

Abstract

The selective separation and purification of biological molecule is importance in the food and pharmaceutical industries. This project aims to determine the adsorption energy of proteins onto/in nano-materials. The relation between a biomolecule size and a nanoporous radius is examined to optimize the adsorption energy. Once we obtain a pure or a selective biological molecule(s), the loading of such molecule on other type of nanoparticles is determined as a first step to design a cargo in drug delivery system. An energy behaviour for the interaction between protein and nanoparticle is studied. On utilizing a continuous approximation, the electrostatic and van der Waals interactions can be analytically expressed using the integral technique. The Columbic function is employed as a force field for the electrostatic energy and the 6-12 Lennard-Jones function is utilized to determine the van der Waals interaction. This mathematical model can help a trial and error process in an experiment and might be viewed as a first to design a drug molecule in a pharmaceutical industry.

Keywords: Biomolecules, Continuum approximation, Interaction energy, Mathematical model

บทคัดย่อ

การคัดเลือกและการทำให้โมเลกุลทางชีวภาพบริสุทธิ์เป็นเรื่องที่สำคัญในอุตสาหกรรมอาหารและยา โครงการนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาการดูดซับโปรตีนบนวัสดุที่มีขนาดนาโนเมตร โดยพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานของระบบ ขนาดของโปรตีน และรัศมีของท่อนาโนเมตรที่ใช้ในการคัดแยกสาร เมื่อเราได้โมเลกุลทางชีวภาพที่คัดแยกออกมาแล้ว เราจะพิจารณาการบรรจุโมเลกุลดังกล่าวลงในแคปซูลขนาดจิ๋วและพิจารณาการเคลื่อนที่ของโมเลกุลผ่านเยื่อไขมัน ซึ่งเป็นขั้นตอนแรกในการออกแบบระบบการจัดส่งยา ในที่นี้พลังงานสำหรับการปฏิสัมพันธ์ระหว่างโปรตีนและอนุภาคนาโนที่ใช้คือพลังงานไฟฟ้าสถิต (Electrostatic) ที่เกิดจากฟังก์ชันคูลอมบ์ (Columbic potential) และแรงระหว่างโมเลกุล (Van der Waal) ที่เกิดจากฟังก์ชันเลนาท-โจนส์ (Lennard-Jones potential) และใช้สมมติฐานของความต่อเนื่องในการหาพลังงานรวมของระบบ ซึ่งแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ได้จากงานวิจัยชิ้นนี้สามารถช่วยลดขั้นตอนการสุ่มทดลองในห้องปฏิบัติการ และอาจถือได้ว่าแบบจำลองนี้เป็นพื้นฐานในการออกแบบระบบการส่งโมเลกุลยาเข้าสู่ร่างกายสำหรับอุตสาหกรรมยาได้อีกด้วย