$ -Gaussians-primitive 1 ชุด ใน สปลิท-วาเลนซ์ 6-31G เบซิสเซตของแต่ละอะตอม (ที่ไม่ใช่ไฮโดรเจน) ค่าเอกซ์โพเนนต์โพลาริเซชันของ  $s$ -ออร์บิทัลของไฮโดรเจนและฮีเลียมอะตอม 6-31G\*\* ยกเว้นว่ามีการเติมเกาส์เซียน  $p$ - ฟังก์ชัน 1 ชุดสำหรับไฮโดรเจนและฮีเลียมอะตอม

ง. เบซิสเซตร่วมกับฟังก์ชันดิฟฟิวส์ (basis sets incorporation diffuse function) สำหรับแอนไอออน โมเลกุลที่มีอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว และพันธะไฮโดรเจน จะมีความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่อยู่ห่างออกไปจากนิวเคลียสมาก ดังนั้นจึงต้องมีการปรับปรุงการสร้างอะตอมมิกออร์บิทัล โดยรวมเอาฟังก์ชันที่มีเลขยกกำลังต่ำเข้าด้วย ตัวอย่างของเบซิสเซตประเภทนี้ได้แก่ 6-31+G(2d,2p) และ 6-311+G(2d,2p) เป็นต้น ซึ่งเป็นการเพิ่มฟังก์ชันกระจายกับอะตอมที่ไม่ใช่อะตอมของไฮโดรเจนหรืออะตอมหนักส่วนเบซิสเซต 6-31+G(2d,2p) และ 6-311++G(2d,2p) จะเพิ่มฟังก์ชันกระจายกับทุกอะตอม (รวมไฮโดรเจนด้วย)

## 2.7 สมบัติของโมเลกุล

### 2.7.1 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงาน (geometric and energetic properties)

โครงสร้างโมเลกุล หมายถึง โครงสร้างทางเรขาคณิตของโมเลกุล (geometrical structure) ในการคำนวณทางโครงสร้างเรขาคณิตของโมเลกุลจะให้ผลลัพธ์เป็นภาพโครงสร้างที่ประกอบด้วย ความยาวพันธะ (bond length) มุมระหว่างพันธะ (bond angle) และมุมไดฮีดรอน (dihedron angle)

พลังงานโมเลกุล (molecular energy) หมายถึงพลังงานรวมของโมเลกุล (total energy) ที่เป็นผลรวมของพลังงานที่เกิดจากแรงผลักระหว่างนิวเคลียส (nucleus) แรงดูระหว่างนิวเคลียส

กับอิเล็กตรอนและแรงกระทำระหว่างอิเล็กตรอน ซึ่งพลังงานรวมของโมเลกุลสามารถคำนวณได้จากโครงสร้างโมเลกุล ในการคำนวณพลังงานโมเลกุลจะคำนวณไปพร้อมกับโครงสร้างโมเลกุล และพลังงานรวมของโมเลกุลที่มีโครงสร้างเสถียรจะมีค่าเป็นลบเสมอ และโมเลกุลชนิดเดียวกันพลังงานรวมที่มีค่าต่ำสุดย่อมเสถียรกว่าพลังงานรวมของโมเลกุลที่มีค่าสูงสุด ดังนั้นโครงสร้างที่คำนวณได้จะเรียกว่า “โครงสร้างโมเลกุลที่เหมาะสม” ซึ่งเป็นโครงสร้างที่เสถียรที่สุดในธรรมชาติ โดยโมเลกุลชนิดเดียวกันอาจมีโครงสร้างที่เสถียรมากกว่าหนึ่งโครงสร้างเรียกว่า โครงภาพ หรือ ไอโซเมอร์

### 2.7.2 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ (electronic theory)

ก. ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ระดับพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและค่าเคมีคอลอินเดกซ์ (chemical index)

ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{HOMO}}$ ) ระดับพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{LUMO}}$ ) แถบพลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ ) โดยแถบพลังงานสามารถหาได้จากผลต่างของพลังงาน HOMO และ LUMO ดังสมการ

$$\Delta E_{\text{gap}} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} \quad (2.12)$$

### 2.7.3 ค่าเคมีคอลฮาร์ดเนสส์ (chemical hardness value)

ค่าเคมีคอลอินเดกซ์ ได้แก่ ค่าเคมีคอลฮาร์ดเนสส์ (chemical hardness) ค่าอิเล็กโทรนิคเคมีคอลโพเทนเชียล (electronic chemical potential) และค่ามัลลิแกนอิเล็กโทรเนกาทิวิตี (mulliken electronegativity) ค่าต่างๆ เหล่านี้สามารถคำนวณหาได้จากพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ lowest unoccupied molecular orbital (LUMO,  $E_{\text{LUMO}}$ ) และพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ highest occupied molecular orbital (HOMO,  $E_{\text{HOMO}}$ ) ซึ่งเป็นค่าที่ได้จากการคำนวณโดยวิชาเคมีควอนตัม

ค่าเคมีคอลฮาร์ดเนสส์ ( $\eta$ ) สามารถคำนวณได้โดยอาศัยผลต่างผลต่างของพลังงาน LUMO และ HOMO ดังสมการที่

$$\eta = (\Delta E_{\text{HOMO-LUMO}})/2 \quad (2.13)$$

### 2.7.4 ค่าอิเล็กโทรนิคเคมีคอลโพเทนเชียล (electronic componential value)

ค่าอิเล็กโทรนิคเคมีคอลโพเทนเชียล ( $\mu$ ) คำนวณได้โดยนำพลังงาน LUMO และพลังงาน HOMO มาแทนในสมการ

$$\mu = (E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})/2 \quad (2.14)$$

### 2.7.5 ค่ามัลลิแกนอิเล็กโทรเนกาทิวิตี (Milliken electronegativity)

ค่ามัลลิแกนอิเล็กโทรเนกาทิวิตี ( $\chi$ ) คำนวณได้จากสมการ

$$\chi = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})/2 \quad (2.15)$$

ค่าเคมีคอลอินเดกซ์ทั้ง 3 ชนิด คำนวณจากสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ สามารถใช้อธิบายการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และความเสถียรทางโครงสร้างของโมเลกุลได้

#### 2.7.6 ความหนาแน่นสถานะ (density of state)

ความหนาแน่นสถานะ (density of state, DOS) ว่าด้วยจำนวนความหนาแน่นสถานะนั้นคือ เนื้อที่ที่พื้นผิวประมาณสถานะที่เปลี่ยนไปต่อพลังงาน ทารด้วยหนึ่งสถานะ (เนื้อที่ในหนึ่งสถานะ) มันก็คือจำนวนสถานะนั่นเอง สำหรับระดับพลังงาน Fermi level หาได้จากพล็อตพื้นผิวนี้ใน reciprocal space สามมิติ เราจะได้เป็นพื้นผิวขึ้นมา เรียกว่า Fermi surface สำหรับการนำไฟฟ้านั้น ยกตัวอย่างเช่นหาก อิเล็กตรอนเติม state บน Fermi surface เติมแถบพลังงานพอดี อิเล็กตรอนก็ไม่มีสถานะเหลือพอจะนำไฟฟ้าได้ อันนี้เป็นหลักการของฉนวน ส่วนโลหะอัลคาไลน์ อิเล็กตรอนเติม Fermi surface ไม่เต็มถึงแถบพลังงานคือเติมไม่ถึง BZ (Brillian zone) นั่นเป็นสาเหตุที่มันเหลือสถานะไว้นำไฟฟ้าได้

นอกจากนี้หลักการนำไฟฟ้าของโลหะแทรนซิชัน และพวกโลหะหมู่สอง พบว่า Fermi sphere ให้หลักการการนำไฟฟ้าของธาตุแทรนซิชันหลายๆ ตัวรวมถึงพวก Semimetal ใ้ว่า Fermi surface จะคอดลง (neck) และ Fermi surface ก็ไม่สามารถมีพื้นที่อยู่แต่ภายใน 1st brillian zone อยู่แล้ว มันจึงขยายไปถึง 2nd BZ (บางสารประกอบ มันขยายถึง 3rd BZ) ณ จุดที่พื้นผิว fermi และกับ BZ มันก็บอกถึงแถบพลังงาน (band gap) อยู่แล้ว ฉะนั้น การที่มันขยายไปถึง 2nd BZ บ่งบอกถึง ว่า อิเล็กตรอนบางส่วนได้ขยายไปอยู่ใน อีกแถบพลังงานนั้นหมายถึงแถบพลังงานของบางออร์บิทัลเกิดการซ้อนทับ (overlap) ฉะนั้น หากแถบพลังงานแคบพอจะได้สมบัติที่ใกล้เคียงกับโลหะ แต่หากแถบพลังงานกว้างมากซ้อนทับของมันจะน้อยและมันจะนำไฟฟ้าไม่ได้

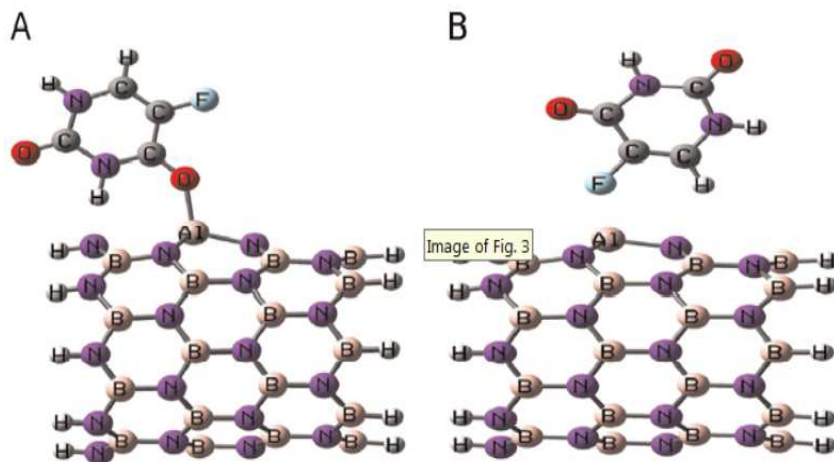
ความซับซ้อนของแถบพลังงาน (band energy) ของวัสดุต่างๆ มีส่วนสำคัญในการคำนวณและวิจัย ซึ่งส่วนใหญ่งานวิจัยเหล่านี้ จะนำไปสู่ความเข้าใจทางด้านการนำไฟฟ้าของวัสดุต่างๆ มากขึ้น เพื่อที่จะเอาชนะขีดจำกัดในการออกแบบทางวิศวกรรมต่างๆ (เช่น พังชั่นใหม่ๆ การลดขนาด การเพิ่มประสิทธิภาพ) และการออกแบบทางวิศวกรรมเหล่านี้ จะนำไปสู่ผลกำไรมหาศาลของผู้ผลิตนั้นเป็นเหตุผลว่าทำไมจึงมีการทุ่มงบประมาณเพื่องานวิจัยจากหลายบริษัทในตลาด

สิ่งที่เป็นตัวกำหนดความสามารถในการนำไฟฟ้าของสารที่มีคุณสมบัติเป็นตัวนำไฟฟ้า (conductor) สารกึ่งตัวนำไฟฟ้า (semi-conductor) หรือฉนวน (insulator) คือ ลักษณะช่องว่างของแถบพลังงาน ซึ่งมักใช้ในหน่วยอิเล็กตรอนโวลต์ การคำนวณความหนาแน่นสถานะสามารถบอกแถบพลังงานของสารได้ด้วย

## 2.8 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง (related works)

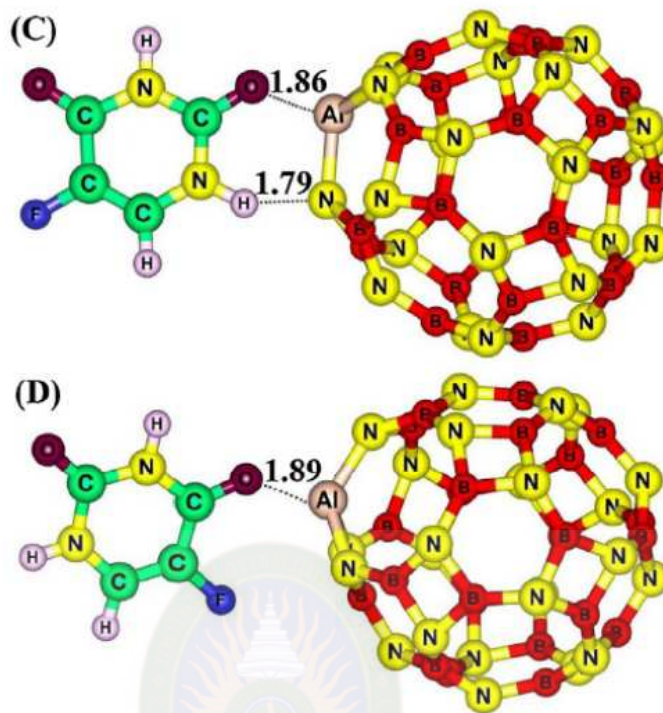
Soltani และคณะ (Soltani, *et al.*, 2015) ได้ศึกษาการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมอะลูมิเนียม แกลเลียมและเจอร์มาเนียมด้วยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP ในเฟสแก๊ส พบว่าการซึ่ต่อมออกซิเจนของ 5-ฟลูออโรยูราซิลจะเกิดอันตรกิริยาที่แข็งแกร่งกับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ขนาด (8,0) และ (5,5) โดยท่อที่มีการเติมแกลเลียมจะดูดซับได้ดีกว่าท่อที่มีการเติมอะลูมิเนียมและเจอร์มาเนียม ตามลำดับโครงสร้างการดูดซับ5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ แสดงดังภาพที่ 2.10





ภาพที่ 2.10 โครงสร้างของการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (Soltani, *et al.*, 2015)

ในปี 2017 Hazrati และคณะ (2017) ได้รายงานการศึกษาการดูดซับ 5-ฟลูออโร ยูราซิลบน โบรอนไนไตรด์ฟลูออรีน ( $B_{24}N_{24}$ ) โดยการศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอพีที่ระดับ B3LYP พบว่าอะตอม ออกซิเจนของ 5-ฟลูออโรยูราซิลสามารถดูดซับบนอะตอมโบรอนของฟลูออรีนได้ มีค่าพลังงาน การดูดซับเท่ากับ  $-11.90$  กิโลแคลอรีต่อโมล นอกจากนี้ยังพบว่าการแทนที่อะตอม โบรอนของ ฟลูออรีนด้วยอะตอมซิลิกอนหรืออะลูมิเนียมจะเพิ่มความแข็งแรง ของการดูดซับ สูงขึ้นอย่างเห็นได้ชัด โดยพบว่าพลังงานการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนฟลูออรีนที่มีการเติม อะลูมิเนียมหรือซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-50.13$  และ  $-34.19$  กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ สมบัติ ทางอิเล็กทรอนิกส์แสดงให้เห็นว่าฟลูออรีน มีความว่องไวต่อ 5-ฟลูออโรยูราซิลสูง จากการ ศึกษากลไกการดูดซับพบว่าเมื่อเซลล์มะเร็งที่มีค่า pH ต่ำ จะสามารถแยก 5-ฟลูออโรยูราซิลและ ฟลูออรีนออกจากกันได้อย่างชัดเจน โครงสร้างของ การดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนฟลูออรีน แสดงดังภาพที่ 2.11

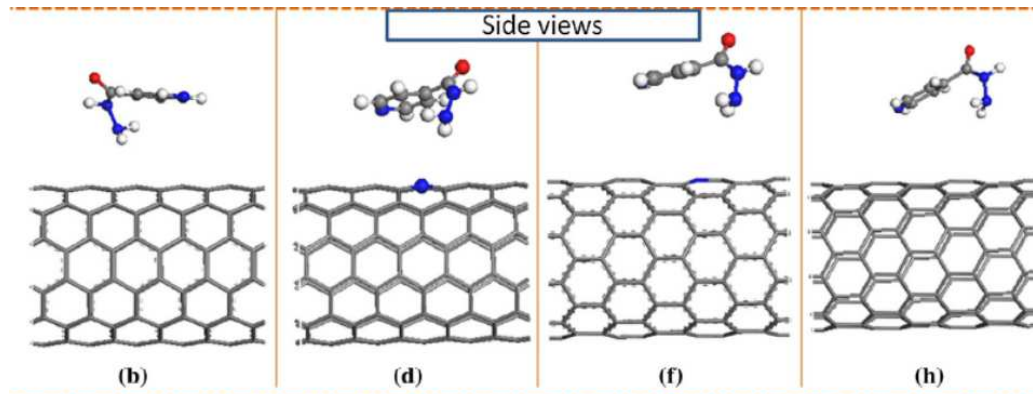


ภาพที่ 2.11 การดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนฟลูออไรด์ (Hazrati, Javanshir & Bagheri, 2017)

ในปี 2016 Farmanzadeh และ Rezainejad (2016) ศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไดเอซิโนน (diazinon) และฮิโนซาน (hinozan) บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมเหล็กด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัล ความหนาแน่นวิธี Grimme พบว่าไดเอซิโนนและฮิโนซานสามารถดูดซับบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมเหล็กตรงตำแหน่งอะตอมไนโตรเจน โดยที่ฮิโนซานสามารถดูดซับบนท่อได้ดีกว่าไดเอซิโนน พลังงานการดูดซับในเฟสของเหลวต่ำกว่า ในเฟสแก๊สและเป็นการดูดซับไดเอซิโนนและฮิโนซานบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ด้วยแรงแวนเดอร์วาลส์

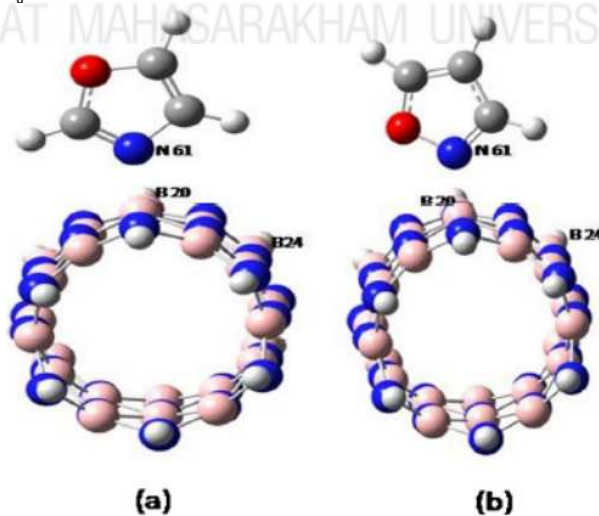
ในปี 2014 Saikia และ Deka (2014) รายงานการดูดซับไอโซไนอาซิด (isoniazid) และไพราซีนามาไมด์ (pyrazinamide) บนท่อนาโนคาร์บอนขนาด (6,6) และ (10,0) ที่มีการเติมไนโตรเจนด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น ได้ศึกษาพลังงานการยึดจับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ พบว่าเกิดกระบวนการดูดซับแบบคายความร้อนและการดูดซับไอโซไนอาซิดและไพราซีนามาไมด์ทำให้สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน โครงสร้างแสดง ดังภาพที่ 2.12





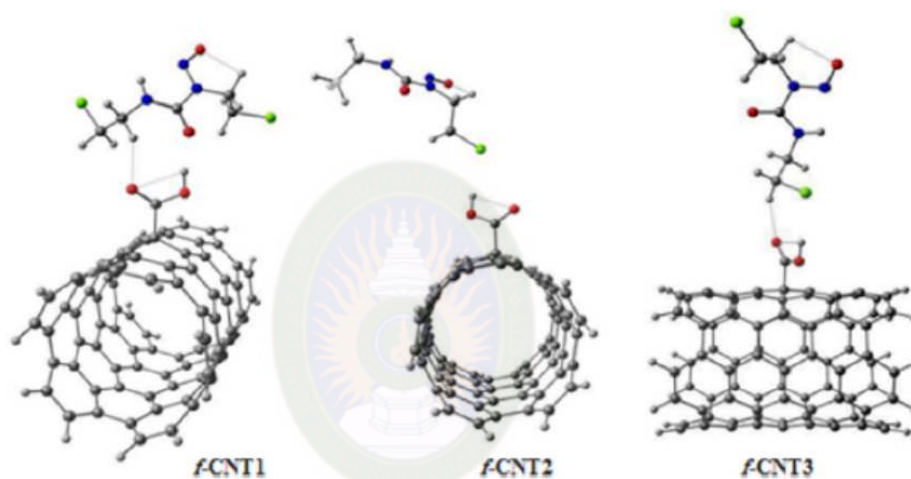
ภาพที่ 2.12 การดูดซับไอโซไนอาซิด (isoniazid) และไพราซีนามาิด (pyrazinamide) บนท่อนาโนคาร์บอน (Saikia & Deka, 2014)

ในปี 2015 Kaur และคณะ (2015) ได้รายงานการศึกษาการดูดซับออกซาโซล (oxazole) และไอโซออกซาโซล (isoxazole) บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ขนาด (6,0) และ (5,5) ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น จากการศึกษาพลังงานการดูดซับ การกระจายตัวของออร์บิทัลของอิเล็กตรอนและประจุบางส่วน โครงสร้างแสดงให้เห็นถึงการดูดซับเป็นแบบเคมีด้วยพันธะโควาเลนต์บนท่อนาโนแบบซิกแซกและเป็นการดูดซับทางกายภาพบนท่อนาโนแบบอาร์มแชร์ การศึกษาในเฟสน้ำพบว่าเกิดการดูดซับได้ดีขึ้นและความสามารถในการละลายดีขึ้นด้วย สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะ (density of states) การถ่ายโอนประจุ NBO และการกระจายตัวของออร์บิทัลของอิเล็กตรอนเกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์มีความว่องไวต่อออกซาโซลและไอโซออกซาโซล จึงอาจจะเป็นวัสดุที่มีความเหมาะสมสำหรับดูดซับยาทั้งสองชนิด โครงสร้างแสดงดังภาพที่ 2.13



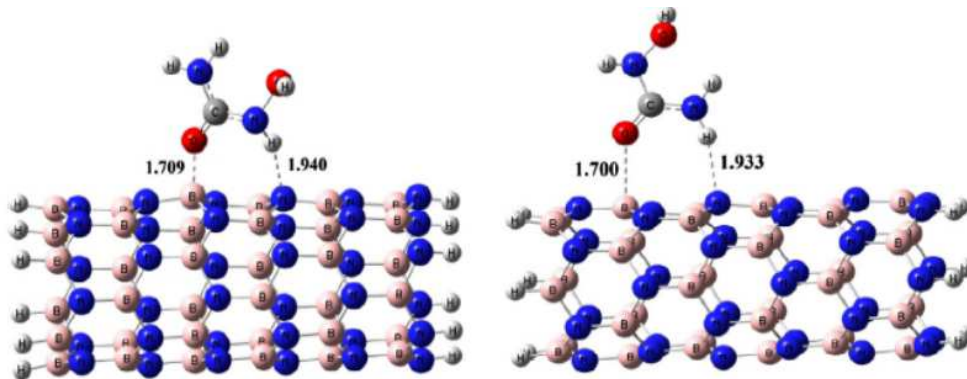
ภาพที่ 2.13 การดูดซับออกซาโซล (oxazole) และไอโซออกซาโซล (isoxazole) บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (Kaur, et al., 2015)

ในปี 2017 Khorrama และคณะ (2017) ได้ศึกษาผลของตัวทำละลาย ที่มีต่ออันตรกิริยาระหว่างคาร์มัสทีน (carmustine) กับท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมหมู่ฟังก์ชันของกรดคาร์บอกซิลิก (-COOH) ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น จากการศึกษาพลังงานการดูดซับ โครงสร้างของโมเลกุล ระยะยึดจับและการกระจายตัวของ อิเล็กตรอนพบว่า การดูดซับคาร์มัสทีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมหมู่ฟังก์ชันเป็นกระบวนการดูดซับแบบคายความร้อน ในขณะที่การดูดซับบนท่อแบบดั้งเดิมเป็นการดูดซับแบบดูดความร้อน การดูดซับคาร์มัสทีนทำให้ความสามารถในการละลายของท่อในระบบที่เป็นน้ำดีขึ้น และเกิดกระบวนการถ่ายโอนประจุจากท่อไปยังคาร์มัสทีน โครงสร้างแสดงดังภาพที่ 2.14



ภาพที่ 2.14 การดูดซับคาร์มัสทีน (carmustine) ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมหมู่ฟังก์ชันของกรดคาร์บอกซิลิก (Khorram, *et al.*, 2017)

ปี 2017 Hesabi และ Ardakani (2017) ได้ศึกษาอันตรกิริยาระหว่าง ไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ และท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมเหล็กด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ CAM-B3LYP โดยศึกษาอันตรกิริยา, ออร์บิทัลเชิงพันธะ (natural bond orbital), quantum theory of atoms in molecules และ frontier molecular orbital พลังงาน การดูดซับแสดงให้เห็นว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์สามารถดูดซับคาร์บาไมด์ในเฟสของเหลวได้และความสามารถในการดูดซับเพิ่มขึ้นเมื่อเติมอะตอมเหล็กบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ตรงตำแหน่งอะตอม ไนโตรเจน โครงสร้างแสดงดังภาพที่ 2.15



ภาพที่ 215 การดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม (Hesabi & Ardakani, 2017)



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## บทที่ 3

### วิธีดำเนินการวิจัย

การศึกษาเชิงทฤษฎีของโมเลกุลมีความจำเป็นต้องใช้ระบบปฏิบัติการคอมพิวเตอร์ โปรแกรมการคำนวณและการนำเสนอโครงสร้าง โดยในบทที่ 3 จะกล่าวถึงวิธีดำเนินการวิจัยซึ่งประกอบด้วยเครื่องมือและโปรแกรมที่ใช้ในการทำวิจัย แบบจำลองโมเลกุลที่ใช้ในการคำนวณและขั้นตอนในการคำนวณดังต่อไปนี้

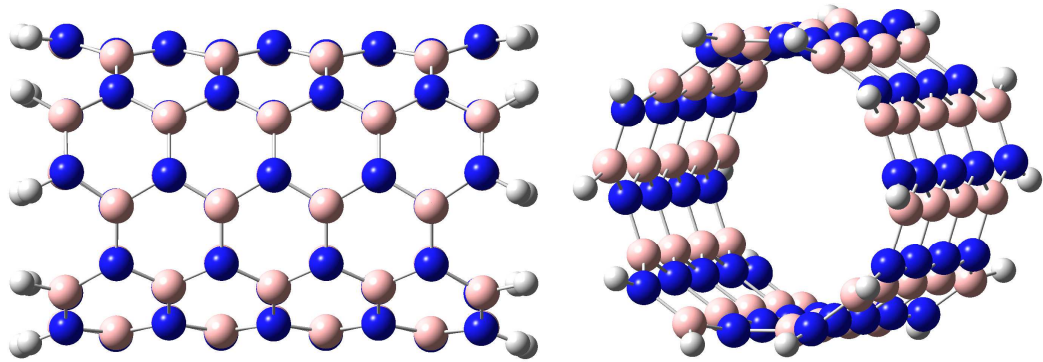
#### 3.1 เครื่องมือและโปรแกรมที่ใช้ในการทำวิจัย

- 3.1.1 คอมพิวเตอร์ส่วนบุคคลและคอมพิวเตอร์เซิร์ฟเวอร์ระบบปฏิบัติการลินุกซ์ (Linux)
- 3.1.2 โปรแกรม Gauss View เวอร์ชัน 5.0
- 3.1.3 โปรแกรม Gaussian 09 (Frisch, *et al.*, 2008)
- 3.1.4 โปรแกรม Ultra Edit 32
- 3.1.5 โปรแกรม Secure shell (SSH)
- 3.1.5 โปรแกรม Molekel 4.3 (Flükiger, Lüthi & Portmann, 2000)
- 3.1.6 โปรแกรม GaussSum เวอร์ชัน 2.1.4 (O'Boyle, Tenderholt & Langner, 2008)
- 3.1.7 โปรแกรม Origin เวอร์ชัน 6.0
- 3.1.7 โปรแกรม Adobe Photoshop CS

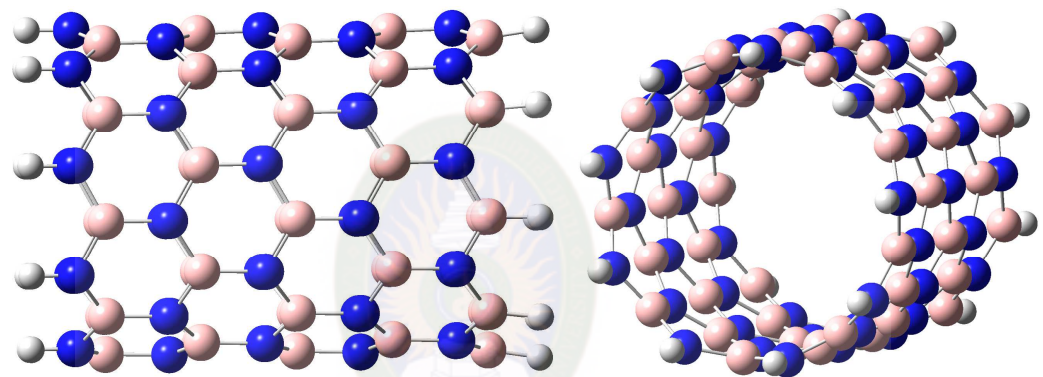
#### 3.2 แบบจำลองโมเลกุลที่ใช้ในการทำวิจัย

