ธีระพงษ์ พวงมะลิ. 2562. **สมบัติเชิงแม่เหล็กของอนุภาคนาโน Fe_3O_4/Au ที่มีโครงสร้างแบบคอร์/เชลล์: การศึกษาเชิงทฤษฎีเพื่อการประยุกต์ในการนำส่งยา**
สาขาวิชาวัสดุศาสตร์และนาโนเทคโนโลยี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น.
นักวิจัยที่ปรึกษา: ศาสตราจารย์ ดร.สุภา หาญหนองบัว

บทคัดย่อ

การศึกษาอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคทองที่มีโครงสร้างระดับนาโนและเยื่อหุ้มเซลล์ของสิ่งมีชีวิตจัดเป็นการศึกษาพื้นฐานที่เป็นประโยชน์ต่อการประยุกต์ในด้านการแพทย์ระดับนาโน ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาอันตรกิริยาดังกล่าวโดยการจำลองแบบด้วยพลวัตเชิงโมเลกุลแบบคอสเกรนเพื่อศึกษากลไกการเข้าสู่เซลล์ของอนุภาคทองที่มีโครงสร้างระดับนาโน (อนุภาคนาโนทองทรงกลม นาโนเคจ นาโนรอท นาโนเพลท และนาโนเฮกซะพอท) โดยแบบจำลองของเยื่อหุ้มเซลล์ที่ศึกษาในงานวิจัยนี้มีความซับซ้อนมากและใกล้เคียงกับระดับความซับซ้อนของเยื่อหุ้มเซลล์ของสัตว์เลี้ยงลูกด้วยนม จากการศึกษาเชิงเปรียบเทียบระหว่างแบบจำลองที่มีความซับซ้อนสูงและมีส่วนประกอบคล้ายเยื่อหุ้มเซลล์จริงกับแบบจำลองเยื่อหุ้มเซลล์อย่างง่ายที่ประกอบด้วยลิปิดเพียง 2 ประเภท พบว่าความซับซ้อนของแบบจำลองเยื่อหุ้มเซลล์ส่งผลต่อกลไกการเข้าสู่เซลล์ของอนุภาคนาโนทอง นอกจากนี้พบว่าการรวมกลุ่มกันของอนุภาคนาโนทองส่งผลให้อนุภาคนาโนเข้าสู่เซลล์ได้ลดลง นอกจากนี้พบว่ารูปทรง ขนาด และประจุบนพื้นผิวของอนุภาคนาโนมีผลต่อการเข้าสู่เซลล์เช่นกัน โดยพบว่านาโนเฮกซะพอทสามารถเข้าสู่เซลล์ได้ด้วยอัตราสูงสุดเมื่อเปรียบเทียบกับรูปทรงอื่น ๆ ผลการศึกษาของงานวิจัยนี้นำไปสู่ความเข้าใจผลของขนาด รูปทรง ประจุบนพื้นผิว และการรวมกลุ่มกันของอนุภาคนาโนต่อกลไกและอัตราการเข้าสู่เซลล์ของอนุภาคนาโนทอง ซึ่งมีประโยชน์อย่างมากต่อการพัฒนาการนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโน

Theerapong Puangmali. 2019. **Magnetic Properties of Fe_3O_4/Au Core/Shell Nanoparticles: A Theoretical Study for Magnetic Drug Targetting.**
Materials Science and Nanotechnology Program, Faculty of Science,
Khon Kaen University.
Mentor: Prof. Dr. Supa Hannongbua

ABSTRACT

The study of interactions between Au nanostructures and living cells is a fundamental aspect that can be applied for the promising applications in nanomedicine. In the present work, we performed coarse-grained molecular dynamics (MD) simulations to observe the internalization pathways of Au nanostructures (nanosphere, nanocage, nanorod, nanoplate, and nanohexapod) into an idealized mammalian plasma membrane at an unprecedented level of complexity. Compared with the simple lipid bilayer model consisting of two lipid species, the different cellular uptake pathways of the AuNP were found. We highlight that the complexity of the lipid bilayer models plays an important role in the uptake pathway of nanoparticles (NPs). The permeability of aggregated AuNPs was much less than the NP counterpart. Spherical AuNPs showed pronounced size and surface charge dependence in their translocation through the plasma membrane. The translocation rates of different Au nanostructures were also evaluated and we found that Au nanohexapod exhibited highest cellular uptake. Understanding the interrelationship between size, shape, surface charge, and aggregation of Au nanostructures provides a clear view on the design of Au nanostructures for developing new diagnostic strategies and drug delivery.