

สมยศ ศรีคงรักษ์ 2556: การศึกษาโครงสร้างและพลศาสตร์ของโมเลกุลของน้ำที่อยู่รอบ
ฟอสโฟลิพิดไบเลเยอร์ POPE ด้วยวิธี Molecular Dynamics ปรินซ์ญาวิทยาศาสตร์
มหาบัณฑิต (ฟิสิกส์) สาขาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก:
อาจารย์เฉลิมพล กาญจนวรินทร์, Ph.D. 107 หน้า

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้รายงานผลการวิเคราะห์โครงสร้างและพลศาสตร์ของโมเลกุลน้ำที่อยู่
รอบๆ ฟอสโฟลิพิดไบเลเยอร์ POPE โดยใช้วิธีพลศาสตร์โมเลกุล ที่ผ่านมามีการศึกษาเชิงการ
คำนวณที่แสดงให้เห็นว่าโมเลกุลของน้ำมีการเคลื่อนที่ช้าลงเมื่อเข้าใกล้ลิพิดไบเลเยอร์ที่เกิดจาก
ไดโพลโมเมนต์ของลิพิด เพื่อศึกษาถึงผลดังกล่าวนี้ในรายละเอียดระดับอะตอมเราได้ทำ
พลศาสตร์โมเลกุลของไบเลเยอร์ของลิพิด POPE จำนวน 144 โมเลกุลในน้ำที่ไม่มีไอออน โดยใช้
แบบจำลองน้ำ TIP3P และใช้พารามิเตอร์ของ CHARMM โดยระบบถูกทำให้อยู่ในสถานะสมดุล
ที่ความดัน 1 atm และอุณหภูมิ 310 K นาน 20 ns เราวิเคราะห์สมบัติเชิงโครงสร้างและพลศาสตร์
ของน้ำและลิพิดต่อไปนี้ (1) พื้นที่ต่อลิพิด (2) ความหนาแน่นของอะตอมในลิพิด (3) สัมประสิทธิ์
การแพร่ของน้ำ (4) จำนวนการสร้างพันธะไฮโดรเจนของน้ำ และ (5) โพลาริเซชันของน้ำรอบ
ลิพิดไบเลเยอร์ เราวิเคราะห์ช่วง 1 ns สุดท้ายของเส้นทางที่มี 1,000 ภาพ ซึ่งในแต่ละภาพระบบจะ
ถูกแบ่งเป็นชั้นมีความหนาแน่นตัว 4.0 Å ตามแนวแกน z แล้วเลื่อนชั้นทีละ 0.2 Å จากขอบบนไปถึง
ขอบล่างได้ทั้งหมด 460 ชั้น เราพบว่า (1) ลิพิดไบเลเยอร์มีความหนา 36 Å และมีพื้นที่ต่อลิพิด
 $65.03 \pm 0.47 \text{ \AA}^2$ (2) ความหนาแน่นของอะตอมในระบบสอดคล้องกับผลของนักวิจัยอื่นๆ (3) ค่า
สัมประสิทธิ์การแพร่ของน้ำในบริเวณหัวลิพิดมีค่าลดลงเหลือแค่หนึ่งในสามของค่าปกติของน้ำ
(4) น้ำสร้างพันธะไฮโดรเจนน้อยลงเมื่อเข้าถึงลิพิด และ (5) น้ำถูกทำให้มีไดโพลโมเมนต์
ลัพธ์ตั้งฉากกับระนาบของลิพิดไบเลเยอร์ โดยเกิดจากไดโพลโมเมนต์ของส่วนหัวของลิพิด โดย
สรุปแล้ว ผลที่ได้จากการทำพลศาสตร์โมเลกุลครั้งนี้แสดงให้เห็นว่าน้ำเคลื่อนที่ได้ช้าลงจริงเมื่อ
มันเข้าไปใกล้ลิพิดไบเลเยอร์ และอาจมีต้นเหตุมาจากประจุและไดโพลโมเมนต์ของลิพิด ซึ่ง
โมเลกุลของน้ำที่เคลื่อนที่ช้านี้อาจทำให้เกิดชั้นระนาบที่มีโครงข่ายของพันธะไฮโดรเจนที่
สามารถส่งผ่านโปรตอนไปตามระนาบของผิวลิพิดได้เร็วกว่าการแพร่ของน้ำในสามมิติ