##### 3.2.1 ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์และซิกแซกและด้านมะเร็ง

งานวิจัยนี้เลือกท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ผนังเดี่ยวแบบดั้งเดิมขนาด 5,5 ชนิดอาร์มแชร์ (pristine (5,5) armchair boron nitride nanotube, aBNNT) (แสดงดังภาพที่ 3.1) ประกอบไปด้วยโบรอน ไนโตรเจนและไฮโดรเจนจำนวน 45, 45 และ 20 อะตอม ตามลำดับ และท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ผนังเดี่ยวแบบดั้งเดิมขนาด 9,0 ชนิดซิกแซก (pristine (9,0) zigzag boron nitride nanotube, zBNNT) (แสดงดังภาพที่ 3.2) ประกอบไปด้วยโบรอน ไนโตรเจนและไฮโดรเจนจำนวน 45, 45 และ 20 อะตอม ตามลำดับ และเลือกดูดซับยา 3 ชนิด คือ 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มัสทีน และไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ โครงสร้างยาทั้ง 3 ชนิด แสดงดังภาพที่ 3.3

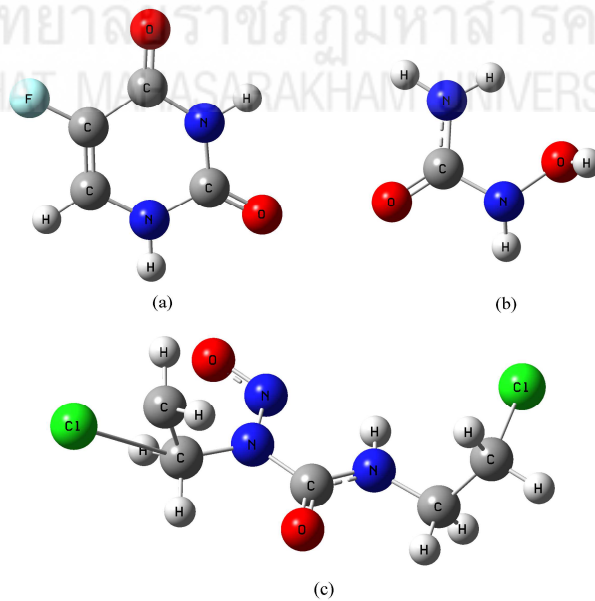


ภาพที่ 3.1 แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิด (5,5) อาร์มแชร์



ภาพที่ 3.2 แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิด (9,0) ซิกแซก

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASAKHAM UNIVERSITY

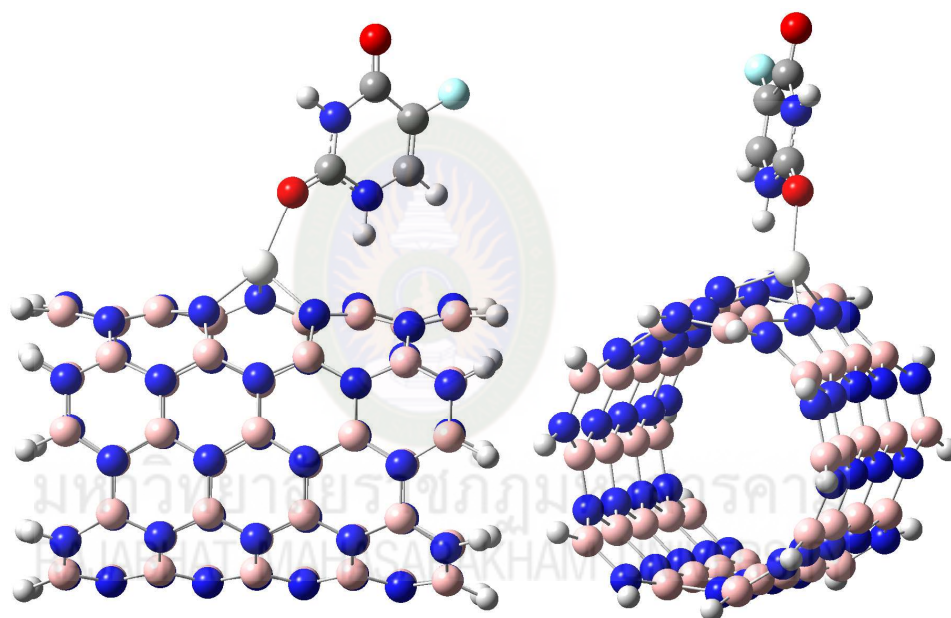


ภาพที่ 3.3 แบบจำลองทางโครงสร้างของ (a) 5-ฟลูออโรยูราซิล (b) คาร์มิดีนและ (c) ไธโตรอกซิลคาร์บาไมด์

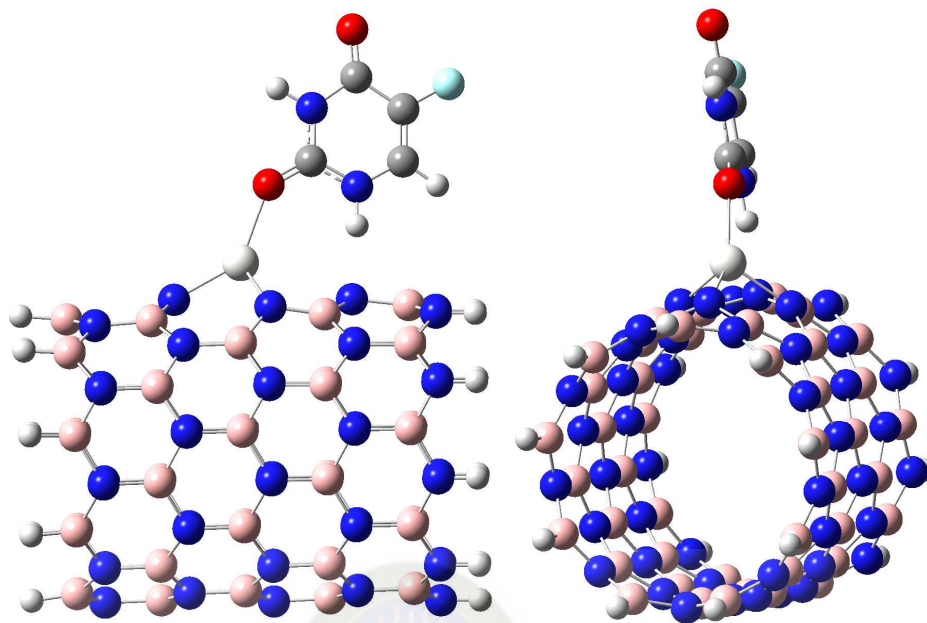


### 3.2.2 การดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์และซิกแซก

การดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิล (5FU) บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ประกอบด้วยการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบตั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์ (5FU/aBNNT) และซิกแซก (5FU/zBNNT) การดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมสแกนเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT) และไนโตรเจน (5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT) การเติมไททาเนียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Ti<sub>B</sub>-aBNNT) และไนโตรเจน (5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT) การดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมสแกนเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT) และการเติมไททาเนียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT) แสดงภาพที่ 3.4 และ 3.5



ภาพที่ 3.4 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (ภาพโดยโปรแกรม Gaussview 3.0)

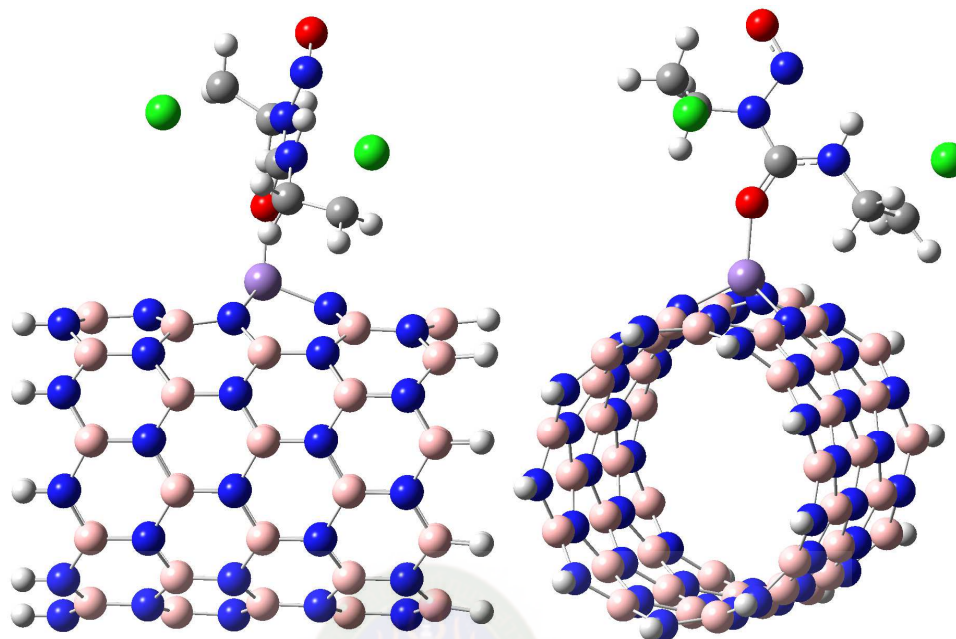


ภาพที่ 3.5 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแตรนซีชัน (ภาพโดยโปรแกรม Gaussview 3.0)

### 3.2.3 การดูดซับยาคาร์มัสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซก

การดูดซับยาคาร์มัสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกประกอบด้วยการดูดซับยาคาร์มัสทีน (carmustine) บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบตั้งเดิมซิกแซก (carmustine/zBNNT) การดูดซับยาคาร์มัสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งโบรอน (carmustine/Mn<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (carmustine/Mn<sub>N</sub>-zBNNT) การเติมเทคนิคเชื่อมตรงตำแหน่งโบรอน (carmustine/Tc<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (carmustine/Tc<sub>N</sub>-zBNNT) และการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งโบรอน (carmustine/Re<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (carmustine/Re<sub>N</sub>-zBNNT) แสดงภาพที่ 3.6

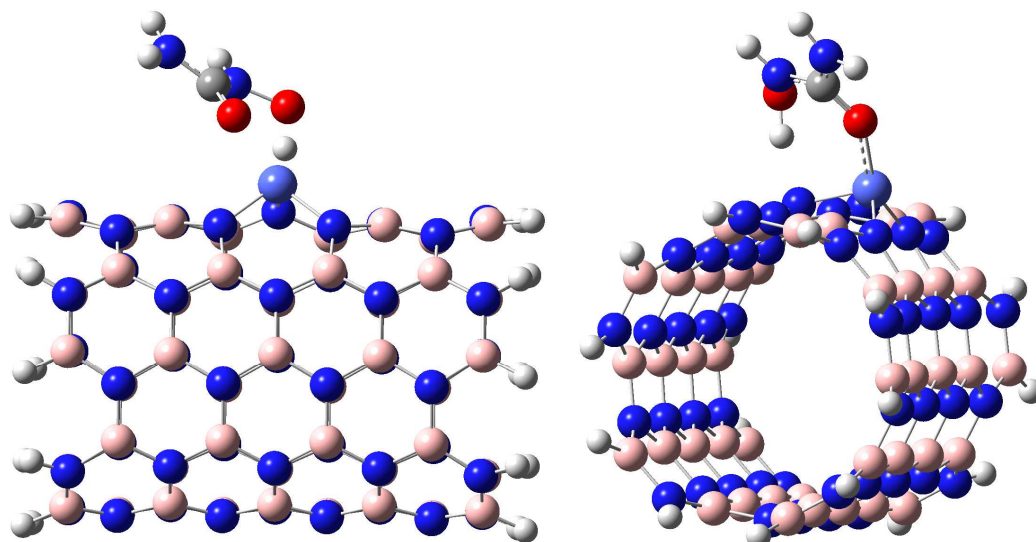




ภาพที่ 3.6 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ภาพโดยโปรแกรม Gaussview 3.0)

### 3.2.4 การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์

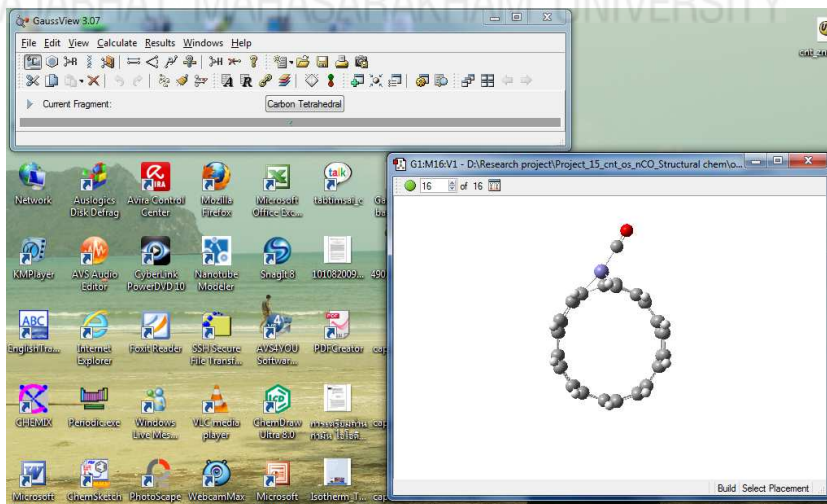
การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ (HC) บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ ประกอบด้วย การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์ (HC/aBNNT) การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันหมู่ 8B ดังนี้ การเติมเหล็กตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT) และไนโตรเจน (HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT) การเติมรูทีเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT) และไนโตรเจน (HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT) การเติมออสเมียมตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Os<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (HC/Os<sub>N</sub>-zBNNT) การเติมโคบอลต์ตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Co<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (HC/Co<sub>N</sub>-zBNNT) การเติมโรเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Rh<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (HC/Rh<sub>N</sub>-zBNNT) การเติมอิริเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Ir<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (HC/Ir<sub>N</sub>-zBNNT) การเติมนิกเกิลตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Ni<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (HC/Ni<sub>N</sub>-zBNNT) การเติมแพลลาเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Pd<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (HC/Pd<sub>N</sub>-zBNNT) และการเติมแพลทินัมตรงตำแหน่งโบรอน (HC/Pt<sub>B</sub>-zBNNT) และไนโตรเจน (HC/Pt<sub>N</sub>-zBNNT) แสดงภาพที่ 3.7



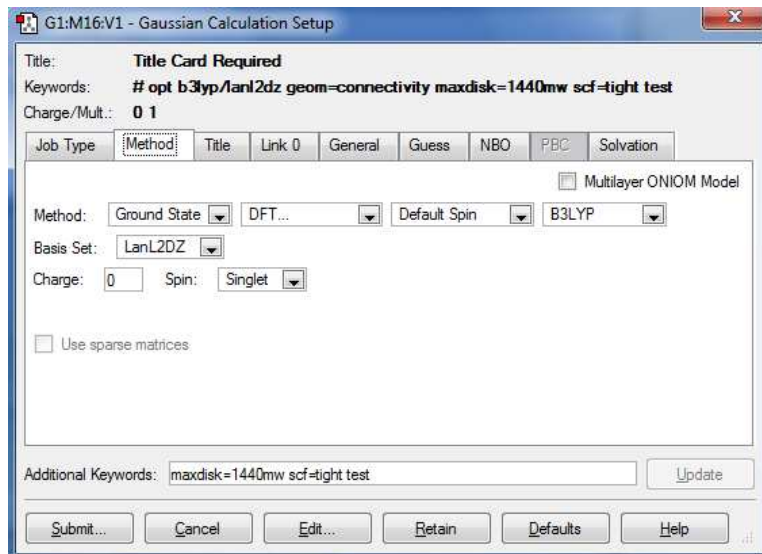
ภาพที่ 3.7 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (ภาพโดยโปรแกรม Gaussview 3.0)

### 3.3 ขั้นตอนการคำนวณ

3.3.1 ใช้โปรแกรม Gauss View 5.0 ในการสร้างโครงสร้างโมเลกุลเบื้องต้นของสารประกอบที่ต้องการศึกษา พร้อมทั้งกำหนดวิธีในการคำนวณ ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (density functional theory, DFT) ที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ (Becke, 1988; Becke, 1993; Lee, Yang & Parr 1988; Hay & Wadt, 1985; Wadt & Hay, 1985; Hay & Wadt, 1985) ดังแสดงในภาพที่ 3.8 และการเลือกทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณแสดงดังภาพที่ 3.9



ภาพที่ 3.8 การเตรียมโครงสร้างโดยใช้โปรแกรม Gaussview

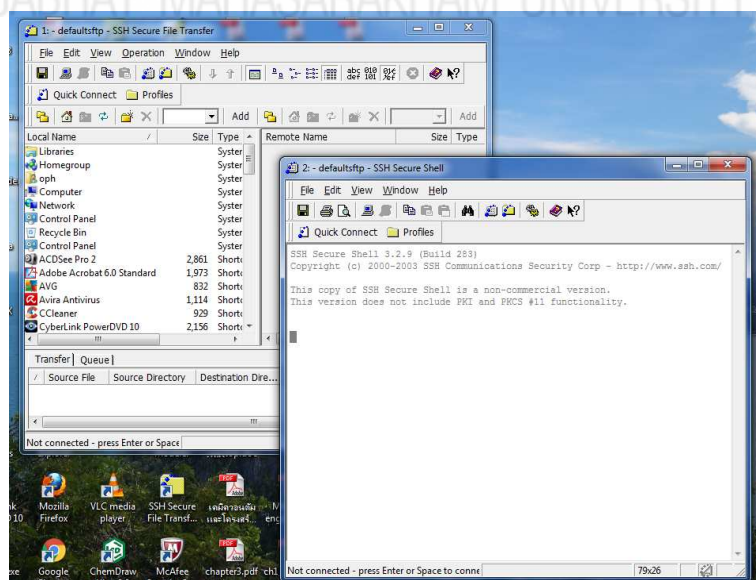


ภาพที่ 3.9 การเลือกทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ

ค้นหาโครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนทั้งหมด โดยคำนวณด้วยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น (density functional theory, DFT) ที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ซึ่งเป็นวิธีการที่เหมาะสมสำหรับจำนวนอะตอมและชนิดของอะตอมในโครงสร้าง

3.3.2 เข้าสู่โปรแกรม UltraEdit 32 เพื่อเปลี่ยนข้อมูลจาก DOS ไปเป็น UNIX เพื่อที่จะนำไปคำนวณในโปรแกรม Gaussian 09 ระบบ Linux ได้

3.3.3 นำไฟล์ที่เตรียมได้ มาเข้าโปรแกรม SSH เพื่อทำการถ่ายโอนไฟล์ไปสู่ระบบ Linux เพื่อคำนวณค่าพลังงานของโครงสร้าง แสดงดังภาพที่ 3.10

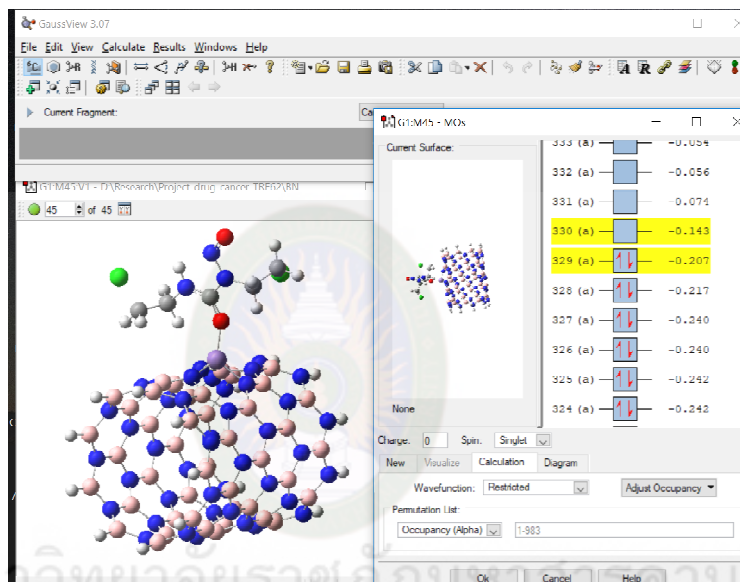


ภาพที่ 3.10 หน้าต่างโปรแกรม SSH สำหรับการส่งคำนวณงาน

3.3.5 นำผลที่ได้จากการคำนวณมาแสดงในโปรแกรม UltraEdit 32 เพื่อตรวจสอบว่ามีความผิดพลาดเกิดขึ้นหรือไม่

3.3.6 อ่านค่าพลังงานของโมเลกุลโดยใช้โปรแกรม UltraEdit 32

3.3.7 ศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ (electronic property) ได้แก่ พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (highest occupied molecular orbital energies,  $E_{\text{HOMO}}$ ), พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (lowest unoccupied molecular orbital,  $E_{\text{LUMO}}$ ) โดยใช้โปรแกรม Gaussview 05 (แสดงดังภาพที่ 3.11)



ภาพที่ 3.11 ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

3.3.8 คำนวณแถบพลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ ) โดยใช้สมการ (3.1)

$$E_{\text{gap}} = E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}} \quad (3.1)$$

เมื่อ  $E_{\text{HOMO}}$  คือ พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

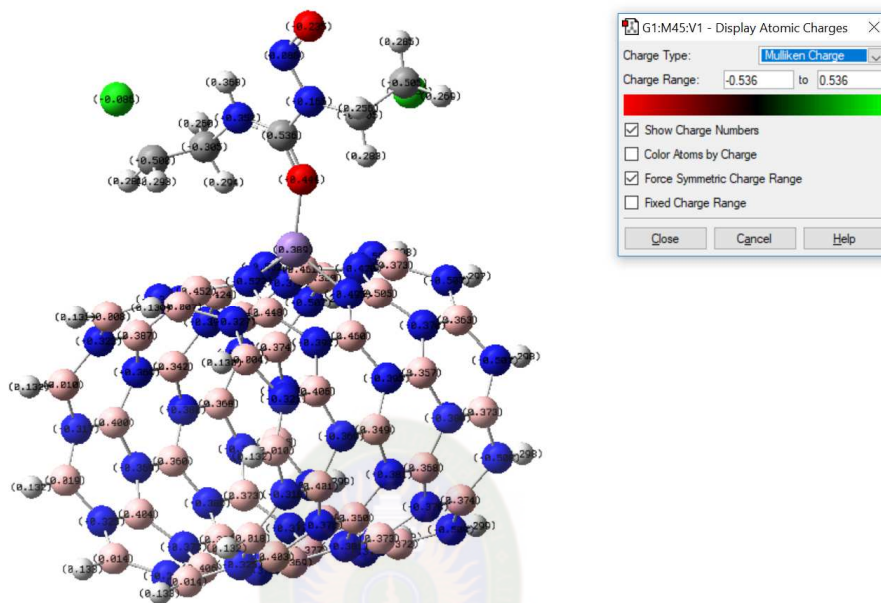
$E_{\text{LUMO}}$  คือ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

3.3.9 คำนวณการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ( $\Delta E_{\text{gap}}$ ) โดยใช้สมการ (3.2)

$$\Delta E_{\text{gap}} = E_{\text{gap}} \text{ ก่อนดูดซับยา} - E_{\text{gap}} \text{ หลังดูดซับยา} \quad (3.2)$$

3.3.10 ใช้โปรแกรม GaussSum-2.1.4 ในการคำนวณหาความหนาแน่นสถานะ (density of state, DOS) พร้อมทั้งพล็อตกราฟโดยใช้โปรแกรม Origin 6.0

3.3.11 อ่านค่าประจุ natural bond orbital (NBO) ด้วยโปรแกรม NBO 5.0 ที่ติดตั้งอยู่ในโปรแกรม GAUSSIAN 09 (แสดงดังภาพที่ 3.12)



ภาพที่ 3.12 ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

คำนวณการถ่ายโอนประจุบางส่วน (partial charge transfer) โดยใช้สมการ (3.3)

PCT = ประจุรวมของอะตอมของยาก่อนการดูดซับ - ประจุรวมของอะตอมของยาหลังการดูดซับ (3.3)

3.3.12 สร้างภาพกราฟิกต่างๆ จากข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยโปรแกรมสำเร็จรูป GAUSSIAN 09 โดยโปรแกรม MOLEKEL 4.3

3.3.13 คำนวณพลังงานการดูดซับ (adsorption energy,  $E_{ads}$ ) ของการดูดซับยาบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ด้วยสมการที่ (3.4)

$$E_{ads} = E_{drug/BNNT} - E_{BNNT} + E_{drug} \quad (3.4)$$

เมื่อ  $E_{ads}$  = พลังงานการดูดซับ

$E_{drug/BNNT}$  = พลังงานทั้งหมดของการดูดซับยาบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์

$E_{BNNT}$  = พลังงานทั้งหมดของท่อนานาโบรอนไนไตรด์

$E_{drug}$  = พลังงานทั้งหมดของโมเลกุลยา



โดยพลังงานของการดูดซับที่ได้จากการคำนวณตามสมการ (3.4) มีค่าติดลบหมายความว่าเกิดกระบวนการดูดซับแบบคายพลังงาน (exothermic process) และค่าพลังงานเป็นบวกแสดงว่าเกิดกระบวนการดูดซับเป็นแบบดูดพลังงาน (endothermic process) โดยระบบที่พลังงานมีค่าติดลบมากๆ จะดูดซับแก๊สแอมโมเนียได้ดีกว่าระบบที่พลังงานมีค่าติดลบน้อยๆ

3.3.14 คำนวณพลังงานในการละลาย (solvation energy,  $E_{\text{solv}}$ ) ของการดูดซับยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ด้วยสมการที่ (3.5)

$$E_{\text{solv}} = E_{\text{sol}} - E_{\text{gas}} \quad (3.5)$$

เมื่อ  $E_{\text{sol}}$  = พลังงานทั้งหมดของการดูดซับยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ในระบบตัวทำละลายน้ำ  
 $E_{\text{gas}}$  = พลังงานทั้งหมดของการดูดซับยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ในระบบแก๊ส

งานวิจัยนี้ศึกษาสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของมุมพันธะ ความยาวพันธะและระยะดูดซับหรือระยะที่ใกล้ที่สุดระหว่างอะตอมของยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ เพื่อเปรียบเทียบลักษณะทางโครงสร้างก่อนและหลังการเกิดอันตรกิริยา ศึกษาสมบัติทางพลังงานที่ได้จากการคำนวณพลังงานของโมเลกุลและพลังงานการดูดซับ เปรียบเทียบความสามารถในการดูดซับยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน เพื่อใช้อธิบายความสามารถในการดูดซับและความแรงของการเกิดอันตรกิริยาได้ ศึกษาพลังงานในการละลาย เพื่อทำความเข้าใจเกี่ยวกับความสามารถในการละลายในตัวทำละลายน้ำและศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แลพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบการถ่ายโอนประจุ โดยการคำนวณประจุบางส่วน (partial charge transfer, PCT) ก่อนและหลังดูดซับแก๊ส การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO and LUMO plot) เพื่อระบุตำแหน่งของอิเล็กตรอนและความหนาแน่นของสถานะ พร้อมทั้งการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ซึ่งจะนำไปสู่การพัฒนาเป็นวัสดุสำหรับตรวจจับหรือกักเก็บเพื่อใช้เป็นระบบนำส่งยาต่อไป

