

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: MRG5380266

ชื่อโครงการ: การจำลองแบบเชิงคณิตศาสตร์เพื่อศึกษาการดูดซึมอนุภาคนาโน
เมตรเข้าสู่ร่างกาย

ชื่อนักวิจัย และสถาบัน: ดร.ดวงกมล เป้าวัน ภาควิชาคณิตศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์
มหาวิทยาลัยมหิดล

อีเมล: scdbw@mahidol.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 15 มิถุนายน 2553 – 14 มิถุนายน 2554

บทคัดย่อ:

จุดขายของสินค้าและผลิตภัณฑ์ในปัจจุบันคือการผสมอนุภาคนาโนเมตรลงไป
สินค้า โดยทั้งผู้ผลิตและผู้บริโภคต่างเชื่อว่าอนุภาคนาโนเมตรนี้จะทำให้สินค้าที่ได้มี
ประสิทธิภาพดีขึ้น เช่น การเติมสารนาโนในผงซักฟอกซึ่งจะทำให้สิ่งสกปรกไม่เกาะติดเสื้อผ้า
และทำให้เสื้อผ้ายับยาก และการเติมโมเลกุลขนาดนาโนเมตรลงในเครื่องสำอางซึ่งจะทำให้
เครื่องสำอางนั้นมีประสิทธิภาพซึมผ่านผิวหนังได้ดีขึ้น เป็นต้น อย่างไรก็ตามยังไม่มีข้อมูลใด ๆ
ที่ยืนยันว่าโมเลกุลขนาดนาโนเมตรนี้จะไม่มีผลกระทบต่อสิ่งมีชีวิตและสิ่งแวดล้อม งานวิจัยนี้มี
จุดประสงค์เพื่อศึกษากลศาสตร์ของการดูดซึมอนุภาคนาโนเมตรเข้าสู่ร่างกายผ่านทาง
ผิวหนัง โดยพิจารณาพลังงานของระบบด้วยการใช้สมการของเลนาท-โจนส์ และกำหนดให้
โมเลกุล C60 หรือที่เรียกว่าฟูลลีนเป็นตัวแทนของอนุภาคนาโนเมตร และสมมติให้เยื่อ
เลือกผ่านไขมันเป็นตัวแทนของผิวหนังของสิ่งมีชีวิต จากการศึกษาพบว่าระยะห่างของเยื่อเลือก
ผ่านไขมัน 2 ชั้นที่ประกบกันจะมีเสถียรภาพมากที่สุดเมื่อระยะห่างเป็น 3.36 Å และเมื่อ
กำหนดให้มีช่องว่างวงกลมบนเยื่อเลือกผ่านเพื่อให้ฟูลลีนเคลื่อนที่ผ่านเข้าไป ช่องว่างนี้ควรมี
รัศมีอย่างน้อย 6.81 Å และเมื่อรัศมีของวงกลมนี้ใหญ่ขึ้นฟูลลีนจะเคลื่อนที่เข้าไปอยู่บริเวณ
กึ่งกลางของเยื่อ 2 ชั้นนี้ และในกรณีที่ไม่มีแรงภายนอกมากระทำฟูลลีนจะไม่สามารถเคลื่อนที่
ผ่านเยื่อเลือกผ่านเพื่อเข้าสู่ร่างกายได้

คำหลัก : แบบจำลองคณิตศาสตร์, นาโนเทคโนโลยี, สมการเลนาท-โจนส์, เยื่อเลือกผ่าน

ไขมัน, C60 ฟูลเลอรีน

Abstract

Project Code : MRG5380266

Project Title : Mathematical modelling for the absorption of nano-particles into human skin

Investigator : Dr.Duangkamon Baowan, Department of Mathematics, Faculty of Science, Mahidol University

E-mail Address : scdbw@mahidol.ac.th

Project Period : 15 June 2010 – 14 June 2011

Abstract:

Significant media attention has been given to novel applications for products that contain nano-scale materials. It is believed that the nanoparticles will enhance the performance of many products, such as stain and wrinkle resistant textiles and to provide improved cosmetics. However, there is no confirmed evidence that these nanoparticles will not have any side-effects to the human and natural environment. This project aims to mathematically model the absorption and penetration mechanisms of nanoparticles through the skin. We investigate the energy behaviour of a C60 fullerene interacting with a lipid bilayer. Using the 6-12 Lennard-Jones potential function and the continuous approximation, the equilibrium spacing between the two layers of a bilayer is predicted to be 3.36 Å. On assuming that there is a circular hole in the lipid bilayer, a relation for the molecular interaction energy is determined, involving the circular radius b of the hole and the perpendicular distance Z of the spherical fullerene from the hole. We observe that a C60 fullerene first penetrates through a lipid bilayer when $b > 6.81$ Å, and as the hole radius increases further it moves to the centre of the bilayer and remains there for increasing hole radii. Accordingly, our modelling indicates that at least

for the system with no external forces, the C60 fullerene will not penetrate through the lipid bilayer but rather remains encased between the two layers at the mid-plane location.

Keywords : Mathematical model, Nanotechnology, Lennard-Jones potential, Lipid bilayer, C60 fullerene