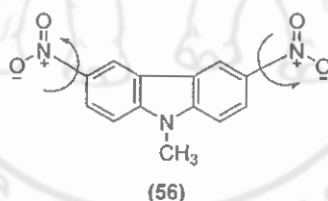


บทที่ 5

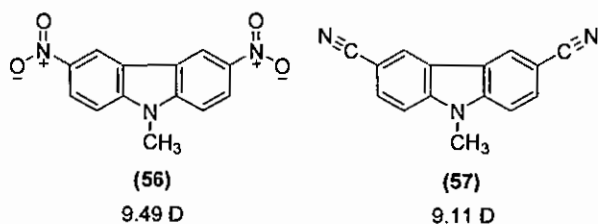
บทสรุป

จากผลการศึกษาคุณสมบัติการเป็นยูนิเวอร์ซอลเบสของอนุพันธ์ของ Carbazole พบว่า ทั้ง 3-Nitrocarbazole และ 3,6-Dinitrocarbazole มีคุณสมบัติการเป็นยูนิเวอร์ซอลเบสที่ดี ส่วนการเพิ่มค่าไดโพลโมเมนต์ในโครงสร้างสามารถเพิ่มความเสถียรของโครงสร้างแบบดูเพลิกซ์ได้ดี โดยผ่านการเกิด stacking ทั้งนี้พบว่า 3,6-Dinitrocarbazole มีความแข็งแรงของโครงสร้างแบบดูเพลิกซ์ที่สูง (ค่าเฉลี่ย $\Delta G = -18.4$ kcal/mol) แต่คุณสมบัติการเป็นยูนิเวอร์ซอลเบสยังไม่ดี ($\Delta T_m = 2.9$ °C) เมื่อเทียบกับ 3-Nitrocarbazole ($\Delta T_m = 1.5$ °C) ทั้งนี้อาจเนื่องมาจากความเกะกะของหมู่ไนโตร ($-\text{NO}_2$) 2 กลุ่มบนวง carbazole จากการหมุนของพันธะ C-N ที่เชื่อมต่อกับวงของคาร์บาโซล [62] แสดงในภาพ 62 ดังนั้นเมื่อ 3,6-Dinitrocarbazole เกิดการ stacking ขึ้นในโครงสร้างแบบดูเพลิกซ์ของ DNA:PNA จะทำให้เบสที่อยู่ตรงกันข้ามเกิดการบิดและซ้อนทับกับ 3,6-Dinitrocarbazole เพื่อลด steric effect



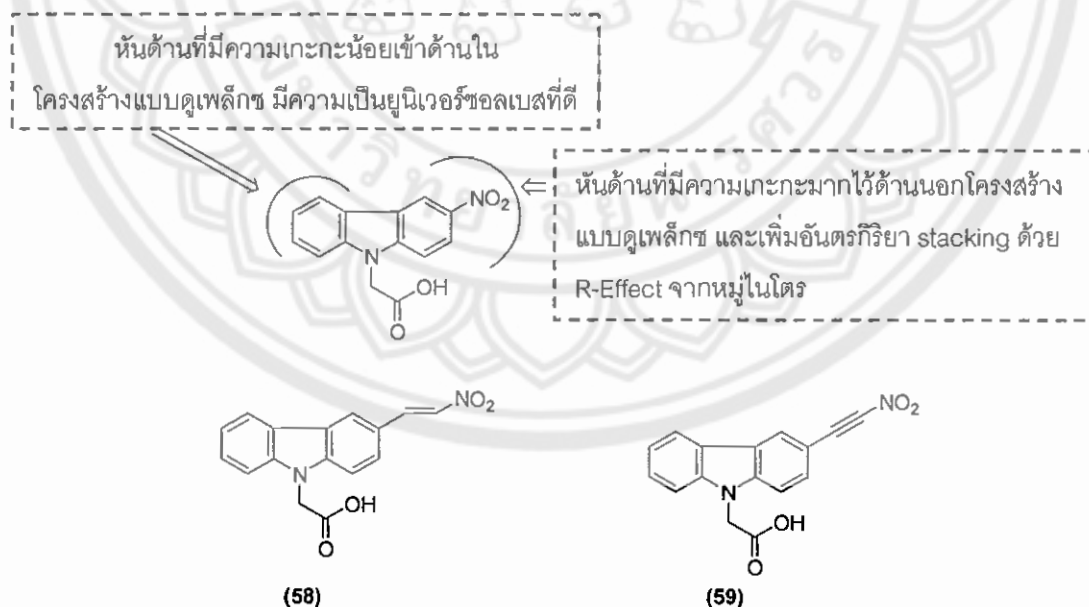
ภาพ 62 การหมุนของหมู่ไนโตรจนรอบพันธะ C-N