## บทที่ 4

### ผลและอภิปรายผล

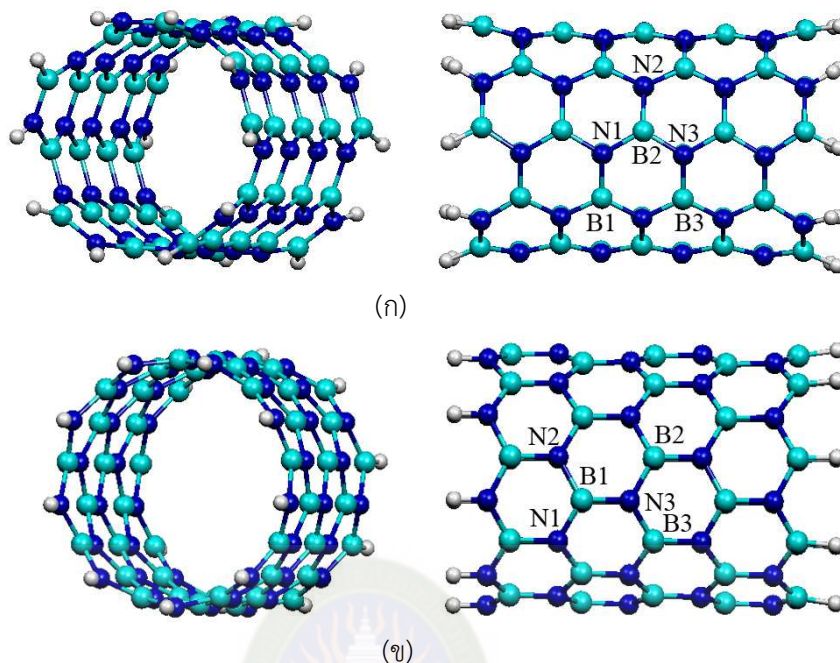
การศึกษาเชิงทฤษฎีของการดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มัสทีนและไฮดรอกซิล คาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์จำเป็นต้องเข้าใจถึงการเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้าง ความสามารถในการดูดซับ ความสามารถในการละลายในตัวทำละลายน้ำและการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์เพื่อให้เข้าใจถึงอันตรกิริยาที่เกิดขึ้น ดังนั้นในบทที่ 4 จะกล่าวถึงสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงาน พลังงานในการละลายและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับ โมเลกุลยาบนท่อนานาโนโบรอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน มีรายละเอียด ดังนี้

#### 4.1 การดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์และซิกแซก

##### 4.1.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์

โครงสร้างที่เสถียรของท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์ (aBNNT) และซิกแซก (zBNNT) แสดงดังภาพที่ 4.1 (ก) และ (ข) ตามลำดับ จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง พบว่าท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์ มีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-B1, N2-B1 และ N3-B1 มีค่าเท่ากับ 1.456, 1.452 และ 1.454 อังสตรอม และมุมพันธะระหว่างอะตอม B-N-B หรือ N-B-N มีค่าเท่ากับ 117.3 (B1-N-B2), 117.3 (B2-N-B3), 119.7 (B3-N-B1) 119.8 (N1-B-N2), 119.3 (N2-B-N3) และ 119.7 (N3-B-N1) องศา สำหรับความยาวและมุมพันธะของท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดซิกแซกพบว่า ความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-B1, N2-B1 และ N3-B1 มีค่าเท่ากับ 1.455, 1.453 และ 1.455 อังสตรอม และมุมพันธะระหว่างอะตอม B-N-B หรือ N-B-N มีค่าเท่ากับ 120.0 (B1-N-B2), 116.3 (B2-N-B3), 119.3 (B3-N-B1) 120.0 (N1-B-N2), 120.0 (N2-B-N3) และ 118.6 (N3-B-N1) องศา โดยที่ความยาวและมุมพันธะที่ได้จากการคำนวณโครงสร้างของท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ทั้งสองชนิดสอดคล้องกับงานวิจัยของ Movlaroooy และ Minaie ซึ่งคำนวณด้วยวิธี DFT ที่ระดับ B3LYP พบว่าความยาวพันธะ B-N ของท่อนานาของท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ขนาด (5,5) และชนิดซิกแซกขนาด (10,0) มีค่าเท่ากับ 1.48 อังสตรอม (Movlaroooy & Minaie, 2018)

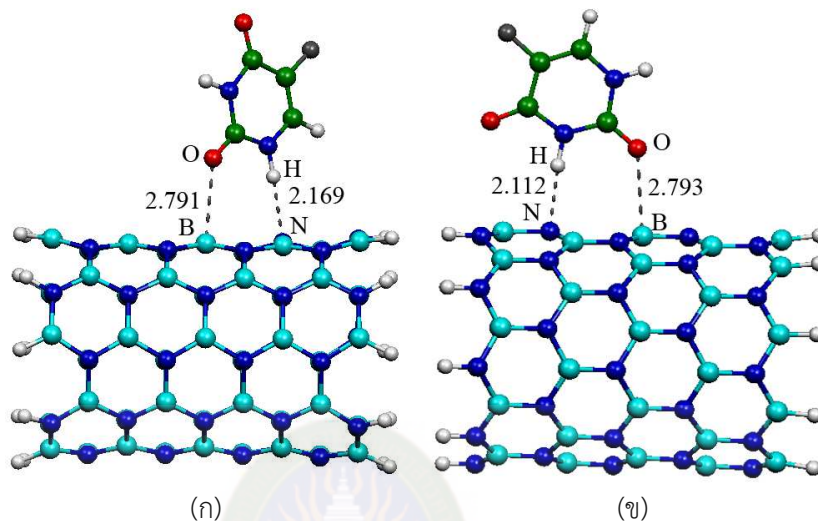




ภาพที่ 4.1 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม (ก) (5,5) อาร์เมอร์ และ (ข) (10,0) ซิกแซก

การศึกษาอันตรกิริยาระหว่างยา 5-ฟลูออโรยูราซิลกับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม โดยสังเกตจากการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะและมุมพันธะ (ตรงบริเวณที่มีการดูดซับยา) เปรียบเทียบก่อนและหลังการดูดซับยา โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์เมอร์และซิกแซก แสดงดังภาพที่ 4.2 ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์เมอร์และซิกแซก แสดงดังตารางที่ 4.1 จากภาพและตารางพบว่าการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์เมอร์มีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-B, N2-B และ N3-B มีค่าเท่ากับ 1.452, 1.460 และ 1.460 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-N-B2, B2-N-B3 และ B3-N-B1 มีค่าเท่ากับ 118.9, 118.4 และ 119.7 องศา และระยะดูดซับระหว่างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และอะตอมออกซิเจนของโมเลกุลยา (tube-O) เท่ากับ 2.791 อังสตรอม และระยะดูดซับระหว่างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุลยา (tube-H) เท่ากับ 2.169 อังสตรอม สำหรับการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดซิกแซกมีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-B, N2-B และ N3-B มีค่าเท่ากับ 1.461, 1.461 และ 1.450 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-N-B2, B2-N-B3 และ B3-N-B1 มีค่าเท่ากับ 117.7, 119.8 และ 119.8 องศา และระยะดูดซับระหว่างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และอะตอมออกซิเจนของโมเลกุลยาเท่ากับ 2.793 อังสตรอม และระยะระหว่างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุลยาเท่ากับ 2.112 อังสตรอม จากการศึกษาความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนและหลังการดูดซับพบว่าแตกต่างกันเล็กน้อยและมีระยะของการดูดซับที่ไกล ดังนั้นจึง

อธิบายได้ว่าการดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมเกิดอันตรกิริยาแบบอ่อนๆ (weak interaction)



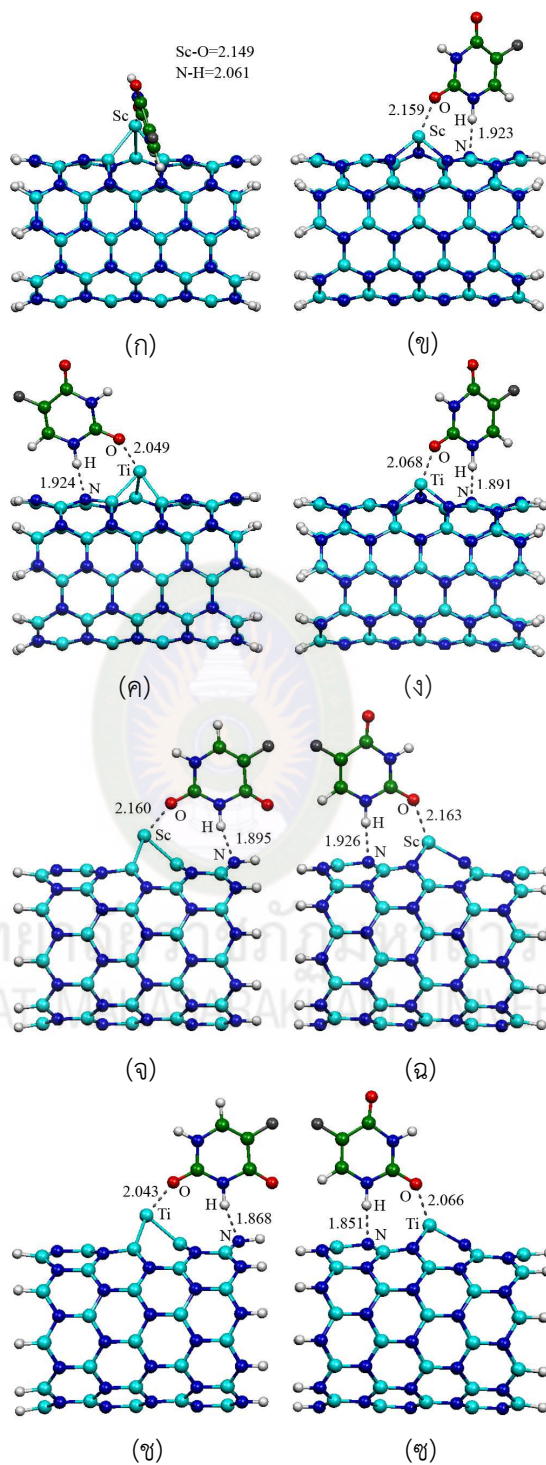
ภาพที่ 4.2 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์ (ก) 5FU/aBNNT และซิกแซก (ข) 5FU/zBNNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนและโบรอน แสดงดังภาพที่ 4.3 ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับ แสดงดังตารางที่ 4.1 สำหรับโครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมสแกนเดียมตรงตำแหน่งไนโตรเจน (5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc, B2-Sc และ B3-Sc มีค่าเท่ากับ 2.260, 2.482 และ 2.268 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc-B2, B2-Sc-B3 และ B3-Sc-B1 มีค่าอยู่ระหว่าง 70.3, 68.9 และ 75.7 องศา และระยะดูดซับ Sc-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.149 และ 2.061 ตามลำดับ โครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมสแกนเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc, N2-Sc และ N3-Sc มีค่าเท่ากับ 1.991, 2.023 และ 1.992 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc-N2, N2-Sc-N3 และ N3-Sc-N1 มีค่าอยู่ระหว่าง 95.7, 93.7 และ 92.9 องศา และระยะดูดซับ Sc-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.159 และ 1.923 ตามลำดับ โครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจน (5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc, B2-Sc และ B3-Sc มีค่าเท่ากับ 2.191, 2.218 และ 2.089 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc-B2, B2-Sc-B3 และ B3-Sc-B1 มีค่าอยู่ระหว่าง 72.3, 79.1 และ 72.3 องศา และระยะดูดซับ Ti-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.049 และ 1.924 ตามลำดับ โครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติม

ไทเทเนียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Ti<sub>b</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc, N2-Sc และ N3-Sc มีค่าเท่ากับ 1.930, 1.969 และ 1.948 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc-N2, N2-Sc-N3 และ N3-Sc-N1 มีค่าอยู่ระหว่าง 96.6, 95.8 และ 93.2 องศา และระยะจุดจับ Ti-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.068 และ 1.891 ตามลำดับ

โครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซกที่มีการเติมสแกนเดียมตรงตำแหน่งไนโตรเจน (5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc, B2-Sc และ B3-Sc มีค่าเท่ากับ 2.385, 2.385 และ 2.200 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc-B2, B2-Sc-B3 และ B3-Sc-B1 มีค่าอยู่ระหว่าง 78.9, 87.9 และ 81.1 องศา และระยะจุดจับ Sc-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.160 และ 1.895 ตามลำดับ โครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมสแกนเดียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc, N2-Sc และ N3-Sc มีค่าเท่ากับ 2.018, 2.014 และ 1.969 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc-N2, N2-Sc-N3 และ N3-Sc-N1 มีค่าเท่ากับ 94.8, 93.9 และ 93.2 องศา และระยะจุดจับ Sc-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.163 และ 1.926 ตามลำดับ โครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจน (5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc, B2-Sc และ B3-Sc มีค่าเท่ากับ 2.196, 2.196 และ 2.098 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-Sc-B2, B2-Sc-B3 และ B3-Sc-B1 มีค่าเท่ากับ 77.1, 74.1 และ 74.1 องศา และระยะจุดจับ Ti-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.043 และ 1.868 ตามลำดับ และโครงสร้างที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งโบรอน (5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc, N2-Sc และ N3-Sc มีค่าเท่ากับ 1.974, 1.974 และ 1.902 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-Sc-N2, N2-Sc-N3 และ N3-Sc-N1 มีค่าเท่ากับ 94.1, 94.8 และ 94.9 องศา และระยะจุดจับ Ti-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.043 และ 1.868 ตามลำดับ

เมื่อเปรียบเทียบโครงสร้างก่อนและหลังการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะแตกต่างจากเดิมอย่างชัดเจน คือความยาวพันธะตรงตำแหน่งจุดจับมีค่ามากขึ้นหรือยาวขึ้นและมุมพันธะมีค่าน้อยลงหรือแคบลง และการศึกษาระยะจุดจับที่ใกล้ที่สุดระหว่างยา 5-ฟลูออโรยูราซิลและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่า มีระยะที่ใกล้กว่าการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม การเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้างนี้เกิดขึ้นเนื่องจากโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิลเกิดอันตรกิริยาที่แรง (strong interaction) กับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันนั่นเอง



ภาพที่ 4.3 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (ก) 5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT (ข) 5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT, (ค) 5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT (ง) 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT, (จ) 5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT (ฉ) 5FU/Sc<sub>B</sub>zaBNNT (ช) 5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT และ (ซ) 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม

**ตารางที่ 4.1** ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยาราคิลบนท่อนานโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)			มุมพันธะ (องศา)			ระยะดูดซับ (อังสตรอม)	
	B1 or N1-M	B2 or N2-M	B3 or N3-M	B1-M-B2 or N1-M-N2	B2-M-B3 or N2-M-N3	B3-M-B1 or N3-M-N1	TM-O	N-H
aBNNT	1.456 (N1-B1)	1.452 (N2-B1)	1.454 (N3-B1)	117.3 (B1-N-B2) 119.8 (N1-B-N2)	117.3 (B2-N-B3) 119.3 (N2-B-N3)	119.7 (B3-N-B1) 119.7 (N3-B-N1)	-	-
5FU/aBNNT	1.452	1.460	1.460	118.9	118.4	119.7	2.791	2.169
5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT	2.260 (2.269)*	2.482 (2.369)	2.268 (2.269)	70.3 (76.3)	68.9 (76.3)*	75.7 (75.6)	2.149	2.061
5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT	1.991 (1.960)	2.023 (1.999)	1.992 (1.960)	95.7 (96.0)	93.7 (96.0)	92.9 (93.8)	2.159	1.923
5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT	2.191 (2.128)	2.218 (2.202)	2.089 (2.128)	72.3 (77.3)	79.1 (77.3)	72.3 (75.1)	2.049	1.924
5FU/Ti <sub>B</sub> -aBNNT	1.930 (1.883)	1.969 (1.909)	1.948 (1.883)	96.6	95.8	93.2	2.068	1.891
zBNNT	1.455 (N1-B1)	1.453 (N2-B1)	1.455 (N3-B1)	120.0 (B1-N-B2) 120.0 (N1-B-N2)	116.3 (B2-N-B3) 120.0 (N2-B-N3)	119.3 (B3-N-B1) 118.6 (N3-B-N1)	-	-
5FU/zBNNT	1.461	1.461	1.450	117.7	119.8	119.8	2.793	2.112
5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT	2.385 (2.326)	2.385 (2.326)	2.200 (2.252)	78.9 (74.1)	87.9 (76.7)	81.1 (76.7)	2.160	1.895
5FU/Sc <sub>B</sub> -zBNNT	2.018 (1.984)	2.014 (1.984)	1.969 (1.954)	94.8 (97.6)	93.9 (93.6)	93.2 (93.6)	2.163	1.926
5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT	2.196 (2.163)	2.196 (2.163)	2.098 (2.137)	77.1 (76.7)	74.1 (77.7)	74.1 (77.7)	2.043	1.868
5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT	1.974 (1.899)	1.974 (1.899)	1.902 (1.879)	94.1 (102.8)	94.8 (99.7)	94.9 (99.7)	2.066	1.851

\* ความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนการดูดซับ



#### 4.1.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์

พลังงานดูดซับ (adsorption energies,  $E_{ads}$ ) ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ แสดงดังตารางที่ 4.2 สำหรับการดูดซับโมเลกุลยาโดยการคำนวณในระบบแก๊ส พบว่าพลังงานการดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม ชนิดอาร์แซนและซิกแซกมีค่าเท่ากับ -5.63 และ -6.32 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ พลังงานการดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์แซนที่มีการเติมโลหะ แทรนซิชั่นมีค่าเท่ากับ -38.19 (5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT), -39.66 (5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT), -39.89 (5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT) และ -36.78 (5FU/Ti<sub>B</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ และพลังงานการดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะ แทรนซิชั่นมีค่าเท่ากับ -34.81 (5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT), -39.47 (5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT), -38.73 (5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT) และ -36.12 (5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า การเติมโลหะ แทรนซิชั่น จะเพิ่มความสามารถในการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ให้สูงขึ้นอย่างเห็นชัด ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์แซนที่มีการเติมโลหะ แทรนซิชั่นสามารถดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลได้ดีกว่าท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกเล็กน้อย ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติม สแกนเดียมตรงตำแหน่งโบรอนดูดซับโมเลกุลยาได้ดีกว่าตำแหน่งไนโตรเจน ในขณะที่ท่อนานาโบรอน ไนไตรด์ที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนดูดซับโมเลกุลยาได้ดีกว่าตำแหน่งโบรอน โดยท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์แซนที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่าพลังงานการดูดซับดีที่สุด

การดูดซับโมเลกุลยาโดยการคำนวณในระบบที่มีตัวทำละลายน้ำพบว่าพลังงานการดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์แซนและซิกแซก มีค่าเท่ากับ -2.58 และ -3.48 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ พลังงานการดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์แซนที่มีการเติมโลหะ แทรนซิชั่นมีค่าเท่ากับ -21.40 (5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT), -17.35 (5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT), -26.02 (5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT) และ -25.37 (5FU/Ti<sub>B</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ และพลังงานการดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโร ยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะ แทรนซิชั่นมีค่าเท่ากับ -17.50 (5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT), -16.78 (5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT), -21.16 (5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT) และ -23.72 (5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า การเติมโลหะ แทรนซิชั่นจะเพิ่ม ความสามารถในการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ให้สูงขึ้นอย่างเห็นชัด ซึ่ง สอดคล้องกับการดูดซับยาในระบบแก๊ส ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์แซนที่มีการเติมโลหะ แทรนซิชั่นสามารถดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลได้ดีกว่าท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกอย่างชัดเจน โดย ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์แซนที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่าพลังงานการดูดซับในระบบตัวทำละลายน้ำได้ดีที่สุด

การศึกษาพลังงานในการละลาย ( $E_{solv}$ ) ในตัวทำละลายน้ำของการดูดซับยา 5-ฟลูออโร ยูราซิลบนท่อนานาโบรอน ไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์แซนและซิกแซกมีค่าเท่ากับ -23.07 และ -32.86 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ (ตารางที่ 4.2) พลังงานในการละลายของการดูดซับยา 5-ฟลูออโร ยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์แซนที่มีการเติมโลหะ แทรนซิชั่นมีค่าเท่ากับ -37.88

(5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT), -31.26 (5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT), -30.81 (5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT) และ -28.61 (5FU/Ti<sub>B</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ และพลังงานในการละลายของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าเท่ากับ -21.52 (5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT), -40.26 (5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT), -42.73 (5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT) และ -37.91 (5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ จากข้อมูลพลังงานในการละลายสรุปได้ว่า การเติมโลหะแทรนซิชันจะเพิ่มความสามารถในการละลายของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลอย่างเห็นชัด ยกเว้นกรณีของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมสแกนเดียมตรงตำแหน่งไนโตรเจน โดยท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่าพลังงานในการละลายดีที่สุด

**ตารางที่ 4.2** พลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ในระบบแก๊สและตัวทำละลายน้ำ พลังงานในการละลาย ( $E_{sol}$ ) ประจุของโลหะและการถ่ายโอนประจุ (PCT) ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์

ชนิด	$E_{ads}$ (แก๊ส) (กิโลแคลอรีต่อโมล)	$E_{ads}$ (น้ำ) (กิโลแคลอรีต่อโมล)	$E_{sol}$ (กิโลแคลอรีต่อโมล)	PCT (อิเล็กตรอน)
5FU/aBNNT	-5.63	-2.58	-23.07	0.031
5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT	-38.19	-21.40	-37.88	0.146
5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT	-39.66	-17.35	-31.26	0.147
5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT	-39.89	-26.02	-30.81	0.164
5FU/Ti <sub>B</sub> -aBNNT	-36.78	-25.37	-28.61	0.201
5FU/zBNNT	-6.32	-3.48	-32.86	0.025
5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT	-34.81	-17.50	-21.52	0.095
5FU/Sc <sub>B</sub> -zBNNT	-39.47	-16.78	-40.26	0.149
5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT	-38.73	-21.16	-42.73	0.160
5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT	-36.12	-23.72	-37.91	0.197

4.1.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์

พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{HOMO}$ ) และพลังงานของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{LUMO}$ ) แลပ်พลังงาน ( $E_{gap}$ ) เพอร์เซ็นต์การเปลี่ยนแปลงพลังงาน ( $\% \Delta E_{gap}$ ) ของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.3 จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์พบว่า การดูดซับโมเลกุลยาส่งผลให้  $E_{HOMO}$  และ  $E_{LUMO}$  ของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน



โดยที่แถบพลังงานสำหรับโครงสร้าง 5FU/aBNNT, 5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT, 5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT, 5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT, 5FU/Ti<sub>B</sub>-aBNNT, 5FU/zBNNT, 5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT, 5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT, 5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT และ 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT มีค่าเท่ากับ 4.789, 1.769, 3.402, 1.388, 1.578, 4.572, 1.143, 3.483, 0.925 และ 1.442 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบแถบพลังงานของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ก่อนและหลังการดูดซับโมเลกุลยาพบว่าโครงสร้าง 5FU/aBNNT, 5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT, 5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT, 5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT, 5FU/Ti<sub>B</sub>-aBNNT, 5FU/zBNNT, 5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT, 5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT, 5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT และ 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT เกิดการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานไป 20.36, 15.56, 20.36, 22.67, 47.28, 20.74, 49.98, 20.98, 48.50 และ 50.94 อิเล็กตรอนโวลต์ แสดงให้เห็นว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมเกิดการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานน้อยกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ยกเว้นโครงสร้าง 5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT มีเปอร์เซ็นต์การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานเท่ากับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม และโครงสร้าง 5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT มีการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานที่น้อยกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานบ่งบอกถึงความสามารถในการนำไฟฟ้า ถ้ามีการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานมากแสดงว่าความสามารถในการนำไฟฟ้าจะเกิดเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมมากด้วย ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเหมาะสมที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจจับ 5-ฟลูออโรยูราซิล มากกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบปกติ

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) สามารถหาได้จากการคำนวณ natural bond orbital (NBO) ซึ่งการถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แสดงให้เห็นถึงการเกิดอันตรกิริยาต่อกัน การถ่ายโอนประจุบางส่วน (partial charge transfers, PCT) แสดงดังตารางที่ 4.2 จากตารางพบว่า ค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์และซิกแซกมีค่าเท่ากับ 0.031 และ 0.025 อิเล็กตรอน ตามลำดับ ค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์สำหรับโครงสร้าง 5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT, 5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT, 5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT, 5FU/Ti<sub>B</sub>-aBNNT, 5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT, 5FU/Sc<sub>B</sub>-zBNNT, 5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT และ 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT มีค่าเท่ากับ 0.146, 0.147, 0.164, 0.201, 0.095, 0.149, 0.160 และ 0.197 อิเล็กตรอน ตามลำดับ การศึกษาการถ่ายโอนประจุของการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์พบว่ามีค่าเป็นบวก หมายความว่าเกิดการถ่ายโอนประจุจากโมเลกุลยาไปยังท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ โดยการถ่ายโอนประจุจากโมเลกุลยาไปยังท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่ามากกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม สอดคล้องกับค่าพลังงานดูดซับที่ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถดูดซับโมเลกุลยาได้ดีกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม

ตารางที่ 4.3 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{HOMO}}$ ) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{LUMO}}$ ) แลပ်พลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ ) การเปลี่ยนแปลงแลပ်พลังงาน ( $\% \Delta E_{\text{gap}}$ ) ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ในระบบแก๊สและตัวทำละลายน้ำ

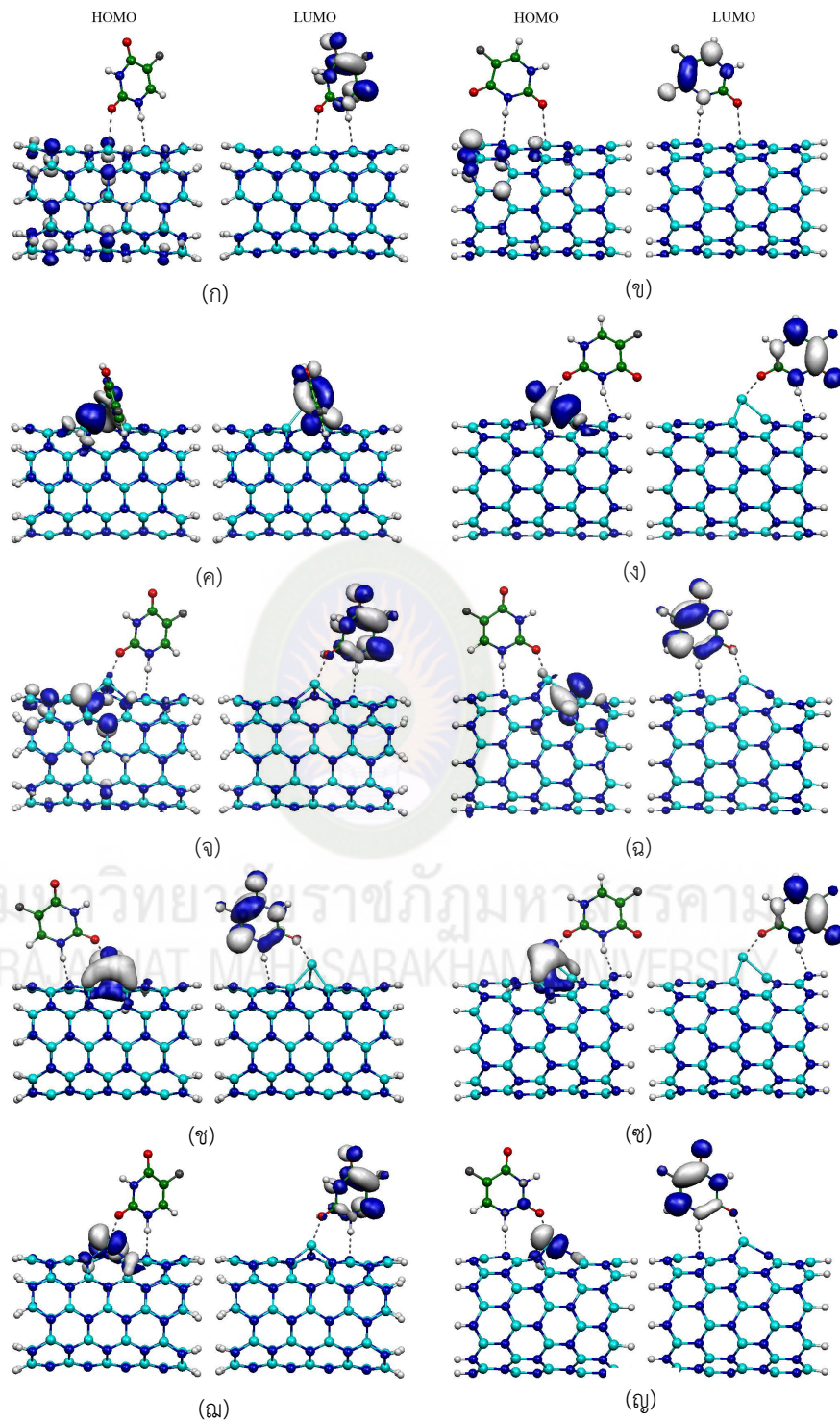
ชนิด	ระบบแก๊ส				ระบบตัวทำละลายน้ำ			
	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)	$\% \Delta E_{\text{gap}}$ (%)	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)	$\% \Delta E_{\text{gap}}$ (%)
5FU/aBNNT	-6.721 (-6.721)*	-1.932 (-0.952)	4.789 (6.014)	20.36	-6.585 (-6.585)	-1.878 (-0.544)	4.708 (6.041)	22.07
5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT	-4.463 (-4.463)	-2.694 (-2.367)	1.769 (2.095)	15.56	-3.810 (-3.701)	-2.123 (-1.415)	1.687 (2.286)	26.20
5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT	-6.313 (-6.395)	-2.912 (-2.123)	3.402 (4.272)	20.36	-6.232 (-6.232)	-2.204 (-0.435)	4.027 (5.796)	30.52
5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT	-4.136 (-4.354)	-2.748 (-2.558)	1.388 (1.795)	22.67	-3.674 (-3.565)	-2.150 (-1.714)	1.524 (1.850)	17.62
5FU/Ti <sub>B</sub> -aBNNT	-4.517 (-4.844)	-2.939 (-1.850)	1.578 (2.993)	47.28	-4.136 (-3.891)	-2.259 (-1.034)	1.878 (2.857)	34.27
5FU/zBNNT	-6.640 (-6.613)	-2.068 (-0.599)	4.572 (5.769)	20.74	-6.504 (-6.476)	-1.905 (-0.952)	4.599 (5.524)	16.74
5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT	-4.109 (-4.653)	-2.966 (-2.367)	1.143 (2.285)	49.98	-3.565 (-3.864)	-2.068 (-1.442)	1.497 (2.422)	38.19
5FU/Sc <sub>B</sub> -zBNNT	-6.449 (-6.504)	-2.966 (-2.095)	3.483 (4.408)	20.98	-6.313 (-6.286)	-2.204 (-0.844)	4.109 (5.442)	24.49
5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT	-3.891 (-4.354)	-2.966 (-2.558)	0.925 (1.796)	48.50	-3.456 (-3.565)	-2.123 (-1.687)	1.333 (1.878)	29.02
5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT	-4.463 (-4.871)	-3.021 (-1.932)	1.442 (2.939)	50.94	-4.109 (-3.919)	-2.259 (-1.007)	1.850 (2.912)	34.46

