

ตุลยวัต ครูทแก้ว : ผลของอะตอมหนักต่อการข้ามสถานะพลังงานของสารประกอบเชิงซ้อนโบรอนไดฟลูออไรด์ฟออร์มาซาเนต (Heavy Atom Effect on Intersystem Crossing of a Boron Difluoride Formazanate Complex-Based Photosensitizer) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.อัญญาณี คำแก้ว, 70 หน้า

คำสำคัญ: การรักษามะเร็งผ่านการกระตุ้นด้วยแสง, สารประกอบเชิงซ้อนโบรอนไดฟลูออไรด์ฟออร์มาซาเนต, ผลกระทบอะตอมหนัก, การสร้างออกซิเจนเชิงเดี่ยว, TD-DFT

วิธีการรักษามะเร็งด้วยกระบวนการเหนี่ยวนำให้สารไวแสงผลิตสารที่เป็นพิษต่อเซลล์มะเร็งเป็นวิธีรักษาโดยใช้สารเคมีที่ตอบสนองต่อแสง ซึ่งจะเกี่ยวข้องกับการใช้แสงในการกระตุ้นสารที่ตอบสนองต่อแสงที่ได้รับ การรักษาด้วยวิธีนี้เป็นหนึ่งในทางเลือกสำหรับการรักษาโรคมะเร็ง โดยเป็นเทคนิคที่ไม่รุกรานเซลล์ปกติ โดยการศึกษาใช้ข้อดีของผลกระทบของอะตอมหนักในการปรับเปลี่ยนโครงสร้างของสารเรืองแสงกลุ่มฟออร์มาซาน เพื่อเพิ่มความสามารถในการข้ามระดับพลังงานระหว่างระดับชั้นพลังงานสถานะกระตุ้น เพื่อบรรลุเป้าหมายในการเพิ่มความสามารถในการสร้างออกซิเจนเชิงเดี่ยวที่สถานะกระตุ้นเพื่อประโยชน์ในการรักษารูปแบบนี้ ในวิทยานิพนธ์นี้เสนอสองวิธีสำหรับการสังเกตการณ์การสร้างออกซิเจนเชิงเดี่ยวที่สถานะกระตุ้นที่ถูกส่งเสริมมาจากการข้ามระดับชั้นพลังงานที่ระดับชั้นพลังงานสถานะกระตุ้นของสารประกอบเชิงซ้อนที่ถูกสังเคราะห์ขึ้นมา โดยวิธีที่หนึ่งคือการติดตามการสลายตัวของ DPBF จากการสร้างออกซิเจนเชิงเดี่ยวที่สถานะกระตุ้น และวิธีที่สองเป็นการคำนวณเส้นโค้งพลังงานศักย์สำหรับกลไกการเกิดปฏิกิริยาทางแสงของสารเรืองแสงโบรอนไดฟลูออไรด์ฟออร์มาซาเนต โดยใช้วิธี DFT และ nudged elastic band (NEB) โดยในการทดลองนั้นพบว่าคุณสมบัติทางแสงที่ถูกศึกษาด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี และการ X-ray ผลโดยรวมไปถึงการคำนวณ DFT ซึ่งผลทางการทดลองทั้งในเชิงทฤษฎี และการทดสอบเซลล์ในหลอดทดลองได้ยืนยันความสามารถของสารไวแสงที่มีไอโอดีนติดอยู่ในการรักษามะเร็งผ่านการกระตุ้นด้วยแสงหรือที่เรียกว่าการรักษาแบบโฟโตไดนามิก

สาขาวิชาเคมี
ปีการศึกษา 2567

ลายมือชื่อนักศึกษา
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

Tunyawat Khrootkaew


TUNYAWAT KHROOTKAEW : HEAVY ATOM EFFECT ON INTERSYSTEM CROSSING
OF A BORON DIFLUORIDE FORMAZANATE COMPLEX-BASED PHOTSENSITIZER.
THESIS ADVISER : ASSOC. PROF. ANYANEE KAMKAEW, Ph.D. 70 PP.

Keywords: Photodynamic therapy • Boron difluoride formazanate complex • Heavy atom effect • Singlet oxygen generation • TD-DFT

Photodynamic therapy (PDT) is a photochemical-based treatment approach that involves using light to activate photosensitizers (PSs). Attractively, PDT is one of the alternative cancer treatments due to its noninvasive technique. By utilizing the heavy atom effect, this work modified a class of formazan dyes to improve intersystem crossing (ISC) with the goal of enhancing reactive oxygen species (ROS) generation for PDT treatment. Two methods were used to observe the ROS generation enhanced by ISC of the synthesized complexes including, (i) recording DPBF decomposition caused by the ROS, and (ii) calculating the potential energy curves for photophysical mechanisms of BF_2 -formazanate dyes using the DFT and nudged elastic band (NEB) methods. The photophysical properties of the dyes were studied using spectroscopic techniques and X-ray crystallography, as well as DFT calculations. The experimental and theoretical results and in vitro cellular assays confirmed the potential use of the newly synthesized iodinated BF_2 -formazanate dyes in PDT.

School of Chemistry
Academic Year 2024

Student's Signature Tunyawat Khrootkaew
Advisor's Signature 