ดังนั้นแนวทางหนึ่งที่สามารถคงไว้ซึ่งความแข็งแรงของโครงสร้างแบบดูเพลิกซ์ แต่ลดผลจาก steric effect เพื่อเพิ่มคุณสมบัติการเป็นยูนิเวอร์ซอลเบส ก็คือการรักษาคุณสมบัติการที่มีค่าไดโพลโมเมนต์ที่สูงไว้แต่ลดความเกะกะลง เช่นการแทนที่ด้วยหมู่ไซยาโน ($-\text{CN}$) ซึ่งมีค่าไดโพลโมเมนต์สูงรองจากหมู่ไนโตร (คำนวณด้วยโปรแกรม Gaussian 03) แต่มีความเกะกะน้อยกว่าหมู่ไนโตร โดยพบว่า steric volume ของกลุ่มไนโตรมีค่าประมาณ 0.40 ในขณะที่หมู่ไซยาโนมี steric volume เท่ากับ 0.35 [63] ซึ่งน่าจะเพิ่มคุณสมบัติการเป็นยูนิเวอร์ซอลเบสที่ดี แสดงในภาพ 63



ภาพ 63 ค่าไดโพลโมเมนต์ของ 3,6-Dinitrocarbazole (56) และ 3,6-Dicyanocarbazole (57)

อีกหนึ่งแนวทางในการเพิ่มความแข็งแรงของ โครงสร้างแบบดูเพล็กซ์ ของ 3-Nitrocarbazole สามารถทำได้โดยการเพิ่มค่าไดโพลโมเมนต์ที่หมู่ไนโตร โดยการเพิ่มหรือขยาย พันธะของหมู่ไนโตรด้วยพันธะคู่หรือพันธะสาม แสดงในภาพที่ 64 ซึ่งจะทำให้ stacking interaction เพิ่มขึ้นในขณะที่ความเป็นยูนิเวอร์ซอลเบสที่ดียังคงเดิม โดย steric effect ที่เกิดขึ้น น่าจะมีผลน้อยมาก ทั้งนี้เนื่องจาก โครงสร้างอนุพันธ์ชนิดใหม่ของ 3-Nitrocarbazole จะเลือกด้าน ที่มีความเกะกะน้อยที่สุดเข้าข้างในโครงสร้างแบบดูเพล็กซ์ และด้านที่มีความเกะกะมากไว้ข้าง นอกโครงสร้างแบบดูเพล็กซ์ ซึ่งจะเป็นกลุ่มที่มีความสามารถในการดึงอิเล็กตรอนได้ดี และ เหนี่ยวนำให้เกิด stacking ได้ดีและส่งผลให้ความแข็งแรงของโครงสร้างแบบดูเพล็กซ์เพิ่มขึ้น



ภาพ 64 การขยายพันธะของ Nitrocarbazole

จากข้อมูลการศึกษาที่ได้เป็นการศึกษาในระบบโครงสร้างแบบดูเพล็กซ์ของ PNA:DNA ซึ่งยังไม่สามารถนำไปใช้ในการทำ PCR ได้จริง ดังนั้นเพื่อให้สามารถมีการนำไปใช้ประโยชน์ได้จริง ควรมีการศึกษาเพิ่มเติมในระบบโครงสร้างแบบดูเพล็กซ์ของ DNA:DNA และศึกษาว่าความเป็นยูนิเวอร์ซอลเบสยังดีเหมือนเดิมหรือไม่เมื่อเทียบกับใน PNA