\* แลပ်พลังงานก่อนการดูดซับยา

การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแสดงดังภาพที่ 4.4 สำหรับโครงสร้างการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมทั้งสองชนิดอธิบายได้ว่า อิเล็กตรอนของออร์บิทัล HOMO กระจายตัวอยู่รอบๆ ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ และออร์บิทัล LUMO จะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณโมเลกุลยา สำหรับโครงสร้างการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทั้งสองชนิดอธิบายได้ว่า อิเล็กตรอนของออร์บิทัล HOMO กระจายตัวอยู่รอบๆ ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน และออร์บิทัล LUMO จะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณโมเลกุลยา เนื่องจากตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเสถียรทางโครงสร้างต่ำ จึงทำให้บริเวณดังกล่าวเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนซึ่งเหมาะกับการเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลยา จึงทำให้การดูดซับโมเลกุลยาตรงบริเวณดังกล่าวเกิดอันตรกิริยาที่แข็งแรง ซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานการดูดซับ และการกระจายตัวของออร์บิทัล LUMO ตรงบริเวณยาเกิดขึ้นเนื่องจากระหว่างกระบวนการดูดซับเกิดการถ่ายโอนประจุจากโมเลกุลยาไปยังท่อนานาโบรอนไนไตรด์ทำให้บริเวณรอบๆ โมเลกุลยาเกิดออร์บิทัลว่างนั่นเอง

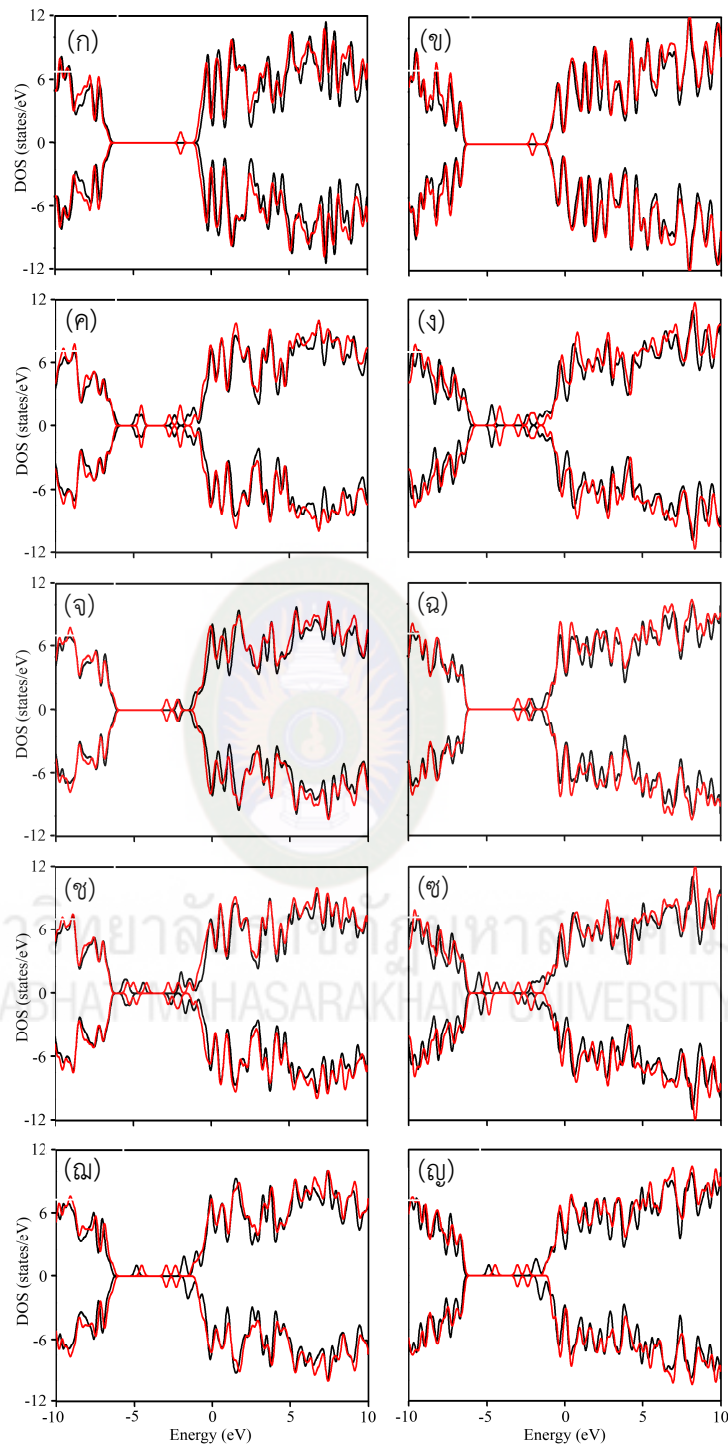


มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



ภาพที่ 4.4 การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (ก) 5FU/aBNNT, (ข) 5FU/zBNNT, (ค) 5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT (ง) 5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT, (จ) 5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT (ฉ) 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT, (ช) 5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT (ซ) 5FU/Sc<sub>B</sub>zBNNT (ฌ) 5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT และ (ญ) 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมของความหนาแน่นสถานะ (density of state, DOS) ของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันที่มีการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิล แสดงดังภาพที่ 4.5 เมื่อเปรียบเทียบความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมก่อนและหลังการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิล (เส้นสีดำและเส้นสีแดง) พบว่าความหนาแน่นสถานะเกิดการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อยในช่วงพลังงาน  $-10$  ถึง  $10$  อิเล็กตรอนโวลต์ และ spin up และ spin down มีความสมมาตรของพีค (peak) ดังภาพที่ 4.5 (ก) และ (ข) และเปรียบเทียบความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันก่อนและหลังดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิล ดังภาพที่ 4.5 (ค) – (ง) จะเห็นว่าหลังดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิล ความหนาแน่นสถานะจะเลื่อนจากตำแหน่งก่อนการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิล อย่างชัดเจนทุกช่วงพลังงาน โดยเฉพาะช่วงพลังงาน  $-3$  ถึง  $-1$  อิเล็กตรอนโวลต์ มีพีคใหม่เกิดขึ้น ซึ่งเป็นความหนาแน่นสถานะของโมเลกุลนั่นเอง จึงทำให้ลักษณะของ spin up และ spin down มีความสมมาตรน้อยกว่าการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิล มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ซึ่งสอดคล้องกับการศึกษาการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ซึ่งแสดงให้เห็นถึงการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อ ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถพัฒนาเป็นตัวตรวจจับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิล ได้ดีกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบปกติ



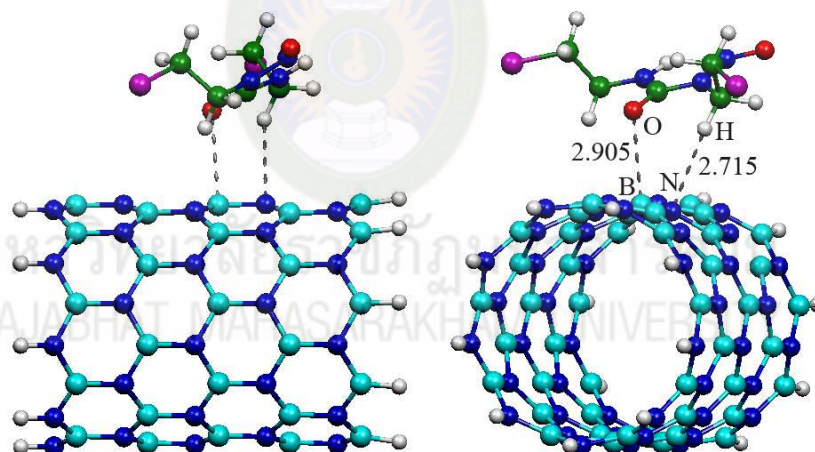
ภาพที่ 4.5 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (ก) 5FU/aBNNT, (ข) 5FU/zBNNT, (ค) 5FU/Sc<sub>N</sub>-aBNNT (ง) 5FU/Sc<sub>B</sub>-aBNNT, (จ) 5FU/Ti<sub>N</sub>-aBNNT (ฉ) 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT, (ช) 5FU/Sc<sub>N</sub>-zBNNT (ซ) 5FU/Sc<sub>B</sub>zBNNT (ฌ) 5FU/Ti<sub>N</sub>-zBNNT และ (ญ) 5FU/Ti<sub>B</sub>-zBNNT (เส้นสีดำคือก่อนดูดซับและเส้นสีแดงคือหลังดูดซับ)



## 4.2 การดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซก

### 4.2.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซก

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกแบบดั้งเดิม แสดงดังภาพที่ 4.6 ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนแสดงดังตารางที่ 4.4 จากภาพและตารางพบว่าโครงสร้างการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกแบบดั้งเดิมมีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-B, N2-B และ N3-B มีค่าเท่ากับ 1.460, 1.453 และ 1.457 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-N-B2, B2-N-B3 และ B3-N-B1 มีค่าอยู่ในช่วง 115.6, 119.7 และ 119.4 องศา ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-B-N2, N2-B-N3 และ N3-B-N1 มีค่าอยู่ในช่วง 118.6, 119.8 และ 119.5 องศา ตามลำดับ ระยะยึดจับระหว่างอะตอมออกซิเจนของโมเลกุลยากับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม มีค่า 2.905 อังสตรอม และระยะยึดจับระหว่างอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุลยากับอะตอมไนโตรเจนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม มีค่า 2.715 อังสตรอม เมื่อเปรียบเทียบความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนและหลังการดูดซับพบว่าแตกต่างกันเล็กน้อยและมีระยะของการดูดซับที่ไกล ดังนั้นจึงอธิบายได้ว่าการดูดซับโมเลกุลยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมเกิดอันตรกิริยาแบบอ่อนๆ



ภาพที่ 4.6 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซก (carmustine/zBNNT)

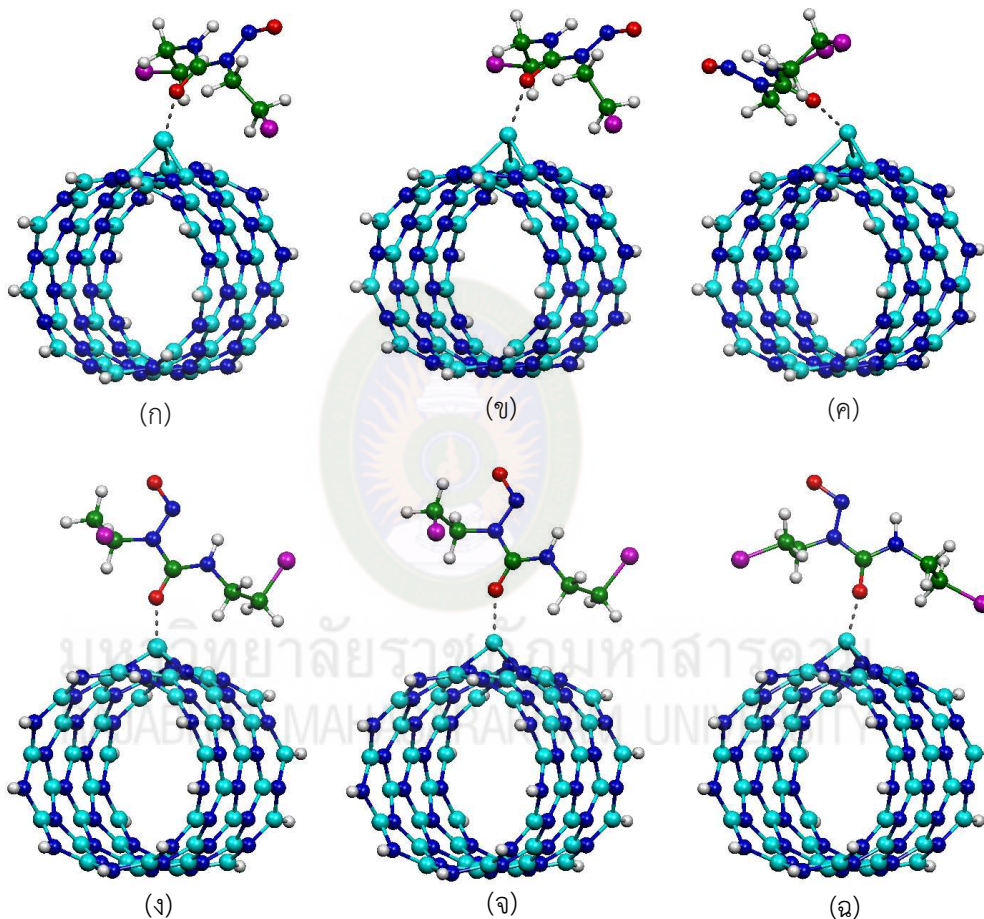
โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนและโบรอน แสดงดังภาพที่ 4.7 ความยาวพันธะ มุมพันธะ และระยะดูดซับ แสดงดังตารางที่ 4.4 โครงสร้างที่มีการดูดซับคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งไนโตรเจน (carmustine/Mn<sub>N</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-Mn, B2-Mn และ B3-Mn มีค่าเท่ากับ 1.933, 2.050 และ 1.916 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-Mn-B2, B2-Mn-B3 และ B3-Mn-B1 มีค่าอยู่ระหว่าง 76.8, 73.2 และ 91.8 องศา และระยะดูดซับ Mn-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 1.943 และ 3.480 อังสตรอม ตามลำดับ และโครงสร้างที่มีการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งโบรอน (carmustine/Mn<sub>B</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-Mn, N2-Mn และ N3-Mn มีค่าเท่ากับ 1.984, 1.984 และ 1.953 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-Mn-N2, N2-Mn-N3 และ N3-Mn-N1 มีค่าอยู่ระหว่าง 97.6, 93.6 และ 93.6 องศา และระยะดูดซับ Mn-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.010 และ 3.811 อังสตรอม ตามลำดับ

โครงสร้างที่มีการดูดซับคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมเทคนิคิเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจน (carmustine/Tc<sub>N</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-Tc, B2-Tc และ B3-Tc มีค่าเท่ากับ 2.014, 2.158 และ 1.966 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-Tc-B2, B2-Tc-B3 และ B3-Tc-B1 มีค่าอยู่ระหว่าง 76.3, 71.6 และ 91.5 องศา และระยะดูดซับ Tc-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.206 และ 3.479 อังสตรอม ตามลำดับ และโครงสร้างที่มีการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมเทคนิคิเนียมตรงตำแหน่งโบรอน (carmustine/Tc<sub>B</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-Tc, N2-Tc และ N3-Tc มีค่าเท่ากับ 1.974, 1.959 และ 1.958 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-Tc-N2, N2-Tc-N3 และ N3-Tc-N1 มีค่าอยู่ระหว่าง 92.3, 94.3 และ 93.6 องศา และระยะดูดซับ Tc-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.031 และ 2.705 อังสตรอม ตามลำดับ

โครงสร้างที่มีการดูดซับคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจน (carmustine/Re<sub>N</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-Re, B2-Re และ B3-Re มีค่าเท่ากับ 2.052, 2.129 และ 1.995 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-Re-B2, B2-Re-B3 และ B3-Re-B1 มีค่าอยู่ระหว่าง 75.2, 77.7 และ 92.9 องศา และระยะดูดซับ Re-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 2.028 และ 2.614 อังสตรอม ตามลำดับ และโครงสร้างที่มีการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งโบรอน (carmustine/Re<sub>B</sub>-zBNNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง N1-Re, N2-Re และ N3-Re มีค่าเท่ากับ 1.957, 1.968 และ 1.951 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-Re-N2, N2-Re-N3 และ N3-Re-N1 มีค่าอยู่ระหว่าง 91.2, 92.9 และ 95.6 องศา และระยะดูดซับ Re-O และ N-H มีค่าเท่ากับ 1.965 และ 3.173 อังสตรอม ตามลำดับ

เมื่อเปรียบเทียบโครงสร้างก่อนและหลังการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะแตกต่างจากเดิมอย่างชัดเจนคือความยาวพันธะตรงตำแหน่งดูดซับมีค่ามากขึ้นหรือยาวขึ้น ยกเว้นการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งโบรอน พบว่าความยาวพันธะสั้น

กว่าเดิม การวิเคราะห์มุมพันธะพบว่า การดูดซับยาทำให้บางมุมพันธะตรงบริเวณที่มีการดูดซับยามีค่าน้อยลงหรือแคบลงและบางโครงสร้างมีมุมพันธะที่กว้างขึ้น การศึกษาระยะดูดซับที่ใกล้ที่สุดระหว่างยาคาร์มัสทีนและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่า มีระยะที่ใกล้กว่าการดูดซับยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม การเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้างนี้เกิดขึ้นเนื่องจากโมเลกุลยาคาร์มัสทีนเกิดอันตรกิริยาที่แรงกับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันนั่นเอง



ภาพที่ 4.7 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับคาร์มัสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (ก) carmustine/ $Mn_N$ -BNNT, (ข) carmustine/ $Tc_N$ -BNNT, (ค) carmustine/ $Re_N$ -BNNT, (ง) carmustine/ $Mn_B$ -BNNT, (จ) carmustine/ $Tc_B$ -BNNT และ (ฉ) carmustine/ $Re_B$ -BNNT

**ตารางที่ 4.4** ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)			มุมพันธะ (องศา)			ระยะดูดซับ (อังสตรอม)	
	B1 or N1-M	B2 or N2-M	B3 or N3-M	B1-M-B2 or N1-M-N2	B2-M-B3 or N2-M-N3	B3-M-B1 or N3-M-N1	TM-O	N-H
carmustine/zBNNT	1.460 (N1-B)	1.453 (N2-B)	1.457 (N3-B)	115.6 (B1-N-B2) 118.6 (N1-B-N2)	119.7 (B2-N-B3) 119.8 (N2-B-N3)	119.4 (B3-N-B1) 119.5 (N3-B-N1)	2.905	3.685
carmustine/Mn <sub>N</sub> - zBNNT	1.933 (1.961)*	2.050 (1.960)	1.916 (1.965)	76.8 (75.6)*	73.2 (85.6)	91.8 (85.4)	1.943	3.480
carmustine/Mn <sub>B</sub> - zBNNT	1.984 (1.817)	1.984 (1.817)	1.953 (1.822)	97.6 (99.3)	93.6 (103.2)	93.6 (103.2)	2.010	3.811
carmustine/Tc <sub>N</sub> - zBNNT	2.014 (2.118)	2.158 (2.010)	1.966 (1.973)	76.3 (78.2)	71.6 (93.3)	91.5 (74.3)	2.206	3.479
carmustine/Tc <sub>B</sub> - zBNNT	1.974 (2.003)	1.959 (2.003)	1.958 (1.896)	92.3 (94.0)	94.3 (92.4)	93.6 (92.4)	2.031	2.705
carmustine/Re <sub>N</sub> - zBNNT	2.052 (2.071)	2.129 (2.071)	1.995 (2.012)	75.2 (75.9)	77.7 (85.0)	92.9 (85.0)	2.028	2.614
carmustine/Re <sub>B</sub> - zBNNT	1.957 (1.990)	1.968 (1.990)	1.951 (1.891)	91.2 (99.0)	92.9 (93.2)	95.6 (93.2)	1.965	3.173

\* ความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนการดูดซับ

#### 4.2.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซก

พลังงานดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซก แสดงดังตารางที่ 4.5 สำหรับการดูดซับโมเลกุลยาโดยการคำนวณในระบบแก๊สพบว่าพลังงานการดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดซิกแซกมีค่าเท่ากับ -32.92 กิโลแคลอรีต่อโมล พลังงานการดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าเท่ากับ -32.19 (carmustine/Mn<sub>N</sub>-zBNNT), -41.71 (carmustine/Mn<sub>B</sub>-zBNNT), -20.35 (carmustine/Tc<sub>N</sub>-zBNNT), -40.10 (carmustine/Tc<sub>B</sub>-zBNNT), -32.20 (carmustine/Re<sub>N</sub>-zBNNT) และ -44.00 (carmustine/Re<sub>B</sub>-zBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล อธิบายได้ว่าการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งไนโตรเจนและการเติมเทคนิคเนียมและรีเนียมตรงตำแหน่งโบรอนสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ได้

การดูดซับโมเลกุลยาโดยการคำนวณในระบบที่มีตัวทำละลายน้ำพบว่าพลังงานการดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดซิกแซกมีค่าเท่ากับ -1.82 กิโลแคลอรีต่อโมล ซึ่งค่าพลังงานการดูดซับมีค่าน้อย แสดงว่าเกิดอันตรกิริยาแบบอ่อนๆ ในระบบตัวทำละลายน้ำ การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิด

ซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่ามีความใกล้เคียงกับ -21.01 (carmustine/Mn<sub>N</sub>-zBNNT), -25.42 (carmustine/Mn<sub>B</sub>-zBNNT), -10.19 (carmustine/Tc<sub>N</sub>-zBNNT), -20.41 (carmustine/Tc<sub>B</sub>-zBNNT), -14.37 (carmustine/Re<sub>N</sub>-zBNNT) และ -30.67 (carmustine/Re<sub>B</sub>-zBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล อธิบายได้ว่าการเติมโลหะแทรนซิชันช่วยปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโมเลกุลยาอย่างชัดเจน โดยที่ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งโบรอนสามารถจับโมเลกุลยาได้ดีกว่าตำแหน่งไนโตรเจน โดยลำดับความสามารถในการดูดซับในระบบตัวทำละลายน้ำเป็นดังนี้ carmustine/Re-zBNNT > carmustine/Mn-zBNNT > carmustine/Tc-zBNNT

การศึกษาพลังงานในการละลาย ( $E_{sol}$ ) ในตัวทำละลายน้ำของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดซิกแซกมีค่าเท่ากับ -0.33 กิโลแคลอรีต่อโมล พลังงานในการละลายของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าเท่ากับ -34.34 (carmustine/Mn<sub>N</sub>-zBNNT), -31.93 (carmustine/Mn<sub>B</sub>-zBNNT), -38.23 (carmustine/Tc<sub>N</sub>-zBNNT) -35.07 (carmustine/Tc<sub>B</sub>-zBNNT) -39.54 (carmustine/Re<sub>N</sub>-zBNNT) และ -40.28 (carmustine/Re<sub>B</sub>-zBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ จากข้อมูลพลังงานในการละลายสรุปได้ว่า การเติมโลหะแทรนซิชันจะเพิ่มความสามารถในการละลายของท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการดูดซับยาคาร์มีสทีนอย่างเห็นชัด โดยที่ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งโบรอนมีค่าพลังงานในการละลายดีที่สุด

**ตารางที่ 4.5** พลังงานดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ในระบบแก๊สและในตัวทำละลายน้ำและพลังงานในการละลาย ( $E_{sol}$ ) ของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด	$E_{ads}$ (แก๊ส) (กิโลแคลอรีต่อโมล)	$E_{ads}$ (ตัวทำละลาย) (กิโลแคลอรีต่อโมล)	$E_{sol}$ (กิโลแคลอรีต่อโมล)
carmustine/zBNNT	-32.92	-1.82	-0.33
carmustine/Mn <sub>N</sub> -zBNNT	-32.19	-21.01	-34.34
carmustine/Mn <sub>B</sub> -zBNNT	-41.71	-25.42	-31.93
carmustine/Tc <sub>N</sub> -zBNNT	-20.35	-10.19	-38.23
carmustine/Tc <sub>B</sub> -zBNNT	-40.10	-20.41	-35.07
carmustine/Re <sub>N</sub> -zBNNT	-32.20	-14.37	-39.54
carmustine/Re <sub>B</sub> -zBNNT	-44.00	-30.67	-40.28



#### 4.2.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซก

สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกแสดงดังตารางที่ 4.6 จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมของ  $E_{HOMO}$  และ  $E_{LUMO}$  พบว่าก่อนและหลังการดูดซับมีค่าแตกต่างกันอย่างชัดเจน โดยค่าแถบพลังงานของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับโมเลกุลยา มีค่าเท่ากับ 3.592 อิเล็กตรอนโวลต์ มีค่าเปอร์เซ็นต์การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน 37.74% สำหรับโครงสร้างของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมแมงกานีส เทคนิเทียมและรีเนียม สำหรับโครงสร้าง carmustine/ $Mn_N$ -zBNNT, carmustine/ $Mn_B$ -zBNNT, carmustine/ $Tc_N$ -zBNNT, carmustine/ $Tc_B$ -zBNNT, carmustine/ $Re_N$ -zBNNT และ carmustine/ $Re_B$ -zBNNT มีค่าเท่ากับ 1.225, 2.803, 1.388, 1.333, 1.252 และ 1.306 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ จากการศึกษาเปอร์เซ็นต์การเปลี่ยนแปลงค่าแถบพลังงานก่อนและหลังการดูดซับยา พบว่าโครงสร้าง carmustine/ $Mn_N$ -zBNNT, carmustine/ $Mn_B$ -zBNNT, carmustine/ $Tc_N$ -zBNNT, carmustine/ $Tc_B$ -zBNNT, carmustine/ $Re_N$ -zBNNT และ carmustine/ $Re_B$ -zBNNT มีค่าเท่ากับ 55.87, 10.75, 40.00, 15.72, 36.09 และ 17.24 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ จากข้อมูลการเปลี่ยนแปลงค่าแถบพลังงาน ดังนั้นท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมเทคนิคิเทียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนจึงการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์มากที่สุด

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน พบว่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดซิกแซกมีค่าเท่ากับ 0.028 อิเล็กตรอน แสดงว่าเป็นการถ่ายโอนประจุจากโมเลกุลยาไปยังท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และเป็นการถ่ายโอนประจุเพียงเล็กน้อย เนื่องจากเกิดอันตรกิริยาแบบอ่อนๆ นั่นเอง การถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมแมงกานีส เทคนิเทียมและรีเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่าเท่ากับ 0.161, 0.115, และ 0.200 อิเล็กตรอน ตามลำดับ และการถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมแมงกานีส เทคนิเทียมและรีเนียมตรงตำแหน่งโบรอนมีค่าเท่ากับ 0.119, 0.097, และ -0.033 อิเล็กตรอน ตามลำดับ โดยค่าการถ่ายโอนประจุเป็นบวกแสดงถึงการถ่ายโอนจากโมเลกุลยาไปยังท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ ดังนั้น โครงสร้างของ carmustine/ $Mn_N$ -zBNNT, carmustine/ $Mn_B$ -zBNNT, carmustine/ $Tc_N$ -zBNNT, carmustine/ $Tc_B$ -zBNNT และ carmustine/ $Re_N$ -zBNNT จึงเป็นการถ่ายโอนประจุจากยาไปหาท่อ และค่าการถ่ายโอนประจุเป็นลบแสดงถึงการถ่ายโอนประจุจากท่อไปยังโมเลกุลยา ดังนั้น โครงสร้าง carmustine/ $Re_B$ -zBNNT จึงเป็นการถ่ายโอนประจุจากท่อไปยังโมเลกุลยา นอกจากนี้ยังพบว่าการค่าถ่ายโอนประจุระหว่างโมเลกุลยาและท่อของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่ามากกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม แสดงถึงอันตรกิริยาที่แข็งแรงระหว่างโมเลกุลยากับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันนั่นเอง

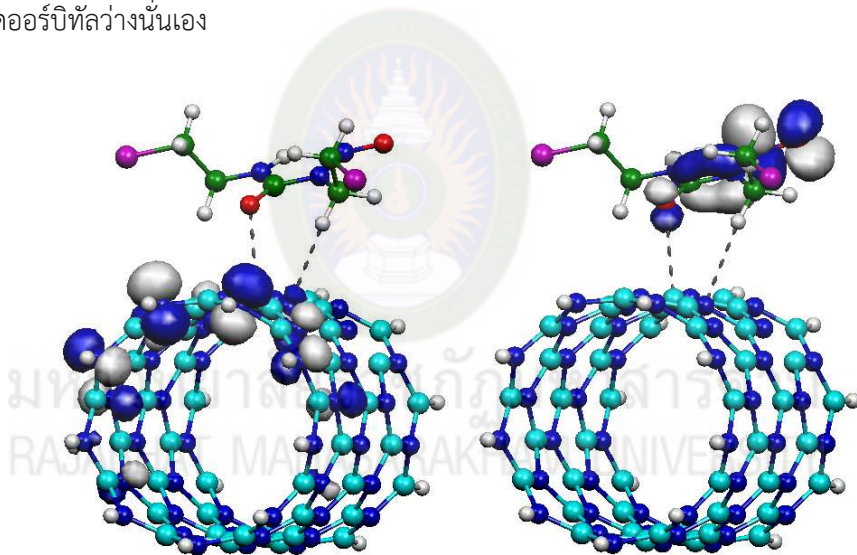


ตารางที่ 4.6 พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน เปอร์เซ็นต์การเปลี่ยนแถบพลังงานและการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

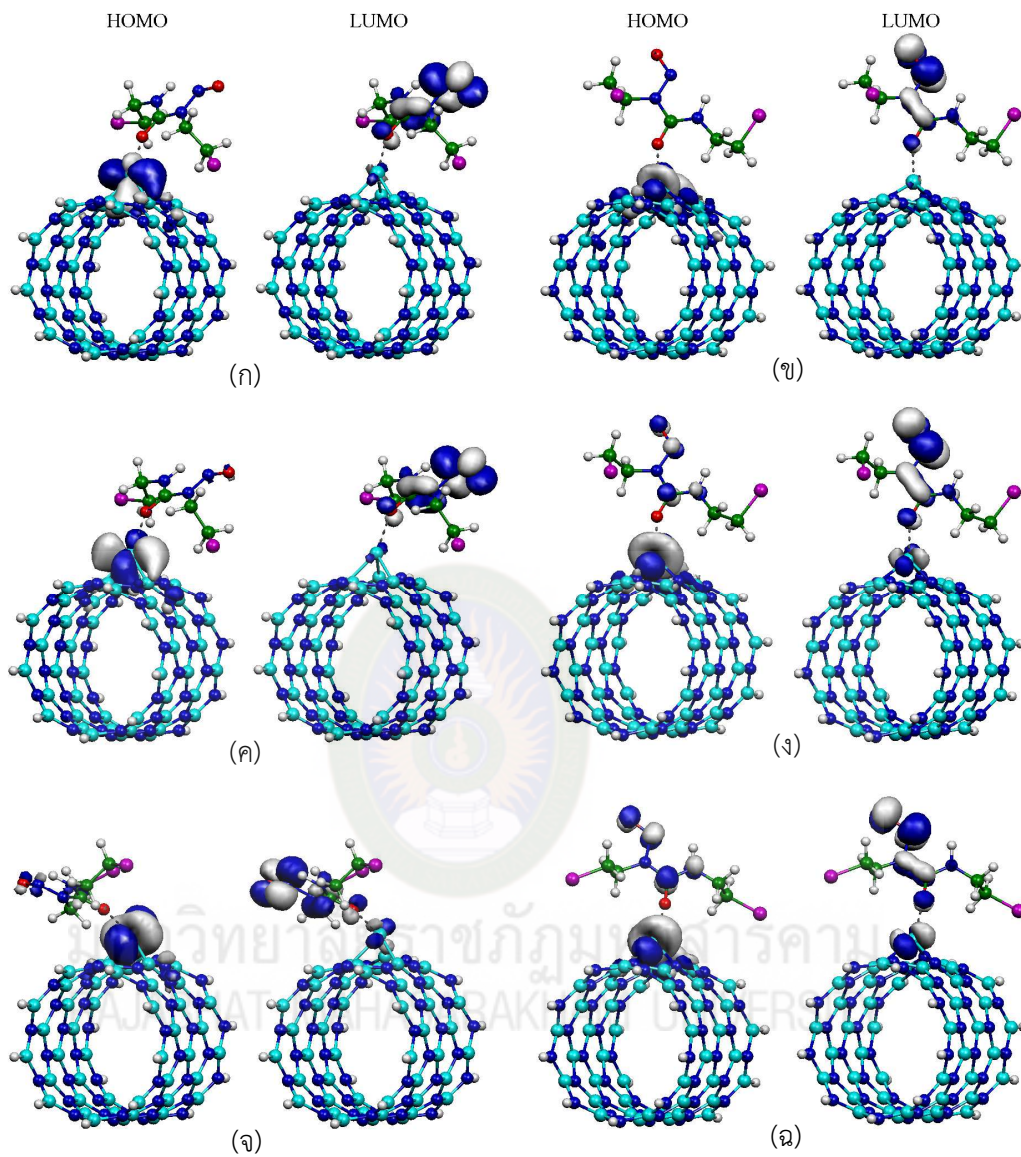
ชนิด	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)	$\Delta E_{\text{gap}}$ (eV)	$\% \Delta E_{\text{gap}}$ (%)	PCT (e)
carmustine/zBNNT	-6.694 (-6.721)*	-3.102 (-0.952)	3.592 (5.769)	2.177	37.74	0.028
carmustine/Mn <sub>N</sub> -zBNNT	-5.089 (-5.306)	-3.864 (-2.530)	1.225 (2.776)	1.551	55.87	0.161
carmustine/Mn <sub>B</sub> -zBNNT	-5.633 (-6.041)	-2.830 (-3.510)	2.803 (2.531)	0.272	10.75	0.119
carmustine/Tc <sub>N</sub> -zBNNT	-5.170 (-5.442)	-3.782 (-3.129)	1.388 (2.313)	0.925	40.00	0.115
carmustine/Tc <sub>B</sub> -zBNNT	-4.789 (-5.034)	-3.456 (-3.456)	1.333 (1.578)	0.248	15.72	0.097
carmustine/Re <sub>N</sub> -zBNNT	-5.034 (-5.578)	-3.782 (-3.619)	1.252 (1.959)	0.707	36.09	0.200
carmustine/Re <sub>B</sub> -zBNNT	-4.544 (-4.653)	-3.238 (-3.075)	1.306 (1.578)	0.272	17.24	-0.033

\* แถบพลังงานก่อนการดูดซับ

การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแสดงดังภาพที่ 4.8 และ 4.9 ตามลำดับ สำหรับโครงสร้างการดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมอธิบายได้ว่า อิเล็กตรอนของออร์บิทัล HOMO กระจายตัวอยู่รอบๆ ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ และออร์บิทัล LUMO จะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณโมเลกุลยา สำหรับโครงสร้างการดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน อธิบายได้ว่าอิเล็กตรอนของออร์บิทัล HOMO กระจายตัวอยู่รอบๆ ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและออร์บิทัล LUMO จะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณโมเลกุลยา เนื่องจากตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเสถียรทางโครงสร้างต่ำ จึงทำให้บริเวณดังกล่าวเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนซึ่งเหมาะกับการเกิดอันตรกิริยากับโมเลกุลยา จึงทำให้การดูดซับโมเลกุลยาบริเวณดังกล่าวเกิดอันตรกิริยาที่แข็งแรง ซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานการดูดซับ และการกระจายตัวของออร์บิทัล LUMO ตรงบริเวณยาเกิดขึ้นเนื่องจากระหว่างกระบวนการดูดซับเกิดการถ่ายโอนประจุจากโมเลกุลยาไปยังท่อ นาโนโบรอนไนไตรด์ทำให้บริเวณรอบๆ โมเลกุลยาเกิดออร์บิทัลว่างนั่นเอง

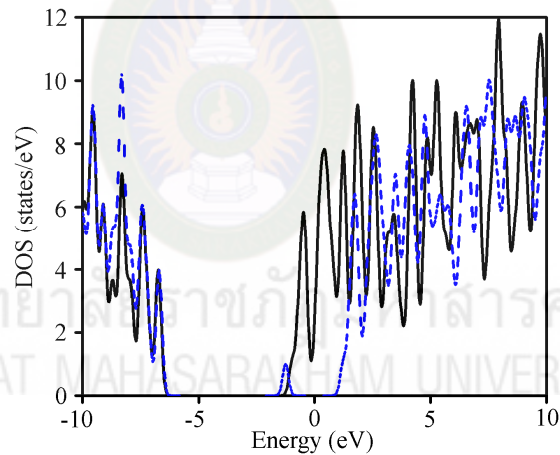


ภาพที่ 4.8 การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ดั้งเดิมชนิดซิกแซก

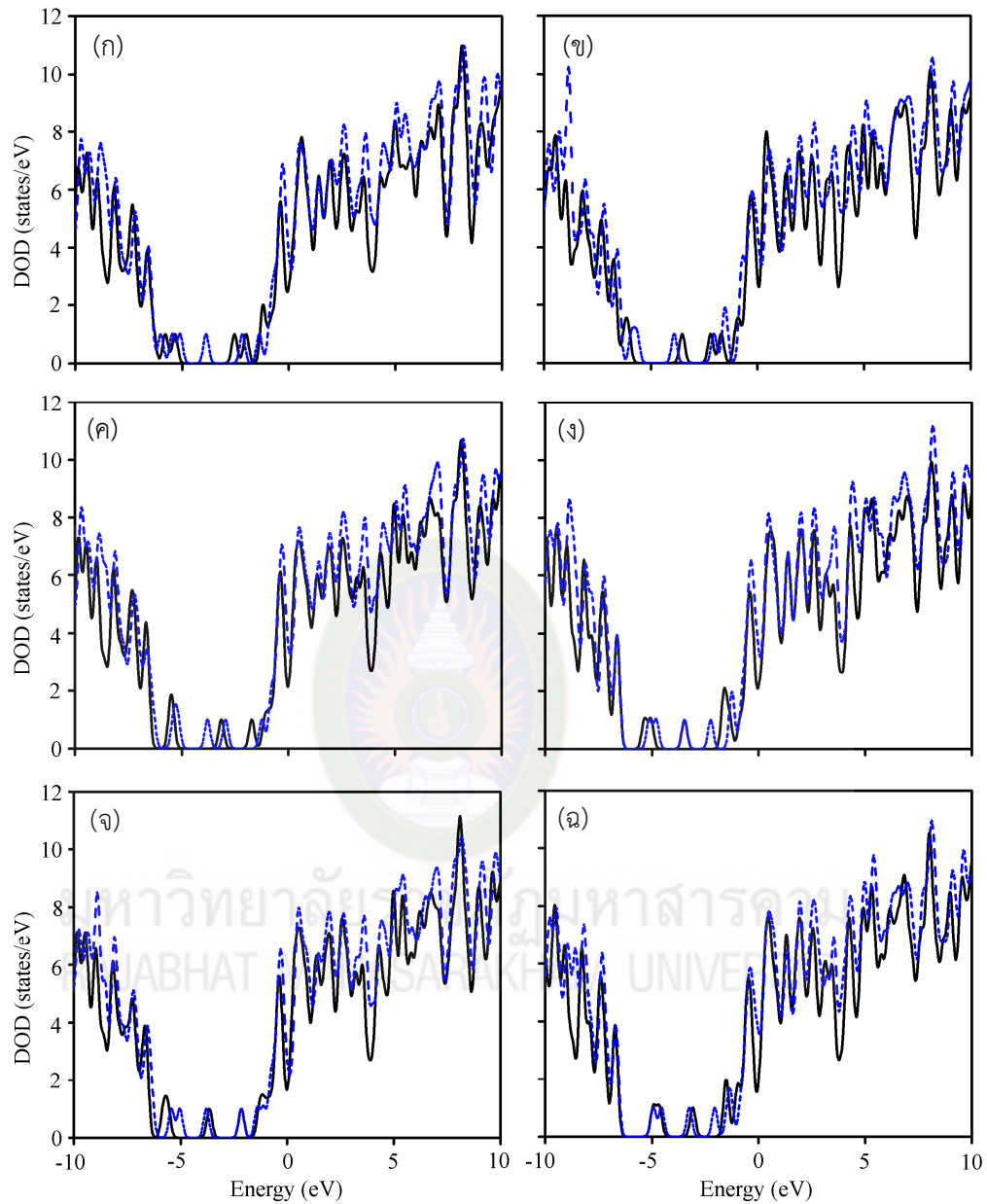


ภาพที่ 4.9 การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับคาร์มิสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (ก) carmustine/Mn<sub>N</sub>-BNNT, (ข) carmustine/Tc<sub>N</sub>-BNNT, (ค) carmustine/Re<sub>N</sub>-BNNT, (ง) carmustine/Mn<sub>B</sub>-BNNT, (จ) carmustine/Tc<sub>B</sub>-BNCNT และ (ฉ) carmustine/Re<sub>B</sub>-BNNT

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมของความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันที่มีการดูดซับคาร์มีสทิน แสดงดังภาพที่ 4.10 และ 4.11 ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมก่อนและหลังการดูดซับคาร์มีสทิน (เส้นสีดำและเส้นประสีน้ำเงิน) พบว่าความหนาแน่นสถานะเกิดการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อยในช่วงพลังงาน  $-10$  ถึง  $10$  อิเล็กตรอนโวลต์ เมื่อเปรียบเทียบความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันก่อนและหลังดูดซับคาร์มีสทิน จะเห็นว่าหลังดูดซับคาร์มีสทิน ความหนาแน่นสถานะจะเลื่อนจากตำแหน่งของก่อนการดูดซับอย่างชัดเจนทุกช่วงพลังงาน โดยเฉพาะช่วงพลังงาน  $-6$  ถึง  $-1$  อิเล็กตรอนโวลต์ มีพีกใหม่เกิดขึ้น ซึ่งเป็นความหนาแน่นสถานะของโมเลกุลนั่นเอง ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับคาร์มีสทิน มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ซึ่งสอดคล้องกับการศึกษาการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถพัฒนาเป็นตัวตรวจจับโมเลกุลยาคาร์มีสทินได้ดีกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบปกติ



ภาพที่ 4.10 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม (เส้นสีดำคือก่อนดูดซับและเส้นประสีน้ำเงินคือหลังดูดซับ)



ภาพที่ 4.11 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับยาคาร์มิสทีนบนท่อนาโนโบรอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (ก) carmustine/ $Mn_N$ -zBNN, (ข) carmustine/ $Tc_N$ -zBNN, (ค) carmustine/ $Re_N$ -zBNN, (ง) carmustine/ $Mn_B$ -zBNN, (จ) carmustine/ $Tc_B$ -zBNN และ (ฉ) carmustine/ $Re_B$ -zBNN (เส้นสีดำคือก่อนดูดซับและเส้นประสีน้ำเงินคือหลังดูดซับ)

### 4.3 การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์

#### 4.3.1 สมบัติทางโครงสร้างการดูดซับการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์

การศึกษาอันตรกิริยาระหว่างยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ (HC) บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน โดยสังเกตจากการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางโครงสร้าง โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังภาพที่ 4.12 และ 4.13 ตามลำดับ ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.7 จากภาพและตาราง พบว่าการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดซิกแซก (HC/aBNNT) มีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-N, B2-N และ B3-N มีค่าเท่ากับ 1.457, 1.453 และ 1.452 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-N-B2, B2-N-B3 และ B3-N-B1 มีค่าเท่ากับ 117.0, 117.6 และ 120.1 องศา ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-B-BN2, N2-B-N3 และ N3-B-N1 มีค่าเท่ากับ 119.1, 119.5 และ 119.6 องศา ตามลำดับ ระยะดูดซับระหว่างท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและอะตอมออกซิเจนของโมเลกุลยา มีค่าเท่ากับ 2.568 อังสตรอม และระยะดูดซับระหว่างท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุลยา มีค่าเท่ากับ 1.952 อังสตรอม การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-TM, B2-TM และ B3-TM มีค่าอยู่ระหว่าง 1.912-2.033, 1.925-2.125 และ 1.899-2.033 อังสตรอม ตามลำดับ มุมพันธะตรงตำแหน่ง B1-TM-B2, B2-TM-B3 และ B3-TM-B1 มีค่าอยู่ระหว่าง 81.0-88.6, 79.7-82.9 และ 78.7-87.5 องศา ตามลำดับ

การดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งโบรอนพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง B1-TM, B2-TM และ B3-TM มีค่าอยู่ระหว่าง 1.840-2.075, 1.861-2.071 และ 1.830-1.984 อังสตรอม ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง N1-TM-N2, N2-TM-N3 และ N3-TM-N1 มีค่าอยู่ระหว่าง 88.5-98.4, 89.8-98.9 และ 92.2-97.7 องศา ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบโครงสร้างก่อนและหลังการดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมพบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะมีการเปลี่ยนแปลงเล็กน้อย ในขณะที่การดูดซับยาคาร์มีสทินบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อเกิดการเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้างอย่างชัดเจน ซึ่งความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนการดูดซับโมเลกุลยาคำนวณด้วยวิธี DFT ที่ระดับ B3L3P โดย Sripadung และคณะ (2019) เนื่องจากโมเลกุลยาเกิดอันตรกิริยาที่แรงกับท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันนั่นเอง การศึกษาระยะดูดซับที่ใกล้ที่สุดระหว่างโมเลกุลยาและท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งอะตอมของโลหะแทรนซิชันกับอะตอมออกซิเจน (TM-O) ของโมเลกุลยาพบว่าโครงสร้าง HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 1.964, 2.216, 2.179, 1.954, 2.240, 2.204, 1.969, 2.237 และ 2.261 อังสตรอม ตามลำดับ และ



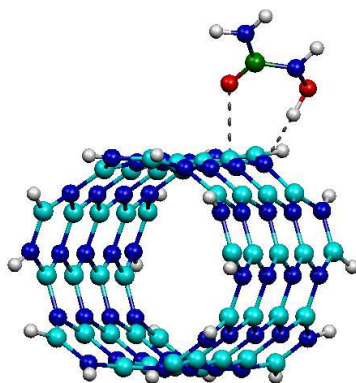
ระยะดูดซับสำหรับโครงสร้าง HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 1.973, 2.163, 2.166, 1.988, 2.239, 2.196, 1.987, 2.154 และ 2.160 อังสตรอม ตามลำดับ ระยะดูดซับระหว่างอะตอมไนโตรเจนของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแพลนทินัมและอะตอมไฮโดรเจนของโมเลกุลยา (N-H) สำหรับโครงสร้าง HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 2.766, 3.170, 3.017, 2.973, 3.066, 2.995, 3.015, 3.129 และ 3.155 อังสตรอม ตามลำดับ และระยะดูดซับสำหรับ โครงสร้าง HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 3.241, 3.325, 3.071, 2.640, 2.988, 3.438, 3.333, 2.977 และ 2.985 อังสตรอม ตามลำดับ สรุปได้ว่าระยะดูดซับระหว่างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแพลนทินัมและอะตอมออกซิเจนของโมเลกุลยาสั้นกว่าระยะดูดซับระหว่างท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและอะตอมออกซิเจนของโมเลกุลยา



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

**ตารางที่ 4.7** ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

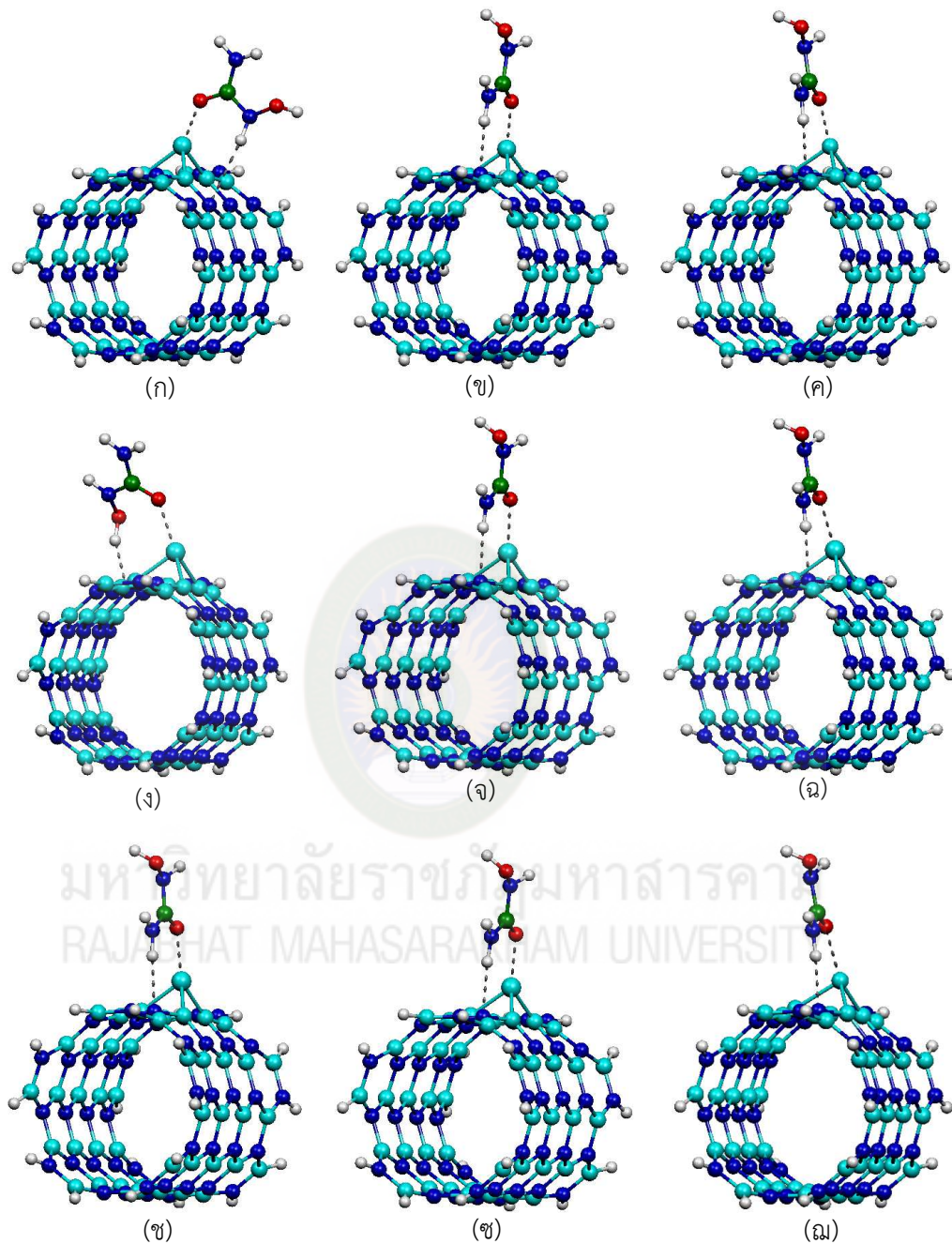
ชนิด	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)			มุมพันธะ (องศา)			ระยะดูดซับ (อังสตรอม)	
	B1 or N1-M	B2 or N2-M	B3 or N3-M	B1-M-B2 or N1-M-N2	B2-M-B3 or N2-M-N3	B3-M-B1 or N3-M-N1	TM-O	TM-H
HC/aBNNT	1.457 (B1-N)	1.453 (B2-N)	1.452 (B3-N)	117.0 (B1-N-B2) 119.1 (N1-B-N2)	117.6 (B2-N-B3) 119.5 (N2-B-N3)	120.1 (B3-N-B1) 119.6 (N3-B-N1)	2.568	1.952
HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT	1.917	1.989	1.914	81.6	81.1	83.5	1.964	2.766
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	2.033	2.014	2.031	82.0	81.96	78.7	2.216	3.170
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	2.010	2.063	2.033	81.0	78.6	82.7	2.179	3.017
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	1.863	1.925	1.866	84.0	82.4	88.7	1.954	2.973
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	1.965	2.032	1.972	82.2	80.5	86.7	2.240	3.066
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	1.971	2.042	1.983	82.8	80.5	87.5	2.204	2.995
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	1.912	1.998	1.899	88.6	82.1	83.7	1.969	3.015
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	2.018	2.125	2.007	85.3	79.7	83.8	2.237	3.129
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	1.999	2.107	2.000	87.4	82.9	86.3	2.261	3.155
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	1.840	1.861	1.830	97.9	98.9	97.8	1.973	3.241
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	1.957	1.986	1.984	90.6	91.6	92.6	2.163	3.325
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	1.995	1.989	1.965	95.6	91.5	92.6	2.166	3.071
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	1.824	1.882	1.829	98.1	97.6	97.2	1.988	2.640
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	1.959	1.990	1.972	92.6	92.0	92.20	2.239	2.988
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	1.979	2.006	1.978	88.5	91.4	93.3	2.196	3.438
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	1.917	1.920	1.835	98.4	94.6	97.0	1.987	3.333
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	2.075	2.071	1.945	95.8	89.8	92.7	2.154	2.977
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	2.073	2.066	1.958	97.6	90.6	93.1	2.160	2.985



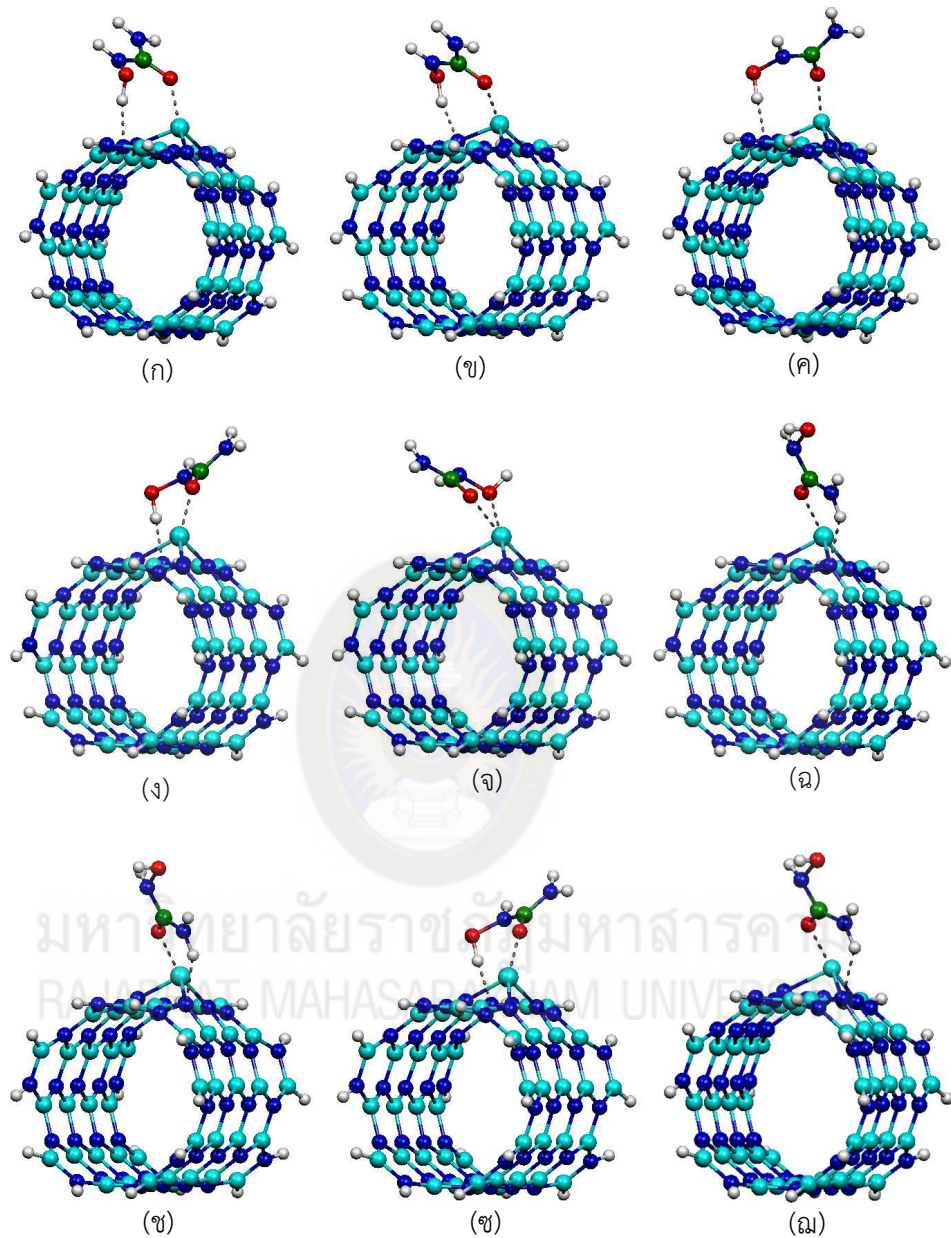
ภาพที่ 4.12 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



ภาพที่ 4.13 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจน (ก) HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT, (ข) HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT, (ค) HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT, (ง) HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT, (จ) HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT, (ฉ) HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT, (ช) HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT, (ซ) HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT และ (ฅ) HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT



ภาพที่ 4.14 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งโบรอน (ก) HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT, (ข) HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT, (ค) HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT, (ง) HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT, (จ) HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT, (ฉ) HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT, (ช) HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT, (ซ) HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT และ (ณ) HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT



#### 4.3.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์

พลังงานดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ แสดงดังตารางที่ 4.8 สำหรับการดูดซับโมเลกุลยาโดยการคำนวณในระบบแก๊สพบว่า พลังงานการดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์มีค่าเท่ากับ  $-1.38$  กิโลแคลอรีต่อโมล พลังงานการดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่าเท่ากับ  $-36.42$  (HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT),  $-21.43$  (HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT),  $-31.01$  (HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT),  $-34.65$  (HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT),  $-22.53$  (HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT),  $-26.29$  (HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT),  $-29.96$  (HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT),  $-20.86$  (HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT) และ  $-18.82$  (HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล และพลังงานการดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งโบรอนมีค่าเท่ากับ  $-32.86$  (HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT),  $-26.49$  (HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT),  $-29.65$  (HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT),  $-28.64$  (HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT),  $-22.39$  (HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT),  $-19.33$  (HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT),  $-27.06$  (HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT),  $-28.64$  (HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT) และ  $-30.42$  (HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า การเติมโลหะทรานซิชันจะเพิ่มความสามารถในการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ให้สูงขึ้นอย่างเห็นชัด นอกจากนี้ยังพบว่า สำหรับระบบ Fe<sub>N</sub>-aBNNT, Os<sub>N</sub>-aBNNT, Co<sub>N</sub>-aBNNT, Rh<sub>N</sub>-aBNNT, Ir<sub>N</sub>-aBNNT และ Ni<sub>N</sub>-aBNNT การเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนของท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์จะดูดซับโมเลกุลยาได้ดีกว่าตำแหน่งโบรอน ในขณะที่โครงสร้าง Ru<sub>B</sub>-aBNNT, Pd<sub>B</sub>-aBNNT และ Pt<sub>B</sub>-aBNNT จะพบว่าการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งโบรอนของท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์จะดูดซับโมเลกุลยาได้ดีกว่าตำแหน่งไนโตรเจน โดยท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมเหล็กตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่าพลังงานการดูดซับดีที่สุด

การดูดซับโมเลกุลยาโดยการคำนวณในระบบที่มีตัวทำละลายน้ำพบว่า พลังงานการดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์มีค่าเท่ากับ  $-0.60$  กิโลแคลอรีต่อโมล พลังงานการดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่าเท่ากับ  $-24.37$  (HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT),  $-11.99$  (HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT),  $-18.32$  (HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT),  $-24.49$  (HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT),  $-9.94$  (HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT),  $-12.37$  (HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT),  $-22.41$  (HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT),  $-13.14$  (HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT) และ  $-9.93$  (HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล และพลังงานการดูดซับของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งโบรอนในตัวทำละลายน้ำมีค่าเท่ากับ  $-20.88$  (HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT),  $-14.25$  (HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT),  $-28.91$  (HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT),  $-21.80$  (HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT),  $-14.42$  (HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT),  $-12.23$  (HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT),  $-20.44$  (HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT),  $-18.11$  (HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT) และ  $-17.42$  (HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล อธิบายได้ว่าการเติมโลหะทรานซิชันบนท่อนานาโนโบรอนไนไตรด์ช่วยปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโมเลกุลยาในตัวทำละลายน้ำได้ โดยท่อนานาโน



โบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมออสเมียมตรงตำแหน่งโบรอนมีค่าพลังงานการดูดซับในระบบตัวทำละลายน้ำได้ดีที่สุด

การศึกษาพลังงานในการละลายในตัวทำละลายน้ำของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์มีค่าเท่ากับ -22.25 กิโลแคลอรีต่อโมล พลังงานในการละลายของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนมีค่า -22.19 (HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT), -25.05 (HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT), -23.78 (HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT), -20.60 (HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT), -18.44 (HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT), -24.25 (HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT), -20.41 (HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT), -21.59 (HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT) และ -24.23 (HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล และพลังงานในการละลายของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งโบรอนมีค่าเท่ากับ -24.59 (HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT), -29.17 (HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT), -28.34 (HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT), -26.16 (HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT), -29.61 (HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT), -35.16 (HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT), -25.39 (HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT), -26.06 (HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT) และ -29.76 (HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล จากข้อมูลพลังงานในการละลายสรุปได้ว่า การเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งโบรอนจะเพิ่มความสามารถในการละลายของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์อย่างเห็นชัด สำหรับการเติมรูทีเดียม ออสเมียม อิริเดียมและแพลทินัมตรงตำแหน่งไนโตรเจนจะเพิ่มความสามารถในการละลายของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์อย่างเห็นชัดเช่นกัน ยกเว้นกรณีของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมเหล็ก โคบอลต์ โรเดียม นิกเกิลและแพลลาเดียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนทำให้ความสามารถในการละลายลดลง

**ตารางที่ 4.8** พลังงานการดูดซับในระบบแก๊สและตัวทำละลายของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{ads}$ (แก๊ส) (กิโลแคลอรีต่อโมล)	$E_{ads}$ (ตัวทำละลาย) (กิโลแคลอรีต่อโมล)	$E_{sol}$ (กิโลแคลอรีต่อโมล)
HC/aBNNT	-1.38	-0.60	-22.25
HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT	-36.42	-24.37	-22.19
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	-21.43	-11.99	-25.05
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	-31.01	-18.32	-23.78
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	-34.65	-24.49	-20.60
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	-22.53	-9.94	-18.44
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	-26.29	-12.37	-24.25
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	-29.96	-22.41	-20.41
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	-20.86	-13.14	-21.59
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	-18.82	-9.93	-24.23
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	-32.86	-20.88	-24.59
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	-26.49	-14.25	-29.17
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	-29.65	-28.91	-28.34
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	-28.64	-21.80	-26.16
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	-22.39	-14.42	-29.61
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	-19.33	-12.23	-35.16
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	-27.06	-20.44	-25.39
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	-28.64	-18.11	-26.06
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	-30.42	-17.42	-29.76

#### 4.3.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์

พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแถบพลังงานและการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.9 จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของ  $E_{HOMO}$  และ  $E_{LUMO}$  ของท่อนาโน

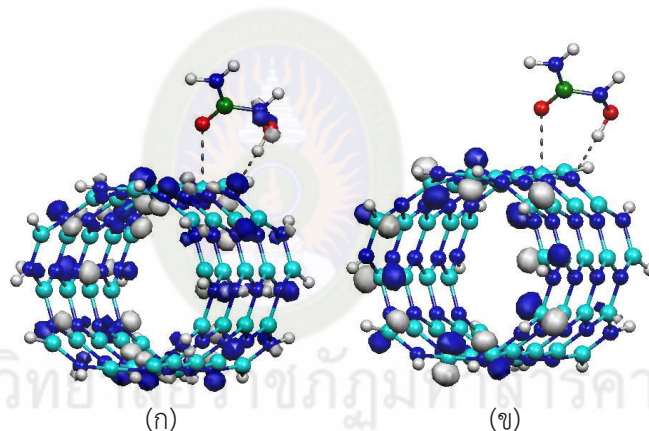
โบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับโมเลกุลยามีค่าเท่ากับ -6.531 และ -0.517 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ พบว่าแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 6.014 อิเล็กตรอนโวลต์ Sripadung และคณะ (2019) ได้รายงานค่า  $E_{\text{HOMO}}$  และ  $E_{\text{LUMO}}$  ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมชนิดอาร์มแชร์ซึ่งมีค่าเท่ากับ -6.612 และ -0.599 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ พบว่าแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 6.014 อิเล็กตรอนโวลต์ เมื่อเปรียบเทียบแถบพลังงานของท่อก่อนและหลังดูดซับโมเลกุลยาพบว่าแถบพลังงานไม่มีการเปลี่ยนแปลง ดังนั้นท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมจึงไม่เหมาะที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจจับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ ในขณะที่การดูดซับโมเลกุลยาทำให้  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $E_{\text{LUMO}}$  และแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน (ยกเว้นโครงสร้าง HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT ไม่มีการเปลี่ยนแปลงค่าแถบพลังงาน) โดยพบว่ามีการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของโครงสร้าง HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 0.680, 0.191, 0.218, 0.354, 0.408, 0.136, 0.081 และ 0.054 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ และการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของโครงสร้าง HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 0.326, 0.626, 0.463, 0.001, 0.381, 0.190, 0.599 และ 0.571 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเหมาะสมที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจจับโมเลกุลยา

การศึกษาศาสตร์ทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน แสดงในตารางที่ 4.9 พบว่ามีการถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมเพียง 0.041 อิเล็กตรอน ในขณะที่การถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งไนโตรเจนสำหรับโครงสร้าง HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 0.218, 0.219, 0.190, 0.210, 0.144, 0.173, 0.172, 0.131 และ 0.139 อิเล็กตรอน ตามลำดับ และการถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งโบรอนสำหรับโครงสร้าง HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT, HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT และ HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT มีค่าเท่ากับ 0.205, 0.163, 0.215, 0.177, 0.283, 0.153, 0.163, 0.187 และ 0.210 อิเล็กตรอน ตามลำดับ แสดงให้เห็นถึงการถ่ายโอนอิเล็กตรอนจากโมเลกุลยาไปยังท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และการถ่ายโอนประจุระหว่างโมเลกุลยากับท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่ามากกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม เนื่องจากเกิดอันตรกิริยาที่แรงกว่านั่นเอง

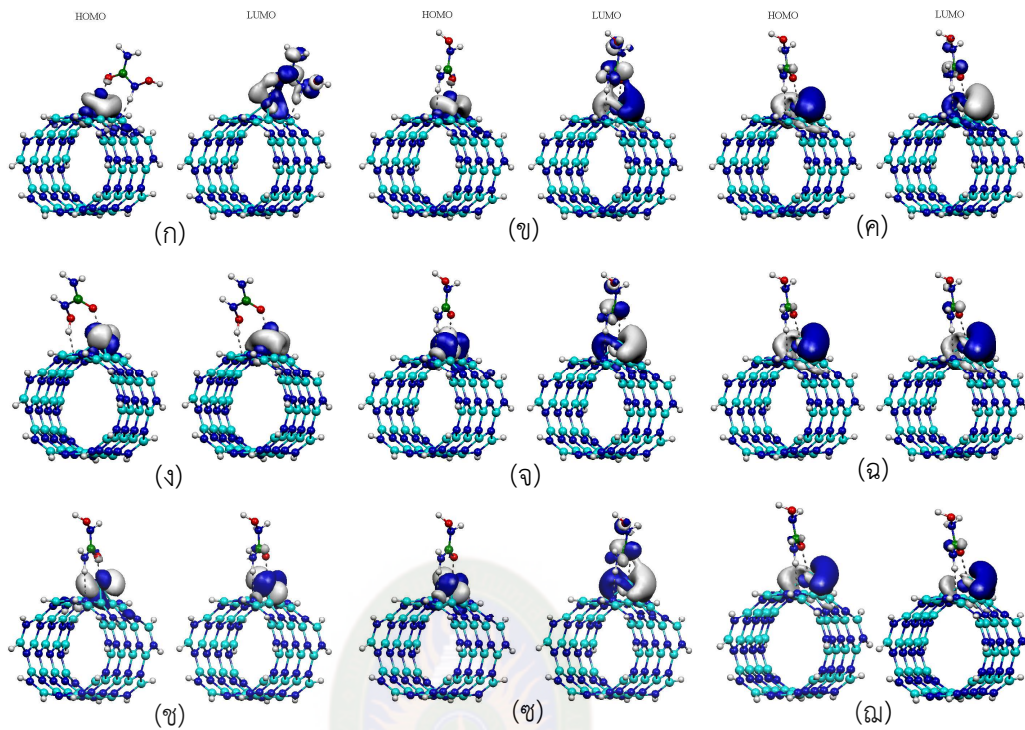
**ตารางที่ 4.9** พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแถบพลังงานและการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{\text{HOMO}}$ (อิเล็กตรอนโวลต์)	$E_{\text{LUMO}}$ (อิเล็กตรอนโวลต์)	$E_{\text{gap}}$ (อิเล็กตรอนโวลต์)	$\Delta E_{\text{gap}}$	PCT (อิเล็กตรอน)
HC/aBNNT	-6.531	-0.517	6.014	0.000	0.041
HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT	-5.878	-2.231	3.646	-0.680	0.218
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	-5.252	-2.395	2.857	-0.191	0.219
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	-4.789	-2.259	2.531	0.000	0.190
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	-6.204	-2.748	3.456	-0.218	0.210
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	-5.524	-2.123	3.402	-0.354	0.144
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	-5.116	-2.123	2.993	-0.408	0.173
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	-5.987	-4.027	1.959	0.136	0.172
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	-5.606	-3.102	2.504	-0.081	0.131
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	-5.197	-2.748	2.449	0.054	0.139
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	-4.680	-1.088	3.592	-0.326	0.205
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	-5.334	-2.123	3.211	-0.626	0.163
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	-5.225	-2.531	2.694	-0.463	0.215
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	-5.415	-1.225	4.191	0.000	0.177
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	-5.769	-1.007	4.762	-0.001	0.283
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	-5.742	-1.252	4.490	0.381	0.153
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	-3.483	-1.497	1.986	-0.190	0.163
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	-3.129	-1.415	1.714	-0.599	0.187
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	-3.129	-1.469	1.660	-0.571	0.210

การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.15 จากรูปอธิบายได้ว่าทั้งออร์บิทัล HOMO และ LUMO จะกระจายตัวอยู่รอบๆ ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ เนื่องจากท่อนาโนคาร์บอนประกอบด้วยอะตอมโบรอนและไนโตรเจนและสร้างพันธะแบบโคออร์ดิเนตโคเวเลนต์ อิเล็กตรอนจึงเคลื่อนที่อยู่รอบๆ อะตอมโบรอนและไนโตรเจนทุกอะตอม ไม่มีการเคลื่อนของอิเล็กตรอนระหว่างโมเลกุลยาและท่อ ในขณะที่การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแพรรนซิซัน (แสดงดังภาพที่ 4.16 และ 4.17) อธิบายได้ว่าอิเล็กตรอนกระจายตัวอยู่รอบๆ ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแพรรนซิซันและโมเลกุลยา เนื่องจากตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแพรรนซิซันมีความเสถียรทางโครงสร้างต่ำ จึงเกิดการเคลื่อนของอิเล็กตรอนตรงบริเวณนั้น ส่วนการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนตรงบริเวณโมเลกุลยาเนื่องจากเกิดการถ่ายโอนประจุระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์นั่นเอง ซึ่งแสดงถึงการเกิดอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์

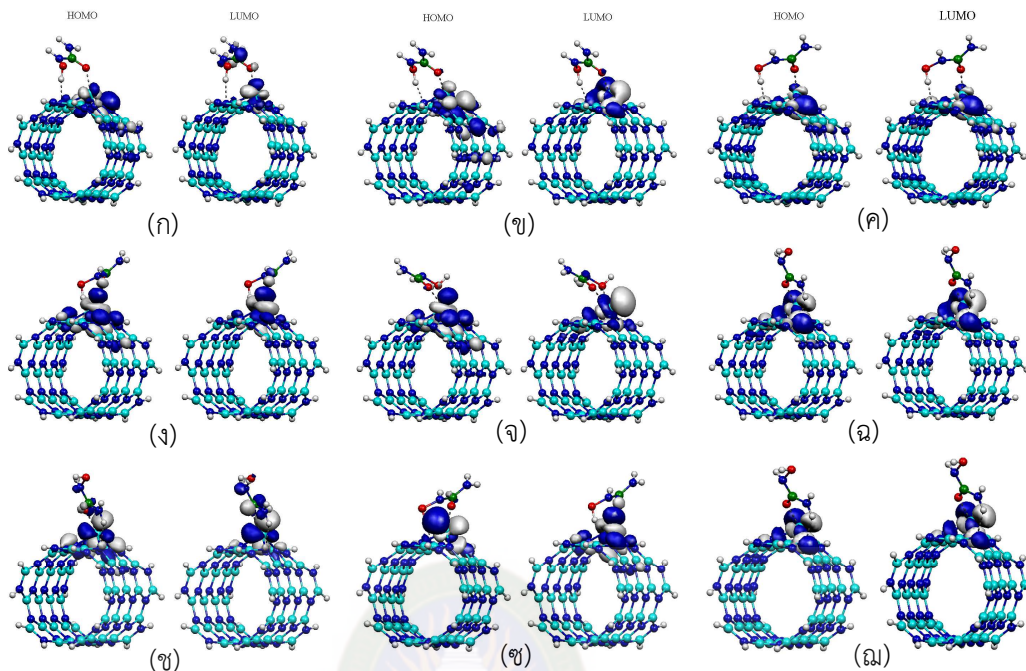


ภาพที่ 4.15 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล (ก) HOMO และ (ข) LUMO ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม



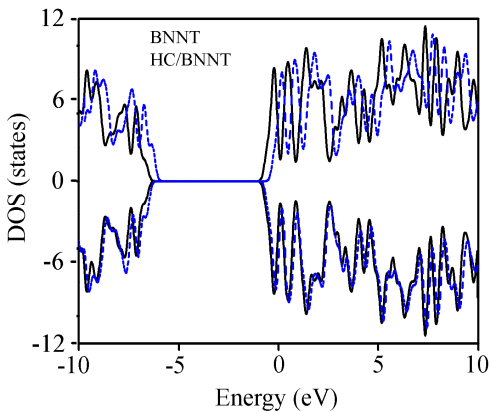
ภาพที่ 4.16 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (ก) HC/Fe<sub>N</sub>-aBNNT, (ข) HC/Co<sub>N</sub>-aBNNT, (ค) HC/Ni<sub>N</sub>-aBNNT, (ง) HC/Ru<sub>N</sub>-aBNNT (จ) HC/Rh<sub>N</sub>-aBNNT, (ฉ) HC/Pd<sub>N</sub>-aBNNT, (ช) HC/Os<sub>N</sub>-aBNNT, (ซ) HC/Ir<sub>N</sub>-aBNNT และ (ฅ) HC/Pt<sub>N</sub>-aBNNT



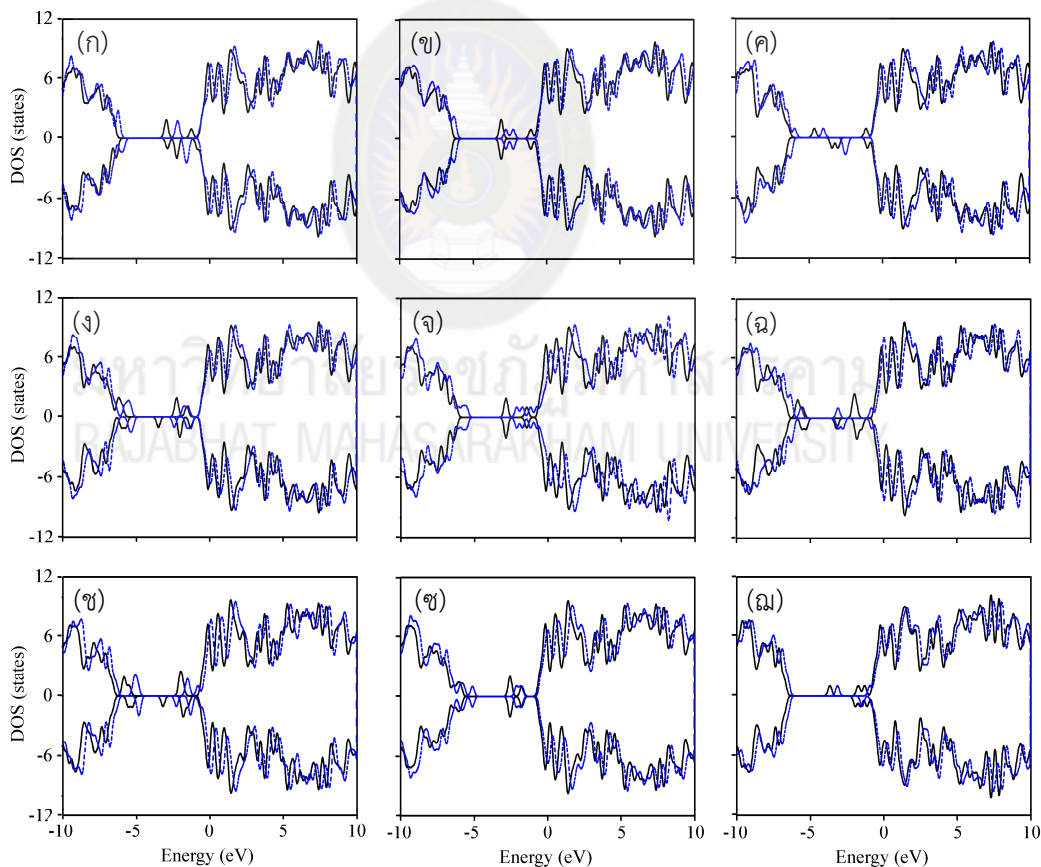


ภาพที่ 4.17 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ (ก) HC/Fe<sub>B</sub>-aBNNT, (ข) HC/Co<sub>B</sub>-aBNNT, (ค) HC/Ni<sub>B</sub>-aBNNT, (ง) HC/Ru<sub>B</sub>-aBNNT, (จ) HC/Rh<sub>B</sub>-aBNNT, (ฉ) HC/Pd<sub>B</sub>-aBNNT, (ช) HC/Os<sub>B</sub>-aBNNT, (ซ) HC/Ir<sub>B</sub>-aBNNT และ (ณ) HC/Pt<sub>B</sub>-aBNNT

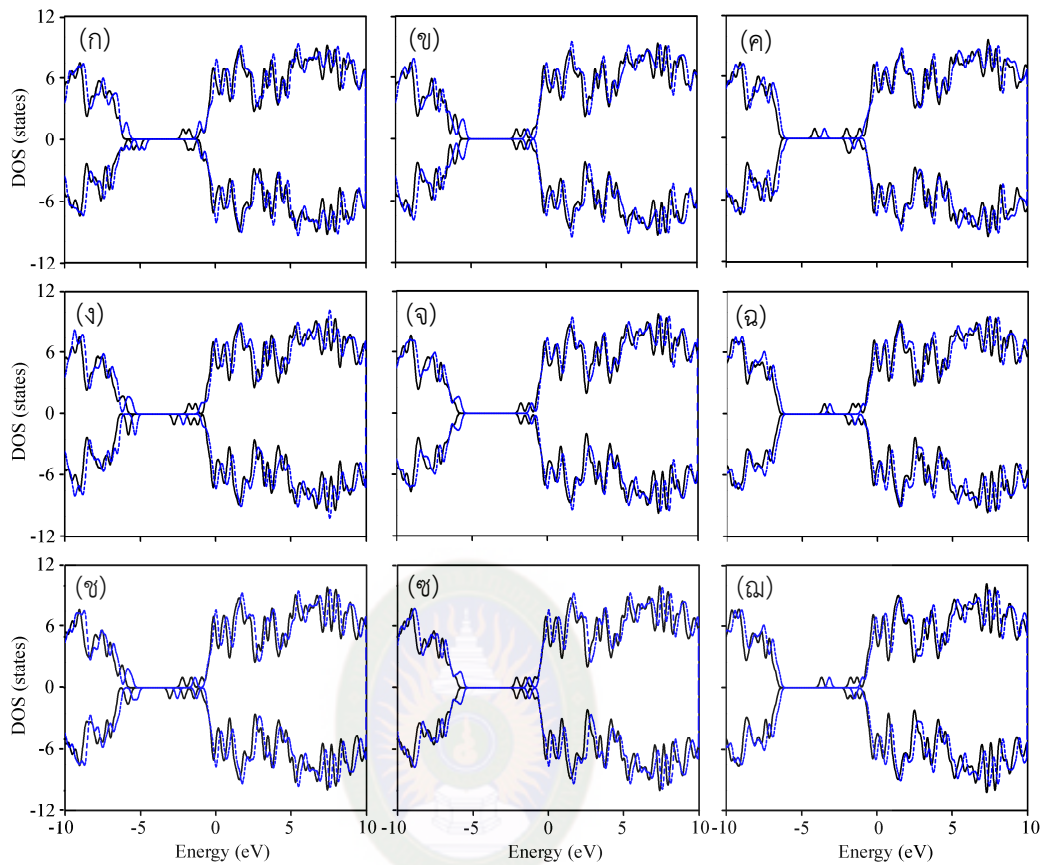
ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะของโครงสร้างก่อนและหลังดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังภาพที่ 4.18 - 4.20 จากภาพแสดงให้เห็นว่าการดูดซับโมเลกุลยาส่งผลให้ความหนาแน่นสถานะในช่วง 0 ถึง 12 (spin up) ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน ในขณะที่ความหนาแน่นสถานะในช่วง 0 ถึง -12 (spin down) ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเกิดการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย ในขณะที่การดูดซับแก๊สโมเลกุลยาบนท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่าความหนาแน่นสถานะจะเลื่อนจากตำแหน่งเดิมอย่างชัดเจนทุกช่วงพลังงาน และในช่วงพลังงาน 0 ถึง -7 อิเล็กตรอนโวลต์ มีฟีกใหม่เกิดขึ้น (เส้นประสีน้ำเงิน) ซึ่งเป็นฟีกของโมเลกุลยาที่ดูดซับบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ อธิบายได้ว่าการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ส่งผลให้สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน ซึ่งสอดคล้องกับการศึกษาการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถพัฒนาเป็นตัวตรวจจบบยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ได้ดีกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม



ภาพที่ 4.18 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม (เส้นสีดำคือก่อนดูดซับและเส้นประสีน้ำเงินคือหลังดูดซับ)



ภาพที่ 4.19 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (ก) HC/Fe<sub>N</sub>-BNNT, (ข) HC/Co<sub>N</sub>-BNNT, (ค) HC/Ni<sub>N</sub>-BNNT, (ง) HC/Ru<sub>N</sub>-BNNT, (จ) HC/Rh<sub>N</sub>-BNNT, (ฉ) HC/Pd<sub>N</sub>-BNNT, (ช) HC/Os<sub>N</sub>-BNNT, (ซ) HC/Ir<sub>N</sub>-BNNT และ (ม) HC/Pt<sub>N</sub>-BNNT (เส้นสีดำคือก่อนดูดซับและเส้นประสีน้ำเงินคือหลังดูดซับ)



ภาพที่ 4.20 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (ก) HC/Fe<sub>B</sub>-BNNT, (ข) HC/Co<sub>B</sub>-BNNT, (ค) HC/Ni<sub>B</sub>-BNNT, (ง) HC/Ru<sub>B</sub>-BNNT, (จ) HC/Rh<sub>B</sub>-BNNT, (ฉ) HC/Pd<sub>B</sub>-BNNT, (ช) HC/Os<sub>B</sub>-BNNT, (ซ) HC/Ir<sub>B</sub>-BNNT และ (ณ) HC/Pt<sub>B</sub>-BNNT (เส้นสีดำคือก่อนดูดซับและเส้นประสีน้ำเงินคือหลังดูดซับ)

## บทที่ 5

### สรุปผลการดำเนินวิจัย

ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงาน พลังงานในการละลายและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มัสทีนและไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ของทฤษฎี จากผลการคำนวณสามารถสรุปข้อๆ ได้ดังนี้

#### 5.1 สมบัติทางโครงสร้าง

จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมชนิด (5,5) อาร์มแชร์และ (10,0) ซิกแซกและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งที่มีการดูดซับโมเลกุลยา พบว่าการดูดซับโมเลกุลยา มีผลต่อความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมเพียงเล็กน้อย ในขณะที่การดูดซับโมเลกุลยา มีผลต่อความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันอย่างชัดเจนคือทำให้ความยาวพันธะตรงตำแหน่งที่มีการดูดซับโมเลกุลยา ยาวขึ้น (บางโครงสร้างความยาวพันธะสั้นลง) และมุมพันธะตรงตำแหน่งที่มีการดูดซับโมเลกุลยา แคบลง (บางโครงสร้างมุมพันธะกว้างขึ้น) เนื่องจากเกิดอันตรกิริยาที่แรงระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน จากการศึกษาระยะดูดซับระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม พบว่ามีค่าระยะดูดซับมากกว่าการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงให้เห็นว่าการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดอันตรกิริยาที่แข็งแกร่งกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและการดูดซับโมเลกุลยาไม่ส่งผลให้โครงสร้างของยาเกิดการเปลี่ยนแปลง

#### 5.2 พลังงานการดูดซับและพลังงานในการละลาย

การศึกษาพลังงานการดูดซับและพลังงานในการละลายของการดูดซับโมเลกุลยาทั้ง 3 ชนิด สรุปได้ดังนี้ การดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มัสทีนและไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมในระบบแก๊สพบว่าพลังงานการดูดซับมีค่าน้อย แสดงให้เห็นว่าเกิดอันตรกิริยาแบบอ่อนๆ ระหว่างโมเลกุลยาและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม ในขณะที่การดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าพลังงานการดูดซับที่สูงกว่าท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมอย่างชัดเจน แสดงให้เห็นว่าการเติมโลหะแทรนซิชันช่วยปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนาโนโบรอนคาร์ไบด์ได้ โดยท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมไทเทเนียมตรงตำแหน่งไนโตรเจนสามารถดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิลได้ดีที่สุด ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดซิกแซกที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งโบรอนสามารถดูดซับโมเลกุลยา คาร์มัสทีนได้ดีที่สุดและท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ชนิดอาร์มแชร์ที่มีการเติมเหล็กตรงตำแหน่งไนโตรเจนสามารถดูดซับโมเลกุลยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ได้ดีที่สุด

การศึกษาพลังงานการดูดซับของการดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มีสทีนและไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมในระบบตัวทำละลายน้ำมีค่าเท่ากับ -2.58 (5FU/aBNNT), -3.48 (5FU/zBNNT), -1.82 (carmustine/zBNNT) และ -1.38 (HC/aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล แสดงให้เห็นการเกิดอันตรกิริยาแบบอ่อนๆ ระหว่างโมเลกุลยาและท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม สำหรับพลังงานการดูดซับของการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่าพลังงานการดูดซับมีค่าสูงกว่าท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมอย่างชัดเจน แสดงให้เห็นว่าเกิดอันตรกิริยาที่แข็งแรงระหว่างโมเลกุลยาและท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานในการละลายของการดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิล คาร์มีสทีนและไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ -23.07 (5FU/aBNNT), -32.86 (5FU/zBNNT), -0.33 (carmustine/zBNNT) และ -22.25 (HC/aBNNT) กิโลแคลอรีต่อโมล ในขณะที่พลังงานในการละลายการดูดซับโมเลกุลยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าอยู่ในช่วง -42.73 ถึง -17.35 กิโลแคลอรีต่อโมล และส่วนใหญ่การดูดซับ 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถละลายได้ดีขึ้น การดูดซับโมเลกุลยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน มีค่าพลังงานในการละลายอยู่ในช่วง -40.28 ถึง -31.93 กิโลแคลอรีต่อโมล พบว่าทุกโครงสร้างของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถละลายได้ดีขึ้น และพลังงานในการละลายของการดูดซับโมเลกุลยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์ที่บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าอยู่ในช่วง -35.16 ถึง -18.44 กิโลแคลอรีต่อโมล โดยที่ส่วนใหญ่การดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถละลายได้ดีขึ้น จึงสรุปได้ว่าการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถปรับปรุงความสามารถในการละลายในตัวทำละลายน้ำได้

### 5.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันที่มีการดูดซับโมเลกุลยาในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แฉบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแฉบพลังงาน การถ่ายโอนประจุ การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และการกระจายตัวของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และความหนาแน่นสถานะ พบว่าการดูดซับโมเลกุลยาทำให้พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนานาโบรอนไนไตรด์มีค่าพลังงานที่เปลี่ยนไปจากเดิม การดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทำให้แฉบพลังงานของท่อนานาโบรอนไนไตรด์เปลี่ยนแปลงจากเดิมมากกว่าท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม การวิเคราะห์การถ่ายโอนประจุพบว่าเกิดการถ่ายโอนประจุจากโมเลกุลยาไปยังท่อนานาโบรอนไนไตรด์ โดยโมเลกุลยาจะถ่ายโอนประจุไปยังท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมากกว่าท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม การศึกษาการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงที่สุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และการกระจายของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำที่สุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่พบว่าโครงสร้างของการดูดซับยาบนท่อนานาโบรอน



ไนไตรด์แบบปกติ โดยส่วนใหญ่ออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงที่สุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่รอบๆ ท่อนานาโบรอนไนไตรด์ สำหรับท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่รอบๆ บริเวณที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน สำหรับออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่จะเคลื่อนที่อยู่รอบๆ โมเลกุลยา การศึกษาความหนาแน่นสถานะพบว่าการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทำให้ความหนาแน่นสถานะเกิดการเปลี่ยนแปลงที่ชัดเจนกว่าท่อนานาโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิม อีกทั้งการดูดซับโมเลกุลยาบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันยังมีฟีกใหม่เกิดขึ้น ซึ่งแสดงให้เห็นว่าการดูดซับโมเลกุลยามีผลต่อสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนานาโบรอนไนไตรด์

จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างอธิบายได้ว่า การเติมโลหะแทรนซิชันทำให้เกิดโครงสร้างที่เหมาะสมสำหรับการดูดซับโมเลกุลยาเนื่องจากโครงสร้างจะมีลักษณะสูงขึ้น ซึ่งเป็นการเพิ่มพื้นที่ผิวในการดูดซับและเกิดการดูดซับในระยะที่เหมาะสมโดยเป็นการดูดซับด้วยแรงแวนเดอร์วาลส์ สมบัติทางพลังงานแสดงให้เห็นว่าการเติมโลหะแทรนซิชันช่วยปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโมเลกุลยาอย่างชัดเจน ซึ่งเป็นกระบวนการดูดซับแบบคายพลังงาน และการเติมโลหะแทรนซิชันช่วยปรับปรุงความสามารถในการละลายในตัวทำละลายน้ำ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์แสดงให้เห็นการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุ การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนและการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นสถานะซึ่งเกิดจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลยาและท่อนานาโบรอนไนไตรด์ ส่งผลต่อการปรับเปลี่ยนสมบัติอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนานาโบรอนไนไตรด์ ดังนั้นงานวิจัยชิ้นนี้จึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนานาโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเหมาะสำหรับเป็นวัสดุกักเก็บและตรวจจับโมเลกุลยาได้ เพื่อการพัฒนาเป็นวัสดุระดับนาโนสำหรับนำส่งยาไปยังอวัยวะเป้าหมายในอนาคต

#### 5.4 ข้อเสนอแนะ

- ควรศึกษาการดูดซับโมเลกุลยาชนิดอื่นและเติมอะตอมของธาตุชนิดอื่นบนท่อนานาโบรอนไนไตรด์เพื่อเปรียบเทียบความสามารถในการดูดซับ
- ควรศึกษาสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์เพื่ออธิบายกระบวนการเกิดเองได้หรือเกิดเองไม่ได้ของปฏิกิริยา รวมถึงอธิบายผลของอุณหภูมิที่มีผลต่อความสามารถในการละลาย



## บรรณานุกรม

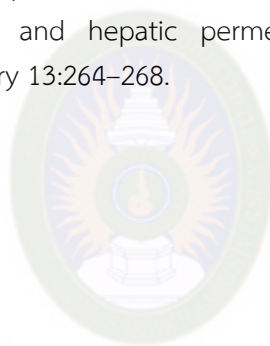
- คัชรินทร์ ศิริวงศ์. (2550). วารสารวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น. 35:28.
- จู่ไรรัตน์ นันทานิช. (2545). เกสซ์บรรจุมัณฑ. ภาควิชาเทคโนโลยีเกษตรกรรม คณะเกษตรศาสตร์ นครปฐม.
- ธีระพงศ์ พวงมะลิ. (2556). การนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโนแม่เหล็ก: กระสุนจิ๋วพิชิตมะเร็ง. วารสารวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น. 41(3):607-620.
- บรรจบ วันโน. (2013). วารสารวิชาการเทคโนโลยีอุตสาหกรรม. การประยุกต์ใช้  
ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นสำหรับเคมีซูพราโมเลกุลาร์และวัสดุนาโน. 9:123-132.
- ประยูรศักดิ์ เปลื้องผล. (2557). ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่นกับการศึกษาโครงสร้างของสาร  
ควมแน่น. วารสารวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี 22(1):137-145.
- วสุ ศุภรัตน์สิทธิ. (2556). ยาด้านมะเร็ง. มหาวิทยาลัยมหิดล. กรุงเทพฯ:  
ศูนย์นาโนเทคโนโลยีแห่งชาติ. นาโนเทคโนโลยี. (ออนไลน์). สืบค้นจาก:  
<https://www2.nanotec.or.th/th/> [1 มิถุนายน 2562]
- สุพัตรา ผ่องใส, ยาเม็ดกับรูปแบบที่แตกต่างกัน. มหาวิทยาลัยมหิดล. (ออนไลน์). สืบค้นจาก :  
<https://www.pharmacy.mahidol.ac.th/th> (013-2015) [19 กรกฎาคม 2562]
- ศุภกร ภู่เกิด, อุดม ทิพรราชและทิพวรรณ สายพิณ. (2549). วัสดุนาโน. วารสารวิชาการ ม.อบ.  
1(8):27-40.
- หาหมอ. แหล่งรวมข้อมูลสุขภาพ โรงพยาบาลและแพทย์. (ออนไลน์)  
สืบค้นจาก <http://haamor.com/th> (2011-2012) [1 สิงหาคม 2562]
- Baei MT, Sayyed-Alangi SZ, Soltani A, Bahari M & Masoodi A. (2011). Adsorption properties of OCN radical on (6,0), (8,0), and (10,0) zigzag single-walled carbon nanotubes: a density functional study. Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly 142:1-4.
- Becke AD. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior, Physics Review A 38:3098-3100.
- Becke AD. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange, Journal of Chemical Physics 98:5648-5652
- Boys SF. (1950). Electronic wave functions - I. A general method of calculation for the stationary states of any molecular system. Proceeding of the Royal Society London A 200:542-554.
- Chopra NG, Luyken RJ, Cherrey K, Crespi VH, Cohen ML, Louie SG & Zettl A. (1995). Boron nitride nanotubes. Science 269(5226): 966-967.
- Chopra NG & Zettl A. (1998). Measurement of the elastic modulus of a multiwall boron nitride nanotube. Solid State Communications 105:297-300.
- Ciofani G. (2010). Potential applications of boron nitride nanotubes as drug delivery systems. Expert Opinion on Drug Delivery 7:889-893.

- Corotet C, Petry KG, Trivedi R, Saleh A, Jonkmanns C, Le Bas JF, Blezer E, Rausch M, Brochet B, Foster-Gareau P, Baleriaux D, Gaillard S & Dousset V. (2004). Macrophage imaging in central nervous system and in carotid atherosclerotic plaque using ultrasmall superparamagnetic iron oxide in magnetic resonance imaging. *Investigative Radiology* 39:619–625.
- Duclaux L, Nysten B, Issi JP & Moore AW. (1992). Structural and low-temperature thermal conductivity of pyrolytic boron nitride. *Physical Review B* 46:3362-3367.
- Dolati S, Fereidoon A & Reza Kashyzadeh K. (2012). A comparison study between boron nitride nanotubes and carbon nanotubes. *International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering* 2:470-473.
- Eriksson MA, T Härd, & Nilsson L. (1995). Molecular dynamics simulations of the glucocorticoid receptor DNA-binding domain in complex with DNA and free in solution. *Biophysical Journal*. 68:402-426.
- Farmanzadeh D & Rezainejad H. (2016). Adsorption of diazinon and hinosan molecules on the iron-doped boron nitride nanotubes surface in gas phase and aqueous solution: A computational study. *Applied Surface Science* 364:862-869.
- Ferrari M. (2005). Cancer nanotechnology: opportunities and challenges. *Natural Reviews Cancer* 5:161–171.
- Flükiger P, Lüthi HP & Portmann S. (2000). MOLEKEL 4.3. Manno: Swiss center for scientific computing.
- Frisch MJ, Trucks, GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, Montgomery JA, Vreven T, Kudin KN, Burant JC, Millam JM, Iyengar SS, Tomasi J, Barone V, Mennucci B, Cossi M, Scalmani G, Rega N, Petersson GA, Nakatsuji H, Hada M, Ehara M, Toyota K, Fukuda R, Hasegawa J, Ishida M, Nakajima T, Honda Y, Kitao O, Nakai H, Klene M, Li X, Knox JE, Hratchian HP, Cross JB, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann RE, Yazyev O, Austin AJ, Cammi R, Pomelli C, Ochterski JW, Ayala PY, Morokuma K, Voth GA, Salvador P, Dannenberg JJ, Zakrzewski VG, Dapprich S, Daniels AD, Strain MC, Farkas O, Malick DK, Rabuck AD, Raghavachari K, Foresman JB, Ortiz JV, Cui Q, Baboul AG, Clifford S, Cioslowski J, Stefanov BB, Liu G, Liashenko A, Piskorz P, Komaromi I, Martin RL, Fox DJ, Keith T, Al-Laham MA, Peng CY, Nanayakkara A, Challacombe M, Gill PMW, Johnson B, Chen W, Wong MW, Gonzalez C & Pople JA. (2008). GAUSSIAN 09, Revision A.02. Gaussian Inc: Wallingford CT
- Gogotsi Y. (2006). Carbon nanomaterials. Boca Raton: Taylor and Francis Group, LLC.
- Hariharan PC, Pople JA. (1972). The effect of d-functions on molecular orbital energies for hydrocarbons. *Chemical Physics Letters* 16(2):217-219.

- Hay PJ & Wadt WR. (1985). *Ab initio* effective core potentials for molecular calculations. Potentials for K to Au including the outermost core orbitals. *Journal of Chemical Physics* 82:299–310.
- Hay PJ & Wadt WR. (1985). *Ab initio* effective core potentials for molecular calculations. Potentials for the transition metal atoms Sc to Hg. *Journal of Chemical Physics* 82:270–283.
- Hazrati MK, Javanshir Z, Bagheri Z. (2017). B<sub>24</sub>N<sub>24</sub> fullerene as a carrier for 5-fluorouracil anti-cancer drug delivery: DFT studies. *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 77 (2017) 17-24.
- Hesabi M & Ardakani RB. (2017). Interaction between anti-cancer drug hydroxycarbamide and boron nitride nanotube: A long-range corrected DFT study. *Computational and Theoretical Chemistry* 1117:61–80
- Hohenberg P & Kohn W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review B* 136, 864-871.
- Iijima S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354:56–58.
- Iijima S & Ichihashi T. (1993). Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature* 363:603–605.
- Jakubinek MB, Martinez-Rubi Y, Ashrafi B, Guan J, Kim KS, O'Neill K, Kingston CT & Simard B. Polymer nanocomposites incorporating boron nitride nanotubes, *Nanotech 2015 Conference: Washington DC, 2015*.
- Kaur J, Singla P & Goel N. (2015). Adsorption of oxazole and isoxazole on BNNT surface: A DFT study. *Applied Surface Science* 328:632-640.
- Khorram R, Raissi H & Morsali A. (2017). Assessment of solvent effects on the interaction of Carmustine drug with the pristine and COOH-functionalized single-walled carbon nanotubes: A DFT perspective. *Journal of Molecular Liquids* 240:87–97.
- Kim P, Shi L, Majumdar A & McEuen PL (2001). Thermal transport measurement individual multi wall nanotubes. *Physical Review Letters* 87:2155021-2155024.
- Kohn W & Sham LJ. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physics Review* 140:A1133-1138.
- Kresse M, Wagner S, Pfeifferer D, Lawaczeck R & Elste VW. (1998). Semmler targeting of ultrasmall superparamagnetic iron oxide (USPIO) particles to tumor cells in vivo by using transferrin receptor pathways. *Magnetic Resonance in Medicine*. 40:236–242.
- Krishnan A, Dujardin E, Ebbesen TW, Yianilos PN & Treacy MMJ. (1998). Young's modulus of single-walled nanotubes. *Physical Review B* 58:14013-14019.

- Lee C, Yang W & Parr RG. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B* 37(2):785–789.
- Lubbe AS, Gallo JM & Hafeli U. (1996). Preclinical experiences with magnetic drug targeting: tolerance and efficacy. *Cancer Research* 56:4649-4701.
- Merlo A, Mokkalapati VRSS, Pandit S & Mijakovic I (2018). Boron nitride nanomaterials: biocompatibility and bio-applications. *Biomaterial Science* 6:2298-2311.
- Mohammed MH. (2018). Electronic and thermoelectric properties of zigzag and armchair boron nitride in the presence of C Island. *Chinese Journal of Physics Nanotubes* 56:1622-1632.
- Movlaroooy T & Minaie B. (2018). First principles study of structural and electronic properties of BNNTs. *Journal of Computational Electronics* 17:1441–1449.
- Nano safety. (2010). *Nanomaterial ISO/TR 12802 Nanotechnologies - Model taxonomic framework for use in developing vocabularies - Core concept*. First edition.
- O'Boyle NM, Tenderholt AL & Langner KM. (2008). A library for package-independent computational chemistry algorithms, *Journal of Computational Chemistry* 9(5):839–845.
- Parr RG & Weitao Y. (1994). *Density-functional theory of atoms and molecules*. Oxford University Press.
- Parveen S, Misra R & Sahoo SK (2012). Nanoparticles: a boon to drug delivery, therapeutics, diagnostics and imaging. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and Medicine* 8:147-166.
- Payne MC, Teter MP, Allan DC, Arias TA & Joannopoulos JD (1992). Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics* 64:1045-1097.
- Rubio A, Corkill JL & Cohen ML (1994). Theory of graphitic boron nitride nanotubes. *Physical Review B* 49:5081-5084.
- Saikia N & Deka RC (2014). Adsorption of isoniazid and pyrazinamide drug molecules onto nitrogen-doped single-wall carbon nanotubes: an *ab initio* study. *Structural Chemistry* 25:593-605.
- Shakerzadeh E & Noorizadeh S. (2014). A first principles study of pristine and Al-doped boron nitride nanotubes interacting with platinum based anticancer drugs, *Physica E* 57:47–55.
- Sholl DS & Steckel JA (2009). *Density functional theory—A practical introduction*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken.

- Soltani A, Baei MT, Lemeski ET, Kaveh S & Balakheyli H. (2015). A DFT study of 5-fluorouracil adsorption on the pure and doped BN nanotubes. *Journal of Physics Chemistry of Solids* 86:57–64.
- Sripadung P, Nunthaboot N & Wannoo B. (2019). Group 8B transition metal-doped (5,5) boron nitride nanotubes for NH<sub>3</sub> storage and sensing: a theoretical investigation, *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly* 150:1011-1018.
- Tiefenauer LX, Kuhne G & Andres RY. (1993). Antibody-magnetite nanoparticles: in vitro characterization of a potential tumor-specific contrast agent for magnetic resonance imaging. *Bioconjugate Chemistry* 4:347–352.
- Wickline SA, Neubauer AM, Winter PM, Caruthers SD & Lanza GM. (2007). Molecular imaging and therapy of atherosclerosis with targeted nanoparticles. *Journal of Magnetic Resonance Imaging* 25:667–680.
- Wunderbaldinger P, Josephson L & Weissleder R. (2002). Tat peptide directs enhanced clearance and hepatic permeability of magnetic nanoparticles. *Bioconjugate Chemistry* 13:264–268.



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



**ตารางที่ ก-1** การคำนวณพลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันในระบบแก๊ส

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มี การดูดซับยา	พลังงานของท่อ	พลังงานของ ยา	$E_{ads}$ (amu.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
5FU/aBNNT	-4112.85	-3598.86	-513.985	-0.00897506	-5.63194
5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT	-4104.33	-3590.29	-513.985	-0.06085189	-38.1852
5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT	-4134.49	-3620.44	-513.985	-0.06320851	-39.664
5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT	-4115.96	-3601.91	-513.985	-0.06356645	-39.8886
5FU/Ti <sub>B</sub> -aBNNT	-4146.07	-3632.03	-513.985	-0.0586086	-36.7775
5FU/zBNNT	-4111.66	-3597.67	-513.985	-0.01007432	-6.32174
5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT	-4103.13	-3589.09	-513.985	-0.05547396	-34.8105
5FU/Sc <sub>B</sub> -zBNNT	-4133.30	-3619.25	-513.985	-0.0628992	-39.4699
5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT	-4114.76	-3600.72	-513.985	-0.06171295	-38.7255
5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT	-4144.88	-3630.84	-513.985	-0.05756617	-36.1233

หมายเหตุ เปลี่ยนหน่วย amu. เป็น kcal/mol โดยการคูณด้วย 627.51

**ตารางที่ ก-2** การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันในระบบตัวทำละลายน้ำ

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มี การดูดซับยา	พลังงานของท่อ	พลังงานของ ยา	$E_{ads}$ (amu.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
5FU/aBNNT	-4112.887	-3598.88	-514.006	-0.00411	-2.5807
5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT	-4104.393	-3590.35	-514.006	-0.03411	-21.4032
5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT	-4134.541	-3620.51	-514.006	-0.02765	-17.3496
5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT	-4116.009	-3601.97	-514.006	-0.0321	-20.1413
5FU/Ti <sub>B</sub> -aBNNT	-4146.119	-3632.07	-514.006	-0.04043	-25.372
5FU/zBNNT	-4111.713	-3597.7	-514.006	-0.00555	-3.48187
5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT	-4103.209	-3589.17	-514.006	-0.0279	-17.5063
5FU/Sc <sub>B</sub> -zBNNT	-4133.366	-3619.33	-514.006	-0.02674	-16.7822
5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT	-4114.831	-3600.79	-514.006	-0.03372	-21.1571
5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT	-4144.943	-3630.9	-514.006	-0.0378	-23.717

**ตารางที่ ก-3** การคำนวณพลังงานในการละลาย ( $E_{sol}$ ) ของการดูดซับยา 5-ฟลูออโรยูราซิลบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มี การดูดซับยาในระบบ ตัวทำละลายน้ำ	พลังงานของท่อที่มีการ ดูดซับยาในระบบแก๊ส	$E_{sol}$ (amu.)	$E_{sol}$ (kcal/mol)
5FU/aBNNT	-4112.89	-4112.85	-0.03677	-23.073
5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT	-4104.39	-4104.33	-0.06037	-37.883
5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT	-4134.54	-4134.49	-0.04982	-31.263
5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT	-4116.01	-4115.96	-0.0491	-30.808
5FU/Ti <sub>B</sub> -aBNNT	-4146.12	-4146.07	-0.04559	-28.606
5FU/zBNNT	-4111.71	-4111.66	-0.05237	-32.860
5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT	-4103.21	-4103.17	-0.0343	-21.521
5FU/Sc <sub>B</sub> -zBNNT	-4133.37	-4133.3	-0.06415	-40.256
5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT	-4114.83	-4114.76	-0.0681	-42.734
5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT	-4144.94	-4144.88	-0.06041	-37.907

**ตารางที่ ก-4** การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันในระบบแก๊ส

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยา	พลังงานของท่อ	พลังงานของยา	$E_{ads}$ (amu.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
carmustine/zBNNT	-4138.131	-3597.666	-540.4128	-0.052465	-32.9226
carmustine/Mn <sub>N</sub> -zBNNT	-4217.03	-3676.551	-540.4128	-0.066465	-41.70745
carmustine/Mn <sub>B</sub> -zBNNT	-4186.995	-3646.531	-540.4128	-0.051302	-32.19242
carmustine/Tc <sub>N</sub> -zBNNT	-4193.172	-3652.695	-540.4128	-0.063899	-40.09706
carmustine/Tc <sub>B</sub> -zBNNT	-4163.193	-3622.748	-540.4128	-0.032425	-20.34686
carmustine/Re <sub>N</sub> -zBNNT	-4192.181	-3651.698	-540.4128	-0.070113	-43.99672
carmustine/Re <sub>B</sub> -zBNNT	-4162.225	-3621.761	-540.4128	-0.051319	-32.20338

**ตารางที่ ก-5** การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับยาคาร์มีสทีนบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันในระบบตัวทำละลายน้ำ

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยา	พลังงานของท่อ	พลังงานของยา	$E_{ads}$ (amu.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
carmustine/zBNNT	-4138.13	-3597.7	-540.428	-0.0029	-1.82187
carmustine/Mn <sub>N</sub> -zBNNT	-4217.08	-3676.61	-540.428	-0.04052	-25.4244
carmustine/Mn <sub>B</sub> -zBNNT	-4187.05	-3646.59	-540.428	-3646.62	-21.0139
carmustine/Tc <sub>N</sub> -zBNNT	-4193.23	-3652.77	-540.428	-0.03252	-20.4082
carmustine/Tc <sub>B</sub> -zBNNT	-4163.25	-3622.81	-540.428	-0.01623	-10.1867
carmustine/Re <sub>N</sub> -zBNNT	-4192.25	-3651.77	-540.428	-0.04887	-30.665
carmustine/Re <sub>B</sub> -zBNNT	-4162.29	-3621.84	-540.428	-0.0229	-14.3678

**ตารางที่ ก-6** การคำนวณพลังงานในการละลายของการดูดซับยาบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยาในระบบตัวทำละลายน้ำ	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยาในระบบแก๊ส	$E_{sol}$ (amu.)	$E_{sol}$ (kcal/mol)
carmustine/zBNNT	-4138.132	-4138.131	-0.000525	-0.32922
carmustine/Mn <sub>N</sub> -zBNNT	-4217.081	-4217.03	-0.050885	-31.931
carmustine/Mn <sub>B</sub> -zBNNT	-4187.05	-4186.995	-0.054723	-34.3391
carmustine/Tc <sub>N</sub> -zBNNT	-4193.228	-4193.172	-0.055894	-35.0739
carmustine/Tc <sub>B</sub> -zBNNT	-4163.254	-4163.193	-0.060928	-38.2332
carmustine/Re <sub>N</sub> -zBNNT	-4192.245	-4192.181	-0.064191	-40.2804
carmustine/Re <sub>B</sub> -zBNNT	-4162.288	-4162.225	-0.063012	-39.541

ตารางที่ ก-7 การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันในระบบแก๊ส

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยา	พลังงานของท่อ	พลังงานของยา	$E_{ads}$ (amu.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
HC/aBNNT	-3899.2535	-3598.8564	-300.39495	-0.0022019	-1.382
HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT	-3997.7428	-3697.2955	-300.39495	-0.0523605	-32.857
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	-3968.1674	-3667.7302	-300.39495	-0.0422214	-26.494
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	-3965.3144	-3664.8722	-300.39495	-0.0472471	-29.648
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	-4019.3744	-3718.9338	-300.39495	-0.0456384	-28.639
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	-3983.7913	-3683.3606	-300.39495	-0.0356845	-22.392
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	-3978.9644	-3678.5387	-300.39495	-0.0307964	-19.325
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	-4043.5795	-3743.1414	-300.39495	-0.0431271	-27.063
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	-4000.9727	-3700.5321	-300.39495	-0.0456335	-28.635
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	-3993.394	-3692.9506	-300.39495	-0.0484694	-30.415
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	-3967.7687	-3667.3157	-300.39495	-0.0580391	-36.42
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	-3938.2598	-3637.8307	-300.39495	-0.0341584	-21.43
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	-3935.4302	-3634.9858	-300.39495	-0.0494117	-31.01
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	-3989.4318	-3688.9817	-300.39495	-0.0552148	-34.65
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	-3953.9381	-3653.5072	-300.39495	-0.0359089	-22.53
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	-3949.1435	-3648.7067	-300.39495	-0.0418905	-26.29
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	-4013.6468	-3713.2041	-300.39495	-0.0477437	-29.96
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	-3971.0996	-3670.6714	-300.39495	-0.0332434	-20.86
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	-3963.5526	-3663.1277	-300.39495	-0.0299882	-18.82

ตารางที่ ก-8 การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันในระบบตัวทำละลายน้ำ

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยา	พลังงานของท่อ	พลังงานของยา	$E_{ads}$ (amu.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
HC/aBNNT	-3899.289	-3598.8763	-300.41168	-0.0009619	-0.604
HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT	-3997.782	-3697.337	-300.41168	-0.0332819	-20.88
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	-3968.2134	-3667.7795	-300.41168	-0.0222462	-13.96
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	-3965.3595	-3664.9018	-300.41168	-0.0460766	-28.91
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	-4019.4161	-3718.9696	-300.41168	-0.0347345	-21.80
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	-3983.8385	-3683.4038	-300.41168	-0.0229783	-14.42
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	-3979.0205	-3678.5893	-300.41168	-0.0194861	-12.23
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	-4043.62	-3743.1757	-300.41168	-0.0325779	-20.44
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	-4001.0142	-3700.5737	-300.41168	-0.0288597	-18.11
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	-3993.4414	-3693.002	-300.41168	-0.0277566	-17.42
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	-3967.8041	-3667.3535	-300.41168	-0.0388343	-24.37
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	-3938.2997	-3637.8689	-300.41168	-0.0191012	-11.99
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	-3935.4681	-3635.0272	-300.41168	-0.0291927	-18.32
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	-3989.4647	-3689.0139	-300.41168	-0.0390279	-24.49
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	-3953.9675	-3653.5399	-300.41168	-0.015837	-9.94
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	-3949.1821	-3648.7507	-300.41168	-0.0197178	-12.37
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	-4013.6793	-3713.2319	-300.41168	-0.035707	-22.41
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	-3971.134	-3670.7014	-300.41168	-0.0209334	-13.14
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	-3963.5913	-3663.1638	-300.41168	-0.0158181	-9.93



ตารางที่ ก-9 การคำนวณพลังงานในการละลายการดูดซับของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด/พลังงาน	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยาในระบบตัวทำละลายน้ำ	พลังงานของท่อที่มีการดูดซับยาในระบบแก๊ส	$E_{ads}$ (amu.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
HC/aBNNT	-3899.289	-3899.2535	-0.0354497	-22.245
HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT	-3997.782	-3997.7428	-0.0391792	-24.585
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	-3968.2134	-3968.1674	-0.0460198	-28.878
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	-3965.3595	-3965.3144	-0.0451626	-28.340
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	-4019.4161	-4019.3744	-0.0416842	-26.157
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	-3983.8385	-3983.7913	-0.0471851	-29.609
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	-3979.0205	-3978.9644	-0.0560355	-35.163
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	-4043.62	-4043.5795	-0.0404595	-25.389
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	-4001.0142	-4000.9727	-0.0415272	-26.059
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	-3993.4414	-3993.394	-0.047432	-29.764
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	-3967.804	-3967.7687	-0.0353614	-22.190
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	-3938.300	-3938.2598	-0.0399222	-25.052
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	-3935.468	-3935.4302	-0.0378951	-23.780
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	-3989.465	-3989.4318	-0.0328199	-20.595
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	-3953.967	-3953.9381	-0.0293854	-18.440
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	-3949.182	-3949.1435	-0.0386367	-24.245
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	-4013.679	-4013.6468	-0.0325251	-20.410
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	-3971.134	-3971.0996	-0.0344056	-21.590
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	-3963.591	-3963.5526	-0.0386136	-24.230

**ตารางที่ ก-10** การคำนวณพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แลပ်พลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ ) ของการดูดซับไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด/พลังงาน	$E_{\text{HOMO}}$ (a.u.)	$E_{\text{LUMO}}$ (a.u.)	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)
HC/aBNNT	-0.24	-0.019	-6.531	-0.517	6.014
HC/Fe <sub>N</sub> -aBNNT	-0.216	-0.082	-5.878	-2.231	3.646
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	-0.193	-0.088	-5.252	-2.395	2.857
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	-0.176	-0.083	-4.789	-2.259	2.531
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	-0.228	-0.101	-6.204	-2.748	3.456
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	-0.203	-0.078	-5.524	-2.123	3.402
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	-0.188	-0.078	-5.116	-2.123	2.993
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	-0.22	-0.148	-5.987	-4.027	1.959
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	-0.206	-0.114	-5.606	-3.102	2.504
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	-0.191	-0.101	-5.197	-2.748	2.449
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	-0.172	-0.04	-4.680	-1.088	3.592
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	-0.196	-0.078	-5.334	-2.123	3.211
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	-0.192	-0.093	-5.225	-2.531	2.694
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	-0.199	-0.045	-5.415	-1.225	4.191
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	-0.212	-0.037	-5.769	-1.007	4.762
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	-0.211	-0.046	-5.742	-1.252	4.490
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	-0.128	-0.055	-3.483	-1.497	1.986
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	-0.115	-0.052	-3.129	-1.415	1.714
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	-0.115	-0.054	-3.129	-1.469	1.660

หมายเหตุ เปลี่ยนหน่วยเป็นอิเล็กตรอนโวลต์ (eV) คูณ 27.212

ตารางที่ ก-11 การคำนวณค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบน  
 ท่อนาโนคาร์บอนแบบตั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด/อะตอม	Cl	O	H	O	H	H	C1	C2	N	C3	N	C4	PCT
5FU/aBNNT	-0.349	-0.582	0.461	-0.645	0.447	0.247	0.293	0.628	-0.682	0.862	-0.646	-0.003	0.031
5FU/Sc <sub>N</sub> -aBNNT	-0.34	-0.567	0.462	-0.729	0.488	0.26	0.299	0.622	-0.663	0.898	-0.598	0.014	0.146
5FU/Sc <sub>B</sub> -aBNNT	-0.339	-0.561	0.466	-0.72	0.48	0.261	0.302	0.623	-0.662	0.896	-0.611	0.012	0.147
5FU/Ti <sub>N</sub> -aBNNT	-0.341	-0.565	0.464	-0.687	0.482	0.263	0.297	0.623	-0.664	0.891	-0.611	0.012	0.164
5FU/Ti <sub>B</sub> -aBNNT	-0.338	-0.559	0.467	-0.68	0.481	0.261	0.303	0.623	-0.659	0.899	-0.609	0.012	0.201
5FU/zBNNT	-0.351	-0.591	0.467	-0.64	0.452	0.246	0.288	0.625	-0.685	0.863	-0.647	-0.002	0.025
5FU/Sc <sub>N</sub> -zBNNT	-0.34	-0.576	0.485	-0.724	0.457	0.258	0.305	0.625	-0.663	0.893	-0.622	-0.003	0.095
5FU/Sc <sub>B</sub> -zBNNT	-0.339	-0.559	0.467	-0.716	0.478	0.26	0.302	0.623	-0.661	0.892	-0.61	0.012	0.149
5FU/Ti <sub>N</sub> -zBNNT	-0.339	-0.573	0.485	-0.678	0.459	0.254	0.306	0.625	-0.662	0.903	-0.618	-0.002	0.16
5FU/Ti <sub>B</sub> -zBNNT	-0.338	-0.557	0.468	-0.682	0.48	0.258	0.304	0.623	-0.658	0.897	-0.61	0.012	0.197



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
 RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



ตารางที่ ก-13 การคำนวณค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับยาไฮดรอกซิลคาร์บาไมด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ชนิด/อะตอม	O	H	N	H	C	O	N	H	H	PCT
HC/aBNNT	-0.588	0.519	-0.388	0.405	0.83	-0.693	-0.885	0.409	0.432	0.041
HC/Fr <sub>N</sub> -aBNNT	-0.571	0.527	-0.349	0.412	0.868	-0.695	-0.85	0.42	0.443	0.205
HC/Ru <sub>N</sub> -aBNNT	-0.573	0.525	-0.363	0.411	0.862	-0.698	-0.853	0.413	0.439	0.163
HC/Os <sub>N</sub> -aBNNT	-0.593	0.507	-0.363	0.425	0.86	-0.678	-0.837	0.455	0.439	0.215
HC/Co <sub>N</sub> -aBNNT	-0.575	0.518	-0.352	0.417	0.86	-0.697	-0.854	0.418	0.442	0.177
HC/Rh <sub>N</sub> -aBNNT	-0.548	0.533	-0.395	0.424	0.851	-0.611	-0.845	0.427	0.447	0.283
HC/Ir <sub>N</sub> -aBNNT	-0.567	0.522	-0.36	0.413	0.861	-0.71	-0.861	0.417	0.438	0.153
HC/Ni <sub>N</sub> -aBNNT	-0.57	0.525	-0.358	0.412	0.866	-0.712	-0.857	0.418	0.439	0.163
HC/Pd <sub>N</sub> -aBNNT	-0.595	0.506	-0.368	0.423	0.854	-0.681	-0.843	0.435	0.456	0.187
HC/Pt <sub>N</sub> -aBNNT	-0.594	0.506	-0.365	0.425	0.856	-0.673	-0.841	0.438	0.458	0.21
HC/Fe <sub>B</sub> -aBNNT	-0.596	0.507	-0.363	0.441	0.864	-0.667	-0.844	0.438	0.438	0.218
HC/Ru <sub>B</sub> -aBNNT	-0.563	0.527	-0.37	0.407	0.864	-0.685	-0.861	0.461	0.439	0.219
HC/Os <sub>B</sub> -aBNNT	-0.593	0.506	-0.366	0.426	0.863	-0.708	-0.831	0.438	0.455	0.19
HC/Co <sub>B</sub> -aBNNT	-0.596	0.505	-0.37	0.428	0.866	-0.677	-0.835	0.435	0.454	0.21
HC/Rh <sub>B</sub> -aBNNT	-0.6	0.504	-0.38	0.42	0.858	-0.696	-0.844	0.433	0.449	0.144
HC/Ir <sub>B</sub> -aBNNT	-0.595	0.505	-0.372	0.424	0.862	-0.705	-0.835	0.436	0.453	0.173
HC/Ni <sub>B</sub> -aBNNT	-0.601	0.504	-0.381	0.418	0.861	-0.674	-0.844	0.451	0.438	0.172
HC/Pd <sub>B</sub> -aBNNT	-0.604	0.502	-0.382	0.416	0.857	-0.689	-0.849	0.448	0.432	0.131
HC/Pt <sub>B</sub> -aBNNT	-0.603	0.503	-0.384	0.417	0.858	-0.691	-0.847	0.438	0.448	0.139

## ประวัติผู้วิจัย

ชื่อ- นามสกุล ; ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.माणุกรณ์ ทับทิมใส  
วัน/เดือน/ปี/สถานที่เกิด ; 29 ตุลาคม 2523 จังหวัดมหาสารคาม  
ตำแหน่ง /หน่วยงานที่สังกัด ; อาจารย์/สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี  
ที่อยู่ หมายเลขโทรศัพท์ติดต่อ ; 149/53 ถ.ถีนานนท์ ต.ตลาด อ.เมือง จ.มหาสารคาม 44000  
โทรศัพท์ 086-0226103

### ประวัติการศึกษา

ปริญญาตรีสาขา เคมี	สถาบัน มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ปีที่จบ 2547
ปริญญาโทสาขา เคมีฟิสิกัล	สถาบัน มหาวิทยาลัยขอนแก่น ปีที่จบ 2550
ปริญญาเอกสาขา เคมี	สถาบัน มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ปีที่จบ 2555

### ประสบการณ์การทำงาน

ปี 2550	อาจารย์ประจำหมวดวิทยาศาสตร์ โรงเรียนสาธิตมหาวิทยาลัยมหาสารคาม
ปี 2553 – 2554	อาจารย์พิเศษ สาขาวิชาเคมี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
ปี 2554 – ปัจจุบัน	อาจารย์ประจำสาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

### ประสบการณ์การดำเนินงานวิจัย

- โครงการวิจัย เรื่อง ท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวที่มีหมู่ฟังก์ชันเป็นอะลิฟาติกและอะลิไซคลิกฟลูออโรคาร์บอน: การศึกษาเชิงทฤษฎี งบประมาณแผ่นดิน ปีงบประมาณ 2557 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
- โครงการวิจัย เรื่อง การศึกษาเชิงทฤษฎีของการดูดซับไฮโดรเจนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะหมู่ VIII B งบประมาณแผ่นดิน ปีงบประมาณ 2559 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
- โครงการวิจัย เรื่อง การดูดซับคาร์บอนมอนอกไซด์บนแผ่นกราฟีนที่มีการเติมโลหะ: การศึกษาเชิงทฤษฎี งบบำรุงการศึกษา ปีงบประมาณ 2556 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
- โครงการวิจัย เรื่อง การศึกษาเชิงทฤษฎีของการดูดซับแก๊สบนวัสดุระดับนาโน งบบำรุงการศึกษา ปีงบประมาณ 2557 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
- โครงการวิจัย เรื่อง สมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และสมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์และไนโตรเจนมอนอกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะออกไซด์และโลหะซัลไฟด์: การศึกษาเชิงทฤษฎี งบบำรุงการศึกษา ปีงบประมาณ 2558 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม



- โครงการวิจัย เรื่อง การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับฟอร์มัลดีไฮด์และฟอสจีนบนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวที่มีการเติมสังกะสีและทองคำ งบบำรุงการศึกษา ปีงบประมาณ 2559 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
- โครงการวิจัย เรื่อง การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์และท่อนาโนโบรอนฟอสไฟด์ที่มีการเติมสแกนเดียมและไทเทเนียม งบบำรุงการศึกษา ปีงบประมาณ 2560 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
- โครงการวิจัย เรื่อง การดูดซับแอมโมเนีย ไนโตรเจนไดออกไซด์ คาร์บอนไดออกไซด์ คาร์บอนิลซัลไฟด์ ไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน: การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟที งบประมาณแผ่นดิน ปีงบประมาณ 2561 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
- โครงการวิจัย เรื่อง การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับยาต้านมะเร็งบนท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน งบประมาณแผ่นดิน ปีงบประมาณ 2562 มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

#### ประสบการณ์ด้านการตีพิมพ์เผยแพร่งานวิจัย

##### บทความวิจัยระดับนานาชาติ จำนวน 13 เรื่องคือ

1. **Tabtimsai C.**; Wannoo B.; Utairueng A.; Phomchamorn P.; Kumsuwan U.: First Principle investigation of  $\text{NH}_3$  and  $\text{NO}_2$  adsorption on transition metal-doped single-walled carbon nanotubes. *Journal of Electronic Material*. (2019). <https://doi.org/10.1007/s11664-019-07537-4> อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 1.676 (2019)
2. Phalinyot S.; **Tabtimsai C.**; Wannoo B. Nitrogen monoxide storage and sensing applications of transition metal-doped boron nitride nanotubes: a DFT investigation. *Structural Chemistry*, (2019). (<https://doi.org/10.1007/s11224-019-01339-4>). อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 1.624 (2019)
3. **Tabtimsai C.**; Ruangpornvisuti V.; Tontapha S.; Wannoo B.; A DFT investigation on group 8B transition metal-doped silicon carbide nanotubes for hydrogen storage application. *Applied Surface Science* 439 (2018) 494–505. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 5.155 (2019)
4. **Tabtimsai C.**; Somtua T.; Motongsri T.; Wannoo B. A DFT study of  $\text{H}_2\text{CO}$  and  $\text{HCN}$  adsorptions on 3d, 4d, and 5d transition metal-doped graphene nanosheets. *Structural Chemistry* 29 (2018) 147-157 อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 1.624

5. Buasaeng P.; Rakrai W.; Wannoo B. **Tabtimsai C.** DFT investigation of NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>, and AsH<sub>3</sub> adsorptions on Sc-, Ti-, V-, and Cr-doped single-walled carbon nanotubes. *Applied Surface Science* 400, (2017), 506–514 อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 5.155 (2019)
6. **Tabtimsai C.**; Rakrai W.; Wannoo B. Hydrogen adsorption on graphene sheets doped with group 8B transition metal: A DFT investigation. *Vacuum* 139, (2017), 101-108. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 2.515 (2019)
7. **Tabtimsai C.**; Tontapha S.; Rakrai W.; Wannoo B. A DFT study on structural stability and electronic property of VIII B transition metal-doped carbon nanocaps. *Solid State Sciences* 37, (2014), 6-12. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 2.155 (2019)
8. Wannoo B; **Tabtimsai C.** A DFT investigation of CO adsorption on VIII B transition metal-doped graphene sheets. *Superlattices and Microstructures* 67, (2014), 110-117. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 2.385 (2019)
9. **Tabtimsai C.**; Nonsri A.; Grattoo N.; Massiri N.; Suvanvapee P.; Wannoo B. Carbon monoxide adsorption on carbon atom doped perfect and Stone–Wales defect single-walled boron nitride nanotubes: a DFT investigation. *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly* 145, (2014) 725-735. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 1.501 (2019)
10. **Tabtimsai C.**; Keawwangchai S.; Wannoo B.; Ruangpornvisuti V. Gas Adsorption on the Zn-, Pd- and Os-doped Armchair (5,5) Single-walled Carbon Nanotubes. *Journal of Molecular Modeling* 18, (2012), 351-358. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 1.335 (2019)
11. **Tabtimsai C.**; Keawwangchai S.; Nunthaboot N.; Wannoo B.; Ruangpornvisuti V. Density Functional Investigation of Hydrogen Gas Adsorption on Fe-doped Pristine and Stone–Wales Defected Single-walled Carbon Nanotubes. *Journal of Molecular Modeling* 18, (2012), 3941-3949. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 1.335 (20159)
12. **Tabtimsai C.**; Wannoo B.; Ruangpornvisuti V. Theoretical investigation of CO<sub>2</sub> and NO<sub>2</sub> adsorption onto Co-, Rh- and Ir-doped (5,5) single-walled carbon nanotubes. *Materials Chemistry and Physics* 138, (2013), 709-715. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 2.781 (2019)

13. **Tabtimsai C.**; Ruangpornvisuti V.; Wannoo B. Density functional theory investigation of the VIII B transition metal atoms deposited on (5,5) single-walled carbon nanotubes. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 49, (2013), 61–67. อยู่ในฐานข้อมูล ISI มีค่า Impact factor 3.176 (2019)

#### บทความวิจัยระดับชาติจำนวน 1 เรื่องคือ

**Tabtimsai C.**; Danvirutai C. and Srithanratana T.; Raman and infrared spectroscopic studies of divalent cation phosphate hydrates related to saline soil. *KKU Res J (GS)* 7 (2) (2007).

#### บทความวิชาการระดับชาติจำนวน 1 เรื่องคือ

ฉาณกรณ์ ทับทิมใส. การศึกษาเชิงทฤษฎีของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวที่มีการเติมโลหะ. วารสารวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น ฉบับเดือนตุลาคม-ธันวาคม 4 (41) (2013).

#### นำเสนอบทความวิจัยในการประชุมระดับนานาชาติจำนวน 12 เรื่อง

1. Kansawai, P., Somtua, T., Wannoo, B., **Tabtimsai, C.** NO Adsorption on Pristine and Transition Metal Doped Single Wall Carbon Nanotubes: A DFT Study, Proceeding in The 3rd Roi Et Rajabhat University National and International Conference on Education and Technology Research 2019 (pp.166-174), Maha Vajiralongkorn Crown Prince 60<sup>th</sup> Convention Hall, Roi Et Rajabhat University, Thailand, July, 12 2019.
2. Makhin, A., **Tabtimsai C.**, & Pimchan, P. (2018). The photocatalytic of TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> nanocomposites, Proceeding in ICSSS2017 (pp.667-677). Maha Sarakham: Rajabhat Maha Sarakham University.
3. **Tabtimsai C.**; Tebumroong P.; Satchawan S.; Chara P.; Intarapoom R.; Wapee R.; Rakrai W.; Wannoo B.; Keawwangchai S.; Chuekachang S. cetylene adsorption on Sc-, Ti-, V-, and Cr-doped boron nitride nanosheets: A theoretical study. Pure and Applied Chemistry International Conference 2014 (PACCON 2017), Centra Government Complex Hotel & Convention Centre, Bangkok, Thailand, February 2-3, 2017.
4. Buasang P.; Rakrai W.; Wannoo B.; **Tabtimsai C.** Geometric, energetic and electronic properties of 4d transition metals doped (5,5) single-walled carbon nanotube. The 6<sup>th</sup> International Conference on Sciences and Social Sciences 2016 (ICSSS 2016): Mutual Community Engagement

toward Global Understanding and Sustainable Well-being, Rajabhat Maha Sarakham University, Thailand, September 22-23, 2016.

5. Motongsri T.; Somtua T.; Wannoo B.; **Tabtimsai C.** Density functional theory calculations of hydrogen adsorption on pristine, B-, Al-, and N-doped graphene nanosheets. The 6<sup>th</sup> International Conference on Sciences and Social Sciences 2016 (ICSSS 2016): Mutual Community Engagement toward Global Understanding and Sustainable Well-being, Rajabhat Maha Sarakham University, Thailand, September 22-23, 2016
6. **Tabtimsai C.** ; Kansawai P.; Phoson P.; Pooboontong P.; Wannoo B. Adsorption of CO<sub>2</sub> on Ga- and B-doped silicon carbide nanosheets: A theoretical study. The 5<sup>th</sup> International Conference on Sciences and Social Sciences 2015 (ICSSS 2015): Research and Innovation for Community and Regional Development, Rajabhat Maha Sarakham University, Thailand, September 17-18, 2015.
7. **Tabtimsai C.**; Rakrai W.; Wannoo B. Carbon monoxide adsorption on pristine, Fe-, Ru- and Os-doped single-walled carbon nanotube: A DFT study. International Conference on Global Trends in Pure and Applied Chemistry Sciences, Harbour Plaza Resort City, October 2-4, 2014.
8. **Tabtimsai C.**; Mangkala P.; U-pareetee K.; Wannoo B. Hydrogen molecule adsorption on Pt-doped boron nitride nanotube and boron nitride nanosheet: A DFT study. Pure and Applied Chemistry International Conference 2014 (PACCON 2014), Khon Kaen, January 8-10, 2014.
9. Somtua T.; **Tabtimsai C.**; Wannoo B. The adsorption of fluorobenzene on Pd-doped single wall carbon nanotube: A DFT study. Pure and Applied Chemistry International Conference 2014 (PACCON 2014), Khon Kaen, January 8-10, 2014.
10. Kamolphop U.; Treewiset K.; **Tabtimsai C.**; Wannoo B. "A density functional investigation of ethylene adsorption on graphene and VIII B metal-doped graphene surfaces" The VIIIth Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics, Budapest, Hungary, August 25-31, 2013.
11. **Tabtimsai C.**; Keawwangchai S.; Nunthaboot N.; Tontapha S.; Ruangpornvisuti V. and Wannoo B.; "Structural, Electronic and Gas Adsorption Properties of Metal Doped Single Wall Carbon Nanotube: A Theoretical Study" 7<sup>th</sup> PERCH-CIC International Congress, Pattaya, Chonburi, Thailand, May 4-7, 2011.

12. **Tabtimsai C.** and Wanno B.; “Theoretical Study of Transition Metals Doped on the (5,5) Single Wall Carbon Nanotube” 6<sup>th</sup> PERCH-CIC International Congress, Pattaya, Chonburi, Thailand, May 3-6, 2009.

**นำเสนอบทความวิจัยในการประชุมระดับชาติจำนวน 13 เรื่อง**

1. ประหยัด คำน้อยม, **ฉาณุกรณ์ ทับทิมใส**, เนตรชนก จันทร์สว่าง. การพัฒนาแผนการ จัดกิจกรรมการเรียนรู้วิทยาศาสตร์โดยใช้ปัญหาเป็นฐาน เรื่อง อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี สำหรับนักเรียนชั้นมัธยมศึกษาปีที่ 5, ในการประชุมวิชาการเสนอผลงานวิจัย บัณฑิตศึกษาระดับชาติ มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม ครั้งที่ 3 11 – 12 มกราคม 2561 บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม.
2. จรูญลักษณ์ วรโคตร, เนตรชนก จันทร์สว่าง, **ฉาณุกรณ์ ทับทิมใส**. การอธิบายทาง วิทยาศาสตร์ของนักเรียนระดับมัธยมศึกษาปีที่ 5 เรื่องกรด-เบส ใน The 4<sup>th</sup> National Conference on Technology and Innovation Management NCTIM 2018 Rajabhat Maha Sarakham University MahaSarakham Thailand 5 March 2018.
3. **Tabtimsai C.**; Napangrat P.; Matrieng R.; Taithaisong Y.; Wanno B. Adsorption on CO<sub>2</sub> adsorption on Ti- and Sc-doped boron nitride and boron phosphide nanotubes: a DFT investigation. The 43<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 43), Chamchuri 10, Chulalongkorn University, Bangkok, Thailand, October 17<sup>th</sup> - 19<sup>nd</sup>, 2017.
4. **Tabtimsai C.**; Wanno B. Theoretical investigation of H<sub>2</sub>CO and Cl<sub>2</sub>CO adsorptions on pristine and Zn-doped single wall carbon nanotubes. The 42<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 42), Centara grand at Central Plaza Ladprao, Bangkok, Thailand, November 30<sup>th</sup> - Desember 2<sup>nd</sup>, 2016.
5. **Tabtimsai C.**; Rakrai W.; Wanno B. DFT investigation of carbon monoxide and nitrogen monoxide adsorption on pristine, CuO, CuS, ZnO, and ZnS co-doped single-walled carbon nanotubes. The 41<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 41), Suranaree University of Technology, Nakhonratchasima, Thailand, November 6-8, 2015.
6. Sontirak P.; **Tabtimsai C.**; Tansupo P. Sorption of norfloxacin by adsorbent prepared from fish scales. The 41<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 40), Suranaree University of Technology, Nakhonratchasima, Thailand, November 6-8, 2015.
7. **Tabtimsai C.**; Somtua T.; Wanno B. Structural, solubility and electronic properties of functionalization of aliphatic fluorocarbons onto single wall

carbon nanotubes: A theoretical study. The 40<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 40), Pullman Khon Kaen Raja Orchid, Khon Kaen, Thailand, December 2-4, 2014.

8. **Tabtimsai C.**; Rakrai W. and Wannoo B. “Functionalization of Aliphatic Fluorocarbon Compounds on Boron Nitride Nanotubes” The 38<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 38), The Empress Convention Hall, Chiangmai, Thailand, October 17-19, 2012.
9. **Tabtimsai C.** and Wannoo B. “Functionalization on Single Wall Carbon Nanotube with Aliphatic and Aromatic Fluorocarbon Compounds” The 4<sup>th</sup> Science Research Conference, (SRC 4), Naresuan University, Phitsanulok, March 12-13, 2012.
10. **Tabtimsai C.**; Tontapha S. Ruangpornvisuti V. and Wannoo B.; “Adsorption of H<sub>2</sub> on Pristine and Stone-Wales Defected SWCNTs with and without Doping Fe and Os” The 36<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 36), Bangkok International Trade and Exhibition Center (BITEC), Bangkok, Thailand, October 26-28, 2010.
11. **Tabtimsai C.**; Ruangpornvisuti V. and Wannoo B. “Sensitivities of Os- and Zn-doped SWCNTs for NO<sub>2</sub> and NH<sub>3</sub> Sensors: The 6<sup>th</sup> Thai Summer School of Computational Chemistry, Mahasarakham, Thailand, October 19-22, 2009.
12. **Tabtimsai C.**; Siwinee T.; Ruangpornvisuti V. and Wannoo B. “Reactivity of SWCNTs Doped Pd and Au for NO<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> Adsorption: A Density Function Study” The 35<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 35), Bangsaen, Samutphakarn, Thailand, October 15-17, 2009.
13. **Tabtimsai C.**; Siwinee T. and Wannoo B. “Nanosensor for Detection of Potassium Ion: A Theoretical Study” The 35<sup>th</sup> Congress on Science and Technology of Thailand, (STT 35), Bangsaen, Samutphakarn, Thailand, October 15-17, 2009.

#### การเป็นผู้พิจารณาบทความวิจัย

1. เป็นผู้พิจารณาบทความวิจัยก่อนตีพิมพ์ วารสาร Solid State Sciences ประเทศเนเธอร์แลนด์
2. เป็นผู้พิจารณาบทความวิจัยก่อนตีพิมพ์ วารสาร The Journal of Physical Chemistry ประเทศสหรัฐอเมริกา
3. เป็นผู้พิจารณาบทความวิจัยก่อนตีพิมพ์ วารสาร Physica E ประเทศเนเธอร์แลนด์



4. เป็นผู้พิจารณาบทความวิจัยก่อนตีพิมพ์ วารสาร Thin Solid Films ประเทศ  
สวีตเซอร์แลนด์
5. เป็นผู้พิจารณาบทความวิจัยก่อนตีพิมพ์ วารสาร Applied Surface Science ประเทศ  
เนเธอร์แลนด์
6. เป็นผู้พิจารณาบทความวิจัยก่อนตีพิมพ์ วารสาร Zeitschrift für Physikalische  
Chemie ประเทศเยอรมนี
7. เป็นผู้พิจารณาบทความวิจัยก่อนตีพิมพ์ วารสาร Chemical Physics ประเทศ  
เนเธอร์แลนด์



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY